

О выборе параметров модели Тринора-Маррона для поуровневых коэффициентов скорости диссоциации.

А.С. Савельев, Е.В. Кустова

Санкт-Петербургский Государственный Университет, Россия.
E-mail: aleksey.schumacher@gmail.com, elena_kustova@mail.ru

Течения разреженных газов активно исследовались в конце 20 – начале 21 века. Именно задачи науки и техники, в частности, развитие лазерных технологий, исследования космического пространства, сверхзвуковые полеты служат основанием для изучения сильных отклонений от состояния равновесия. В этом случае становятся необходимыми сведения о коэффициентах скорости обменов внутренней энергией и химических реакций [1].

Коэффициенты скорости диссоциации являются одним из характерных объектов исследований. При слабых отклонениях от термического равновесия можно использовать закон Аррениуса, но он неприменим при сильном колебательном возбуждении. В таком случае часто используются лестничная модель диссоциации и модель Тринора-Маррона, предполагающая диссоциацию с любого уровня. Простота их описания привела к достаточно широкому применению в инженерных расчетах. Однако, расчеты по этим моделям имеют серьезный недостаток – в ряде условий точность вычислений недостаточно высока. Обусловлена эта проблема использованием фиксированных значений параметров. Значительно более точные данные получают методами молекулярной динамики, но их проведение требует больших вычислительных мощностей. Бурное развитие компьютерных технологий привело к заметному прогрессу в этой области [2,3]. Одним из самых существенных результатов последнего времени является создание открытой электронной базы данных коэффициентов физико-химических процессов для разных атмосфер, опубликованная специалистами группы Капители (Университет Бари, Италия) в конце 2013 года [4]. Тем не менее, коэффициенты скорости диссоциации для большого числа уровней все еще остаются недостаточно изученными.

В предыдущей работе [5] были получены пределы применимости модели Тринора-Маррона и даны рекомендации по использованию фиксированных значений параметров. Целью данной работы является построение семейства параметрических функций, зависящих от температуры и энергетического уровня, пригодных для использования в расчетах по модели Тринора-Маррона. Эти функции должны иметь достаточно простой вид и обеспечивать результаты вычислений, эквивалентные результатам траекторных расчетов в широком диапазоне температур (до 20000 К). Получение функциональных зависимостей должно способствовать увеличению точности расчетов течений с неравновесными физико-химическими процессами.

Работа выполнена при финансовой поддержке СПбГУ, тема НИР 6.37.163.2014

Л и т е р а т у р а

1. Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Издательство С.-Петербургского университета, 2003. 272 с.
2. Esposito F., Capitelli M., Kustova E.V. et al. Rate coefficients for the reaction $N_2(i)+N=3N$: A comparison of trajectory calculations and the Treanor_Marrone model // Chem. Phys. Lett. 2000. Vol. 330. P. 207_211.
3. Armenise I., Esposito F., Capitta G., Capitelli M. O-O₂ state-to-state vibrational relaxation and dissociation rates based on quasiclassical calculations. Chemical Physics 351 (2008) 91_98.
4. Planetary Entry Integrated models. [Электронный ресурс]: <http://phys4entrydb.ba.imip.cnr.it/Phys4EntryDB/>
5. Савельев А.С., Кустова Е.В., Пределы применимости модели Тринора-Маррона для поуровневых коэффициентов скорости диссоциации N₂ и O₂ // Вестник СПбГУ, Серия 1. Вып. 1. 2015. Принято к публикации

On the choice of parameters for the Treanor-Marrone model of state-to-state dissociation rate coefficients

A.S. Savelev, E.V. Kustova

Saint-Petersburg State University, Russia

In this paper we discuss the models for the state-to-state dissociation rate coefficients. The rate coefficients are studied for (N₂, N) and (O₂, O) binary mixtures. Two approaches for the calculation of dissociation rate coefficients are compared: the Treanor-Marrone model and trajectory calculations based on the methods of quantum chemistry. Our objective is to find a functional dependence of the parameter U of the Treanor-Marrone which provides the rate coefficients equivalent to those obtained by trajectory calculations.