

激波管壁 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 和 $C^2\Pi_g - X^2\Sigma^+$ 带系辐射光谱的研究

彭志敏, 杨乾锁*, 刘春, 竺乃宜, 姜宗林

中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室, 北京 100190

摘要 爆轰驱动过程中产生的高温高压气流对铝质膜片、激波管壁产生烧蚀和冲刷作用, 以致激波管壁、端盖上附有氧化铝等杂质, 而高温下 AlO 自由基在气体分子的高速碰撞下被激发并产生强烈的辐射, 从而干扰了高温气体辐射光谱的分析。用爆轰驱动加热技术将空气加热到 4 000~7 000 K, 利用多通道光学分析仪对 AlO 自由基辐射光谱进行分析, 实验发现在 460~530 nm 波长范围内有多支辐射非常强烈的 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ ($T_{00} = 20\,689\text{ cm}^{-1}$) 带系辐射谱带, 且每支谱带都由多个带头组成, 带头间隔约为 2 nm, 带头处于高频位置并向低频方向伸延。通过实验与理论计算相结合, 重点分析了 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射光谱的结构特征。AlO 自由基 $C^2\Pi_g - X^2\Sigma^+$ ($T_{00} = 33\,047\text{ cm}^{-1}$) 带系辐射光谱处于 270~335 nm 波长范围内, 其辐射强度相对于 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系较弱, 并且与 OH 基 $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ ($T_{00} = 32\,682\text{ cm}^{-1}$) 带系辐射光谱互相干扰而难以分辨, 对该波段高温空气的辐射光谱分析产生不利的影响。

关键词 激波管; 高温气体; 光学多通道分析仪; 分子光谱; AlO 自由基

中图分类号: O432 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2010)04-0865-04

引言

几十年来国内外利用激波管、激波风洞等模拟设备对高温空气平衡态、非平衡态辐射光谱特性做了很多研究工作, 如 NO 的 χ , β , $O_2(SR)$, $N_2(1+)$, $N_2(2+)$ 以及 $N_2^+(1+)$ 等辐射光谱^[1-10]; 但由于爆轰驱动产生的高温高压气流对铝质膜片、激波管壁产生烧蚀和冲刷作用, 以致激波管壁、端盖上附有氧化铝等杂质^[11,12], 而高温下 AlO 自由基被激发到高能级电子态($A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Pi$, $D^2\Sigma^+$), 当电子再次跃迁到低能级($X^2\Sigma^+$ 和 $A^2\Pi$)时对外产生强烈的辐射^[13-17]。

本实验利用爆轰驱动加热技术将激波管⑤区空气瞬间加热到 4 000~7 000 K, 在⑤区气体分子的高速碰撞下, AlO 自由基被激发并对外产生强烈的辐射, 通过多通道光学分析仪(OMA)对其辐射光谱进行分析, 实验发现 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射光谱非常强烈, 完全覆盖了该波段高温空气的辐射光谱, 且每支谱带都由多个带头组成, 带头间隔约为 2 nm, 带头处于高频位置并向低频方向伸延, 同时随着⑤区高温空气温度的升高, 谱带向低频方向伸延的范围增

大, 谱带增宽; 而 AlO 自由基 $C^2\Pi_g - X^2\Sigma^+$ 带系辐射强度相对较弱, 且与 OH 基 $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ 带系辐射光谱互相干扰, 从而影响该波段高温空气的辐射光谱分析。

1 实验方案

实验方案如图 1 所示, 采用激光点火、氢氧爆轰驱动方式^[18]。膜片为铝质材料, 厚度为 0.1 mm, 膜片刻有十字刻痕, 但由于膜片刻痕深度的不确定性易导致膜片被撕碎、烧蚀, 从而附着在激波管壁和端盖处。

激波管的实验段尾部侧翼安装有 CaF_2 窗口, 压力传感器 A, B 和 C 用来测量激波速度, 并判断激波的运行状态是否稳定, 其中压力传感器 C 还用来触发 OM A 的延时电子快门, 延时时间和曝光时间均可以调节, 使得 OM A 能准确记录设定时刻的辐射光谱, 根据实验需要可选取 600 或 1 200 lines $\cdot \text{mm}^{-1}$ 光栅。

2 实验结果及分析

实验结果表明, 在 4 000~7 000 K 高温下, 在 460~530

收稿日期: 2009-06-08, 修订日期: 2009-09-16

基金项目: 国家自然科学基金项目(10772187)资助

作者简介: 彭志敏, 1981 年生, 中国科学院力学研究所博士研究生

* 通讯联系人 e-mail: qsyang@imech.ac.cn

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

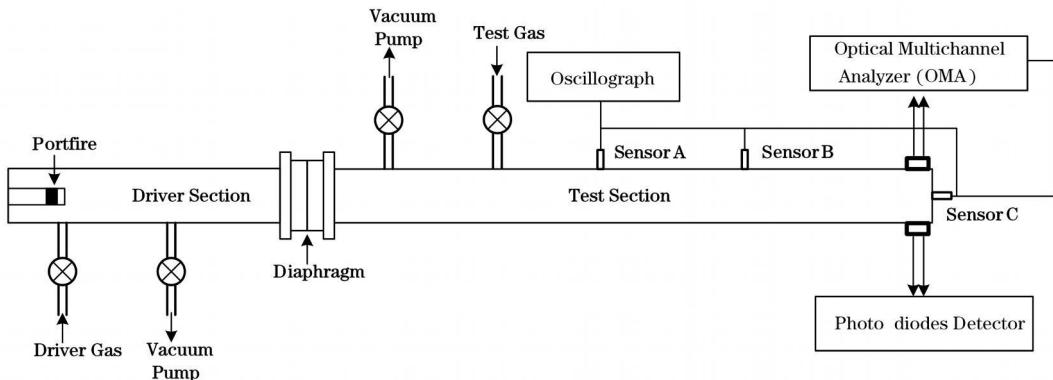
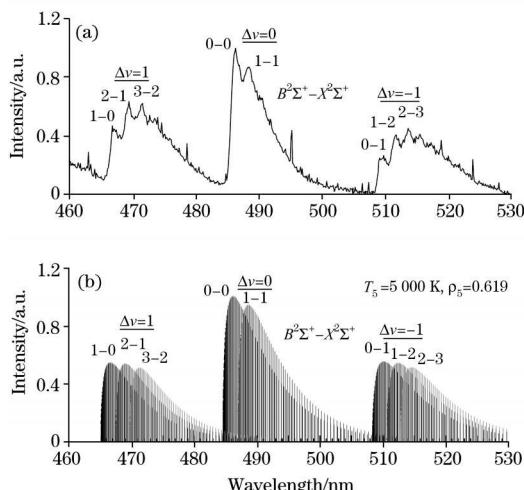


Fig 1 Experimental diagram of shock tube and optical multichannel analyzer

nm 波长范围内有多支 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射谱带, 其辐射光谱非常强烈, 完全覆盖了该波段高温空气的辐射光谱, 图 2 为 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射光谱的试验(600 lines

Fig 2 Spectra of $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ bands for AlO radical

(a): Shock tube experiment; (b): Numerical calculation

mm^{-1} 光栅)与理论计算结果, 实验状态及电子能级间的跃迁标记在图 2 中^[13], T_5 和 ρ_5 分别为激波管⑤区高温空气的温度和密度。 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射光谱的中心波长为 484.35 nm, 由于 $B^2\Sigma^+$ 态能级较低, 电子在较低的温度下即可激发到 $B^2\Sigma^+$ 态上, 因此 $B^2P^+ - X^2\Sigma^+$ 带系是 AlO 自由基最主要的辐射谱带。

由图 2(a) 可知, AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系在 460~530 nm 波长范围内有三支非常强烈的辐射谱带($\Delta\nu = 1, 0, -1$), 其中 $\Delta\nu = 0$ 支谱带辐射强度最大, 其强度约为其他两支谱带的两倍, 这是由于 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系中 0-0 跃迁概率较大且 $\dot{\nu} = 0$ 为 $B^2\Sigma^+$ 态最低振动能级; $\Delta\nu = 1, 0, -1$ 三支谱带都是由多个带头组成, 带头间隔约为 2 nm, 且各支谱带的带头均处于高频位置并向低频方向伸延, 这是由转动常数 $B'_e < B''_e$ 决定的(B'_e 和 B''_e 分别为高、低能级转动常数)^[19]。

图 2(b) 为 AlO 自由基的 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系在 5 000 K 时的理论计算光谱, 在计算 AlO 自由基电子跃迁波长时, 由于 $\Delta E_{\text{转动}} \ll \Delta E_{\text{振动}} \ll \Delta E_{\text{电子}}$, 可先略去转动情况, 其计算结果如表 1 所示。

Table 1 Wavelengths for AlO radical $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ and $C^2\Pi_F - X^2\Sigma^+$ bands

Wavelength/nm $\dot{\nu}$	$B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$					$C^2\Pi_F - X^2\Sigma^+$					
	0	1	2	3	4	0	1	2	3	4	
$\ddot{\nu}$	0	484.35	464.94	447.16	430.84	415.80	302.25	294.78	287.74	281.09	274.80
	1	508.07	486.75	467.31	449.51	433.16	311.32	303.40	295.95	288.92	282.28
	2	533.84	510.34	489.01	469.56	451.75	320.80	312.40	304.51	297.07	290.06
	3	561.90	535.93	512.45	491.13	471.68	330.73	321.81	313.44	305.56	298.15
	4	592.57	563.76	537.84	514.41	493.11	341.12	331.64	322.75	314.41	306.57
	5	626.23	594.14	565.42	539.58	516.19	352.01	341.92	332.49	323.64	315.34

图 2 中 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系理论计算光谱强度分布与实验所得到的光谱强度分布几乎完全相同; 当 $\Delta\nu$ 相同时, 电子跃迁频率非常接近, 其带头间隔约为 2 nm 左右, 同时由于转动能级热分布以及 OMA 分辨率的影响, 以致相同 $\Delta\nu$ 的辐射谱带互相重叠而难以分辨, 仅能分辨出各个振动带的带头。

在计算 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射光谱强度分

布及其精细结构时, 需要考虑转动能级的热分布, 其分布公式为

$$N_J = N \frac{hcB}{kT} (2J + 1) e^{-BJ(J+1)hc/kT}$$

式中: J 为转动能级, N_J 为 J 转动能级粒子数、 N 为粒子总数, B 为转动常数, h 和 k 分别为普朗克、波尔兹曼常数, T 为温度。

从转动能级的热分布公式可知, 在同一个温度下, 各个不同转动能级中的粒子数 N_J 随着转动能级 J 的增大逐渐增大, 并且达到一个最大值后再逐渐减小, 对应的最大的转动能级 $J_{\max} = \sqrt{\frac{kT}{2Bhc}} - \frac{1}{2} = 0.5896 \sqrt{\frac{T}{B}} - \frac{1}{2}$; 另外随着温度的升高, 高转动能级 J 中的分子数 N_J 越多, J_{\max} 也在增大, 谱带向低频方向伸延的越长, 谱带宽度也就越宽, 图 3 中 A 和 B 谱带分别表示不同温度下 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ ($\Delta\nu = 0$) 带系辐射光谱, 其中谱带 B 的宽度明显大于谱带 A 的宽度, 转动光谱的这种特征也是确定转动温度的一种方法。

AlO 自由基中 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射强度最大, 而 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系中 $\Delta\nu = 0$ 支谱带辐射强度最大, 其辐射光谱如图 3 所示(1 200 lines \cdot mm $^{-1}$ 光栅), 由于 0-0 和 1-1 振动态电子跃迁波长间隔在 2 nm 左右, 同时由于转动能级热分布的影响, 以致 0-0 和 1-1 支辐射谱带在低频方向互相重叠而难以分辨, 在谱带的低频方向上可观测到多支转动谱线。

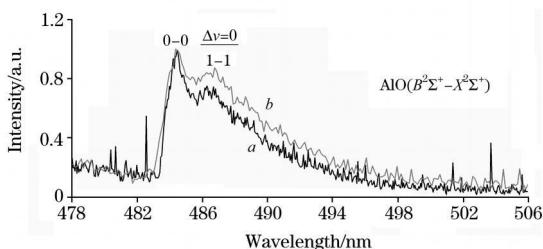


Fig 3 Experimental spectra of $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ band ($\Delta\nu = 0$) for AlO radical
a: $T_5 = 4750$ K, $\rho_5 = 0.50\rho_0$
b: $T_5 = 6000$ K, $\rho_5 = 0.54\rho_0$

AlO 自由基 $C^2\Pi_f - X^2\Sigma^+$ ($T_{\infty} = 33\,047$ cm $^{-1}$) 和 $D^2\Sigma^+ - A^2\Pi_f$ ($T_{\infty} = 34\,925$ cm $^{-1}$) 带系的辐射光谱处于 270~335 nm 波长范围内^[15-17], 但由于实验采用的空气中含有 H₂O 分子, H₂O 分子在高温下离解并生成 OH 基, 而 OH 基 $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_f$ ($T_{\infty} = 32\,682$ cm $^{-1}$) 带系辐射光谱也处于该波段范围内, 且其辐射非常强烈, 以致 AlO 自由基 $C^2\Pi_f - X^2\Sigma^+$, $D^2\Sigma^+ - A^2\Pi_f$ 和 OH 基 $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_f$ 带系辐射光谱互相干扰而

难以分辨, 如图 4 所示。

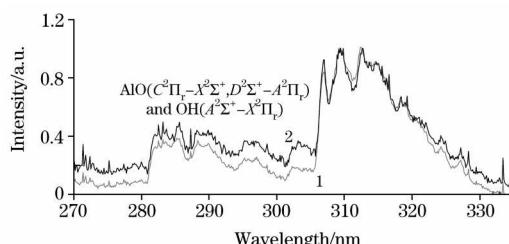


Fig 4 Experimental spectrum of AlO radical $C^2\Pi_f - X^2\Sigma^+$, $D^2\Sigma^+ - A^2\Pi_f$ and OH radical $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_f$ bands
a: $T_5 = 6500$ K, $\rho_5 = 0.58\rho_0$
b: $T_5 = 7000$ K, $\rho_5 = 0.63\rho_0$

AlO 自由基 $C^2\Pi_f - X^2\Sigma^+$ 和 $D^2\Sigma^+ - A^2\Pi_f$ 带系辐射光谱强度相对于 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系较弱, 其中 $D^2\Sigma^+ - A^2\Pi_f$ 带系最弱, 其主要是因为 $C^2\Pi_f$, $D^2\Sigma^+$ 电子态能级较高, 电子激发到 $C^2\Pi_f$ 和 $D^2\Sigma^+$ 态上需要更多的能量, 但其仍然影响了高温空气的辐射光谱分析。

3 讨 论

本实验利用爆轰生成的高温高压气流对铝质膜片产生烧蚀、冲刷作用, 以致激波管壁、端盖上附有氧化铝等杂质, AlO 自由基在气体分子的高速碰撞下被激发到高能级电子态 ($A^2\Pi_f$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Pi_f$, $D^2\Sigma^+$), 通过 OMA 对其辐射光谱进行分析, 实验发现在 460~530 nm 波长范围内 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射光谱非常强烈, 完全覆盖了该波段高温空气的辐射光谱, 本文通过实验与理论计算相结合, 重点分析了 AlO 自由基 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系辐射光谱的结构特征; 而 AlO 自由基 $C^2\Pi_f - X^2\Sigma^+$ 和 $D^2\Sigma^+ - A^2\Pi_f$ 带系辐射光谱处于 270~335 nm 波长范围内, 其辐射光谱强度相对于 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 带系较弱, 但也严重影响了该波段高温空气的辐射光谱分析; 同时由于 OH 基 $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_f$ 带系辐射光谱也处于该波段范围内, 且其辐射非常强烈, 以致 AlO 自由基 $C^2\Pi_f - X^2\Sigma^+$, $D^2\Sigma^+ - A^2\Pi_f$ 和 OH 基 $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_f$ 带系辐射光谱互相干扰而难以分辨。

参 考

文 献

- [1] James C Keck, John C Camm, Bennett Kivel, et al. Annals of Physics, 1959, 7: 1.
- [2] Chauveau S, Perrin M Y, Riviere P, et al. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2002, 72: 503.
- [3] Laux C O, Gessman R J, Kruger C H. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2001, 68: 473.
- [4] Dikran S B, Nigel K J, Chul P. AIAA 93-2800.
- [5] Harvel E B, Carl D S. AIAA 92-3030.
- [6] Mohammad A R, Larry H M, Carl D S. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1997, 11(4): 339.
- [7] Catherine Rond, Pascal Boubert, Jean Marie Félio, et al. Journal of Thermophysics and Heat Transfer 2007, 21(3): 638.
- [8] Kenji Abe, Tsuyoshi Kameyama, Hisashi Kihara. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2005, 19(4): 428.
- [9] Ken Takazawa. Journal of Molecular Spectroscopy, 2004, 223: 120.
- [10] Vladimir I M, Igor V K, Sergei A K. J. Chem. Phys., 2000, 252: 379.
- [11] LI Zhao-ning, DENG Xiang-dong(李招宁, 邓向东). Chinese Journal of High Pressure Physics(高压物理学报), 1992, 6(3): 221.
- [12] LI Zhao-ning, WANG Yong-guo(李招宁, 王永国). Journal of Atomic and Molecular Physics(原子与分子物理学报), 1996, 13(3): 312.

- [13] Sak sena M D, Deo M N, Sunanda K, et al. Journal of Molecular Spectroscopy, 2008, 247: 47.
- [14] Zenouda C, Blottiau P, Chambaud G, et al. Journal of Molecular Structure: Theochem., 1999, 458: 61.
- [15] Singh M, Sak sena M D. Can. J. Phys., 1983, 61: 1347.
- [16] Singh M, Sak sena M D. Can. J. Phys., 1985, 63: 1162.
- [17] Towle J P, James A M, Boure O L, et al. Journal of Molecular Spectroscopy, 1994, 163: 300.
- [18] YANG Qian suo, LIU Chun, PENG Zhimin, et al(杨乾锁, 刘春, 彭志敏, 等). Chinese Physics Letters(物理快报), 2009, 26: 065204.
- [19] Gerhard Herzberg. Molecular Spectra and Molecular Structure: Spectra of Diatomic Molecules. Beijing: Science Press, 1983.

Investigation on Spectrum of $B^2\Sigma^+$ - $X^2\Sigma^+$ and $C^2\Pi_g$ - $X^2\Sigma^+$ Bands of AlO Radical in Shock Tube

PENG Zhimin, YANG Qian suo*, LIU Chun, ZHU Naixi, JIANG Zonglin

Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Abstract There are some impurities such as aluminum dioxide adhering on the shock tube wall due to the ablating and heating of the aluminum diaphragm by high temperature gas. Under high temperature, the collision of AlO radicals with the gaseous molecules leads to transition of the electronic states and production of strong radiation, which disturb the analysis of radiation spectrum of heated gases in shock tube. In the authors' experiments, the air in the test section with adhering aluminum dioxide was heated to some 4 000~7 000 K, the spectrum of AlO radical was obvious in the range of 460~530 nm, which corresponds to $B^2\Sigma^+$ - $X^2\Sigma^+$ ($T_{00}=20\,689\text{ cm}^{-1}$) band. There were several band heads for this band, the interval of neighbor heads was some 2 nm, and all the band heads were with the shortest wavelength. The characteristics of $B^2\Sigma^+$ - $X^2\Sigma^+$ band were explored in experiment and by theory. In addition, the spectrum of $C^2\Pi_g$ - $X^2\Sigma^+$ ($T_{00}=33\,047\text{ cm}^{-1}$) band was also investigated. The corresponding strength was lower than that of $B^2\Sigma^+$ - $X^2\Sigma^+$ band, and the wavelength range of this band was some 270~335 nm where the radiation of $A^2\Sigma^+$ - $X^2\Pi$ ($T_{00}=32\,682\text{ cm}^{-1}$) band of OH radical also existed. This occurrence of the two bands in the same wavelength range is disadvantageous for the spectrum analysis.

Keywords Shock tube; Heated air; Optical multi channel analyzer; Molecular spectrum; AlO radical

(Received Jun. 8, 2009; accepted Sep. 16, 2009)

* Corresponding author