РЕЛАКСАЦИЯ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА В ПОСЛЕРАЗРЯДНОЙ ЗОНЕ РАЗРЯДА ПОСТОЯННОГО ТОКА

А. А. Кашубо, О. В. Кунова, Е. В. Кустова

Санкт-Петербургский государственный университет
Россия, Санкт-Петербург 199034, Университетская наб., д. 7-9
e-mail: kashuboaa@mail.ru

DOI: 10.30826/NEPCAP **EDN:** M

Изучение механизмов релаксации углекислого газа имеет фундаментальное значение для ряда важных областей, включая лазерные технологии, гиперзвуковую аэродинамику космических аппаратов и экологию в связи с задачами об изменении климата.

Данная работа посвящена моделированию релаксации углекислого газа в послеразрядной зоне разряда постоянного тока. Цель заключается в реализации самосогласованного расчета температуры газа и заселенностей колебательных уровней углекислого газа, валидации моделей описания колебательных энергообменов и выделении процессов, оказывающих наибольшее влияние на основные макропараметры.

Задача решалась применительно к условиям эксперимента [1], в котором импульсный разряд постоянного тока формировался в трубке импульсом длительностью $\Delta t = 5$ мс с силой тока 150 мА при давлении 5 торр. Поскольку моделирование охватывало исключительно послеразрядную зону, в качестве начальных условий использовались экспериментально измеренные значения температуры газа и колебательных температур в момент окончания разряда.

Задача предполагается осесимметричной, помимо этого газ считается однородным вдоль оси трубки, поэтому моделирование проводилось с использованием нульмерной системы газодинамических уравнений в поуровневом подходе [2]. Особенностью поуровневого подхода является рассмотрение каждого электронно-колебательного состояния частицы как отдельного сорта частиц. Такое детальное рассмотрение позволяет точно описывать различные энергообмены: колебательно-поступательные, колебательно-колебательные и колебательно-электронные.

При моделировании учитывались только колебательные энергообмены, без химических реакций. Для расчетов коэффициентов скорости энергообменов использовались модель Шварца–Славского–Герцфельда (SSH —

© Авторы, 2026 ©ТОРУС ПРЕСС, 2026

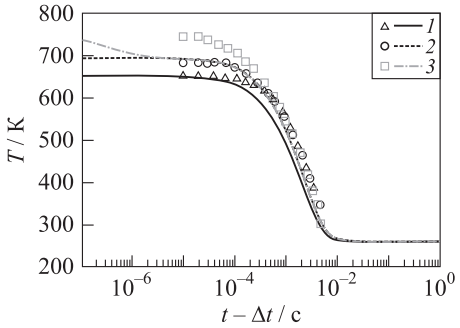


Рис. 1 Сравнение рассчитанных значений (кривые) температуры газа (*1*) и колебательных температур T_{12}^v (*2*) и T_3^v (*3*) с экспериментальными значениями (значки)

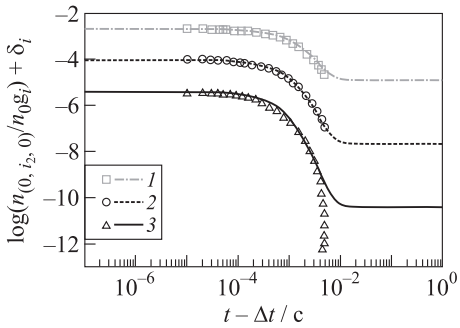


Рис. 2 Сравнение рассчитанных значений (кривые) заселенностей колебательных уровней ($i_2 = 0$, $i_3 = 0$) с экспериментальными значениями (значки): *1* — $i_2 = 2$; *2* — 3; *3* — $i_2 = 4$. Здесь n_0 — концентрация CO_2 в начальный момент времени $t = \Delta t$; g_i — статистический вес, соответствующий колебательному состоянию i; δ_i — добавка, позволяющая совместить начальные заселенности с экспериментальными значениями

Schwartz–Slawsky–Herzfeld) [3] и модель нагруженного гармонического осциллятора (FHO — forced harmonic oscillator) [4]. Сравнение с экспериментальными данными показало, что применение модели SSH не позволяет корректно описать колебательную температуру третьей моды, поэтому приведены результаты, полученные с использованием модели FHO.

Рассчитанные в ходе моделирования температура газа, а также колебательные температуры связанных первой и второй мод и антисимметричной третьей моды представлены на рис. 1. Числовые плотности (заселенности) отдельных колебательных состояний приведены на рис. 2. В целом смодели-

рованные характеристики демонстрируют хорошее согласие с экспериментальными данными. Однако температура газа начинает снижаться преждевременно, а колебательная релаксация между объединенными первой–второй модами и третьей модой протекает слишком быстро.

Кроме того, представлены результаты анализа чувствительности модели к числу учитываемых колебательных состояний углекислого газа и выделены основные каналы колебательной релаксации.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-19-00241-П).

Литература

1. *Klarenaar B. L. M., Engeln R., van den Bekerom D. C. M., van de Sanden M. C. M., Morillo-Candas A. S., Guaitella O.* Time evolution of vibrational temperatures in a CO_2 glow discharge measured with infrared absorption spectroscopy // Plasma Sources Sci. T., 2017. Vol. 26. P. 1–11.
2. *Melnik M. Y., Kashubo A. A., Kustova E. V.* Validation of state-to-state models of vibrational–chemical kinetics in the problem of air relaxation in the afterglow // Fluid Dyn., 2025. Vol. 60. P. 150.
3. *Schwartz R., Slawsky Z., Herzfeld K.* Calculation of vibrational relaxation times in gases // J. Chem. Phys., 1952. Vol. 20. No. 10. P. 1591–1599.
4. *Adamovich I. V., Macheret S. O., Rich J. W., Treanor C. E.* Vibrational energy transfer rates using a forced harmonic oscillator model // J. Thermophys. Heat Tr., 1998. Vol. 12. No. 1. P. 57–65.

CARBON DIOXIDE RELAXATION IN THE AFTERGLOW OF A DIRECT CURRENT DISCHARGE

A. A. Kashubo, O. V. Kunova, and E. V. Kustova

St. Petersburg State University
7-9 Universitetskaya Embankment, Saint Petersburg 199034, Russia
e-mail: kashuboaa@mail.ru

The study of carbon dioxide relaxation mechanisms is fundamental to several critical fields, including laser technologies, hypersonic spacecraft aerodynamics, and environmental research addressing climate change.

This work is devoted to modeling carbon dioxide relaxation in the afterglow of direct-current (DC) discharge. The objective is to implement a self-consistent calculation of the gas temperature and vibrational level populations of carbon dioxide, to validate models describing vibrational energy exchanges,

and to identify the processes that exert the most significant influence on the primary macroparameters.

The problem was solved under the experimental conditions reported in [1] where a pulsed DC discharge was generated in a tube using a pulse duration of $\Delta t = 5$ ms, a current of 150 mA, and a pressure of 5 Torr. Since only the afterglow zone was simulated, the experimentally measured gas temperature and vibrational temperatures at the pulse termination were adopted as the initial conditions.

The problem is assumed to be axisymmetric; furthermore, the gas is considered homogeneous along the tube axis. Consequently, the modeling was performed using a zero-dimensional system of gasdynamics equations within a state-to-state framework [2]. A key feature of the state-to-state approach is that each electronic-vibrational state of a particle is treated as a separate chemical species. Such a detailed formulation enables an accurate description of various energy transfer processes, including vibrational-translational, vibrational-vibrational, and vibrational-electronic exchanges.

Chemical reactions were neglected in the modeling; only vibrational energy transfer processes were considered. To calculate the rate coefficients of these energy exchanges, the Schwartz–Slawsky–Herzfeld (SSH) model [3] and the forced harmonic oscillator (FHO) model [4] were used. A comparison with experimental data showed that the SSH model fails to accurately describe the vibrational temperature of the third mode. Therefore, the presented results were obtained using the FHO model.

Overall, the calculated characteristics show good agreement with the experimental data. However, the gas temperature begins to decrease prematurely, and the vibrational relaxation between the coupled first–second modes and the third mode occurs too rapidly.

Furthermore, a sensitivity analysis of the simulation with respect to the number of carbon dioxide vibrational states taken into account and highlights the primary channels of vibrational relaxation is presented.

Acknowledgments

The study was supported by the Russian Science Foundation (project No. 23-19-00241-P).

References

1. Klarenaar, B. L. M., R. Engeln, D. C. M. van den Bekerom, M. C. M. van de Sanden, A. S. Morillo-Candas, and O. Guaitella. 2017. Time evolution of vibrational temperatures in a CO_2 glow discharge measured with infrared absorption spectroscopy. *Plasma Sources Sci. T.* 26:1–11.

2. Melnik, M. Y., A. A. Kashubo, and E. V. Kustova. 2025. Validation of state-to-state models of vibrational–chemical kinetics in the problem of air relaxation in the afterglow. *Fluid Dyn.* 60:150.
3. Schwartz, R., Z. Slawsky, and K. Herzfeld. 1952. Calculation of vibrational relaxation times in gases. *J. Chem. Phys.* 20(10):1591–1599.
4. Adamovich, I. V., S. O. Macheret, J. W. Rich, and C. E. Treanor. 1998. Vibrational energy transfer rates using a forced harmonic oscillator model. *J. Thermophys. Heat Tr.* 12(1):57–65.