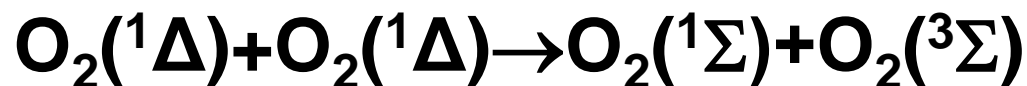




# Определение вероятности образования колебательно возбужденных молекул

кислорода в реакции



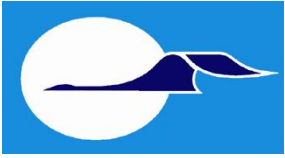
**Докладчик:**

**студент СГАУ, Малышев М.С.**

**Научный руководитель:**

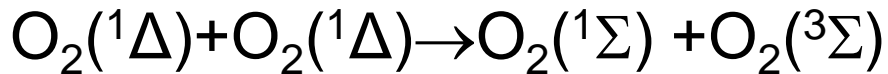
**д.ф.-м.н, профессор Загидуллин М.В.**





## Цель работы

Цель работы – получение максимальной оценки числа колебательных квантов образующихся в реакции



Практическое значение:

- Процессы в верхних слоях атмосферы
- Активная среда кислородно-йодного лазера



## Обзор литературы

Ранее полученные результаты:

R.G. Derwent, B.A. Thrush *Measurements on  $O_2(^1\Delta_g)$  and  $O_2(^1\Sigma_g^+)$  in Discharge Flow Systems* // Trans. Far. Soc. 1971. т.67. С. 2036-2043

$$(v = 1) p_1 = 0,05$$

U. Schurath *The energy pooling reaction  $2O_2(^1\Delta_g) \rightarrow O_2(^3\Sigma_g^-) + O_2(^1\Sigma_g^+)$ ; Formation, relaxation, and quenching of vibrationally excited  $O_2(^1\Sigma_g^+)$*  // Journal of Photochemistry. 1975. №4. С.215-226

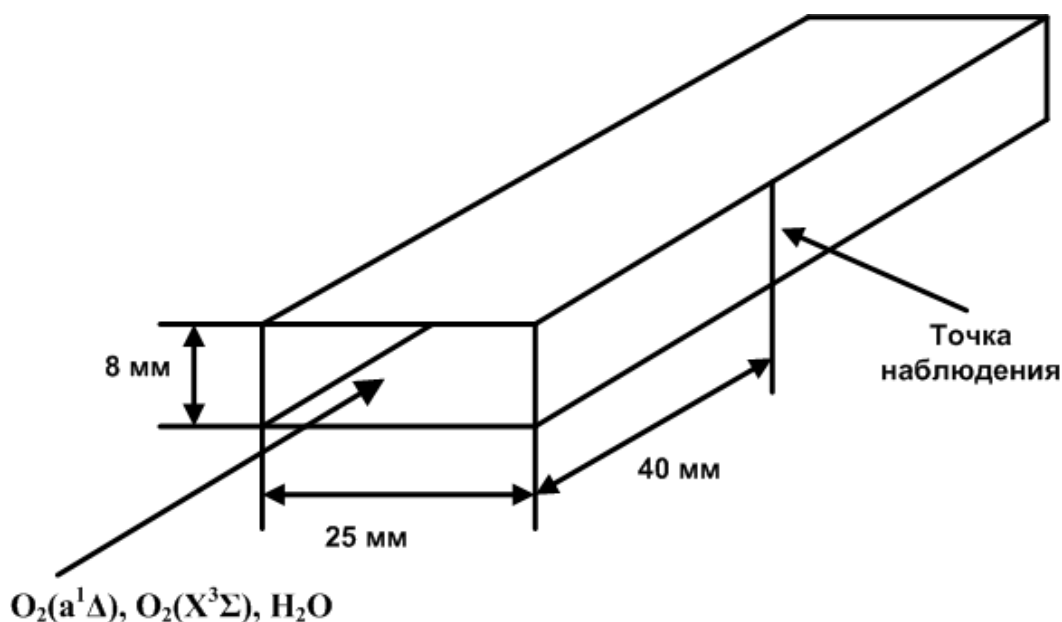
$$(v = 1) p_1 = 0,04$$

$$(v = 2) p_2 = 0,64$$



## Описание объекта исследования

М.В. Загидуллин *Неравновесное распределение колебательной энергии молекул  $O_2(^1\Sigma)$  в потоке газа  $O_2(^1\Delta)$ - $O_2$ - $H_2O$  на выходе химического генератора синглетного кислорода // Квантовая электроника. 2010. т.40 №9 С.794-799*



$$G=0,4 \text{ ммоль/с}$$

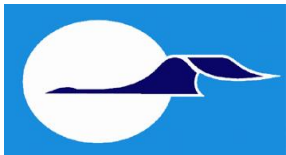
$$p=3465,8 \text{ Па}$$

$$T_0=310\text{K}$$

$$T_{wall}=288\text{K}$$

$$X_a=0.42$$

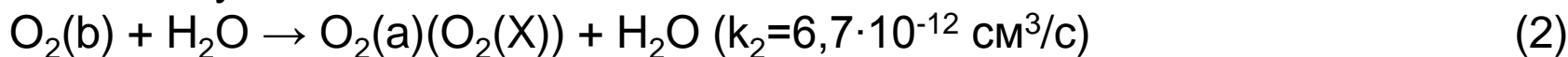
$$F_w=10^{-4}..10^{-2}$$



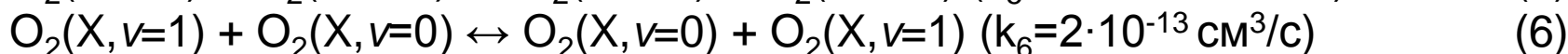
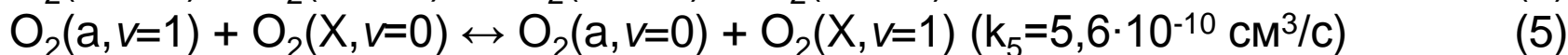
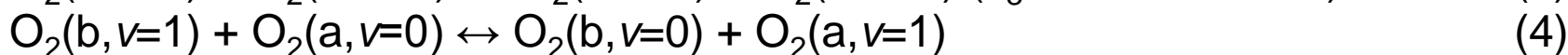
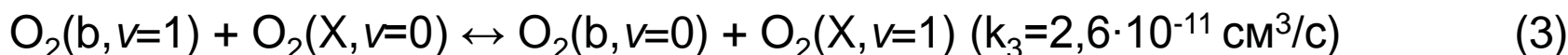
## Постановка задачи



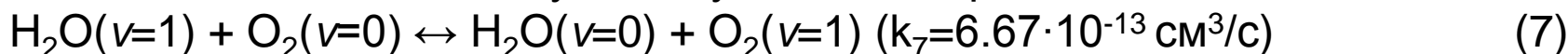
Реакция тушения:



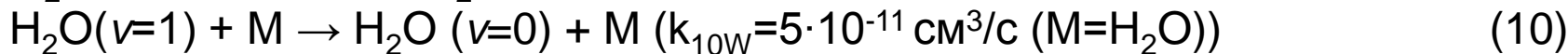
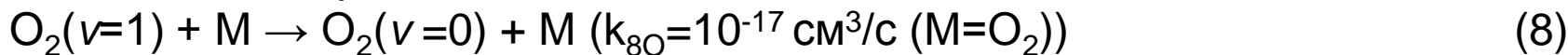
Резонансные обмены колебательными квантами:



Резонансный обмен между молекулами кислорода и воды:



Колебательная релаксация:





# Решение задачи. COMSOL Multiphysics

Уравнение Навье-Стокса:

$$\rho \bar{u} \cdot \nabla \bar{u} = \nabla \left( -p \bar{I} + \eta (\nabla \bar{u} + (\nabla \bar{u})^T) - \frac{2\eta}{3} (\nabla \cdot \bar{u}) \bar{I} \right) \quad (12)$$

Уравнение теплопроводности:

$$\nabla \cdot (-k \nabla T) = 2k_1 c_a^2 E_1 - \rho C_p \bar{u} \cdot \nabla T \quad (13)$$

Квазистационарное приближение:

$$X_{w1} = \frac{k_{7b} X_1 X_{w0}}{k_{7f} + k_{10w} X_{w0}} \quad (14)$$

Уравнение конвекции и диффузии для  $O_2$  ( $\nu=1$ ):

$$\nabla \cdot (-D \nabla X_1) = \left( nk_1 X_a^2 - \frac{k_{7b} X_1 X_{w0}^2 k_{10w}}{k_{7f} + k_{10w} X_{w0}} - X_1 k_{8o} \right) N - \frac{D}{T} \nabla T \cdot \nabla X_1 - \bar{u} \cdot \nabla X_1 \quad (15)$$

$$-\bar{n} \cdot (-D \nabla X_1 + X_1 \bar{u}) = -\gamma_o X_1 \sqrt{\frac{RT}{2\pi\mu_o}} - \gamma_w \frac{k_{7b} X_1 X_{w0}}{k_{7f} + k_{10w} X_{w0}} \sqrt{\frac{RT}{2\pi\mu_w}} \quad (\gamma_o=10^{-3}, \gamma_w=1) \quad (16)$$

Уравнение конвекции и диффузии для  $O_2$  (a):

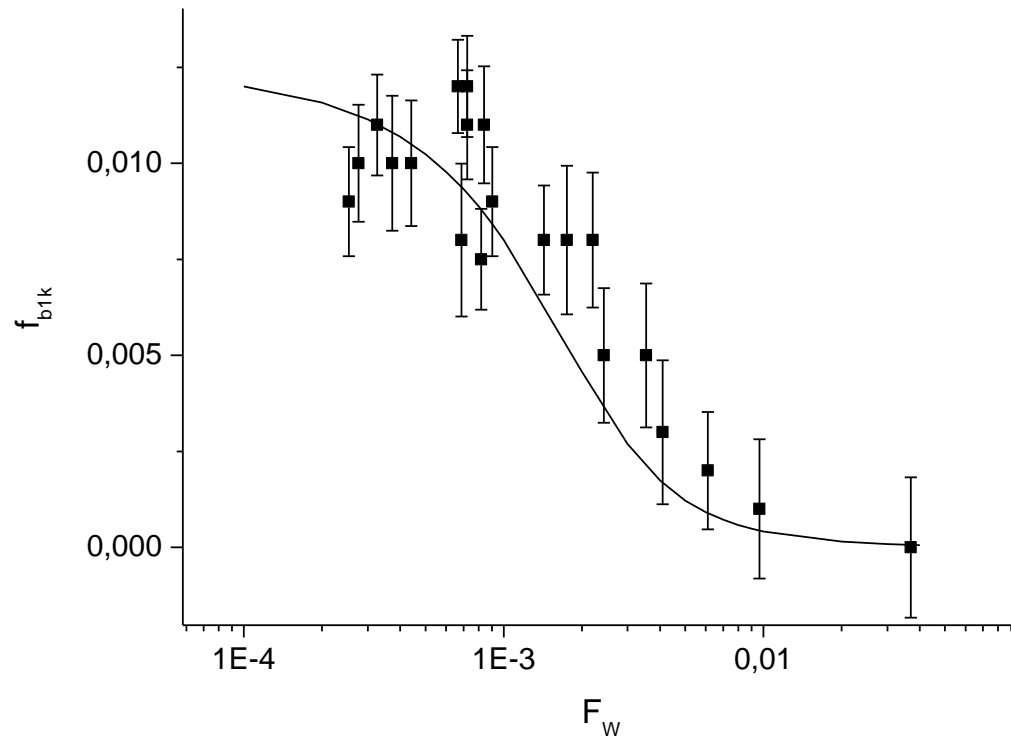
$$\nabla \cdot (-D \nabla X_a) = -k_1 X_a^2 - \frac{D}{T} \nabla T \cdot \nabla X_a - \bar{u} \cdot \nabla X_a \quad (17)$$

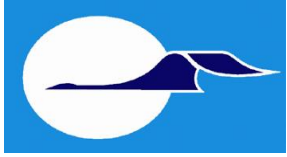


# Результаты. COMSOL Multiphysics

$$f_{b1k} = X_1 \frac{e^{-\frac{2021}{T}}}{X_a e^{-\frac{2134}{T}} + (1 - X_a) e^{-\frac{2237}{T}}} \quad (18)$$

$n=0,15$





## Решение задачи. Одномерное приближение

Система ОДУ:

$$\frac{dc_1}{dt} = nk_1c_a^2 - \frac{k_{7b}c_1c_{w0}^2k_{10W}}{k_{7f}c_0 + k_{10W}c_{w0}} - c_1c_0k_{8O} - c_1k_{Owall} - \frac{k_{7b}c_1c_{w0}k_{Wwall}}{k_{7f}c_0 + k_{10W}c_{w0}} \quad (19)$$
$$\frac{dc_a}{dt} = -k_1c_a^2$$

Гашение на стенке:

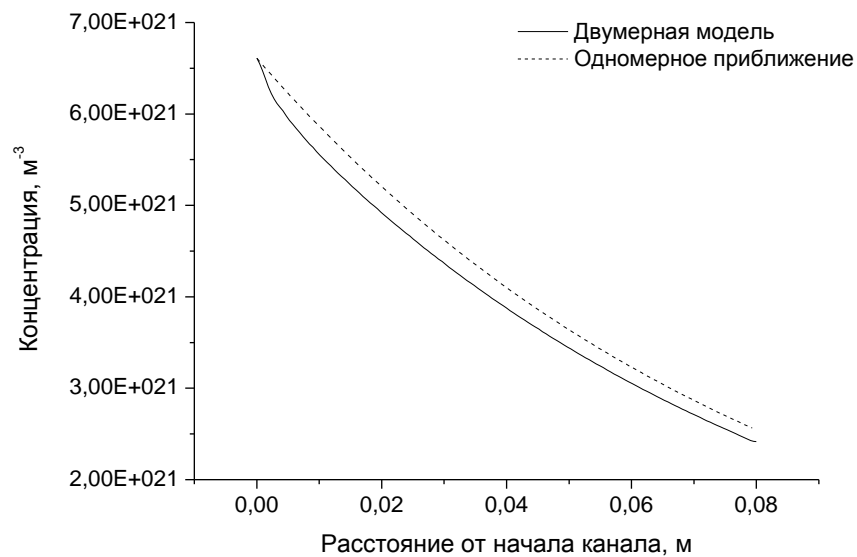
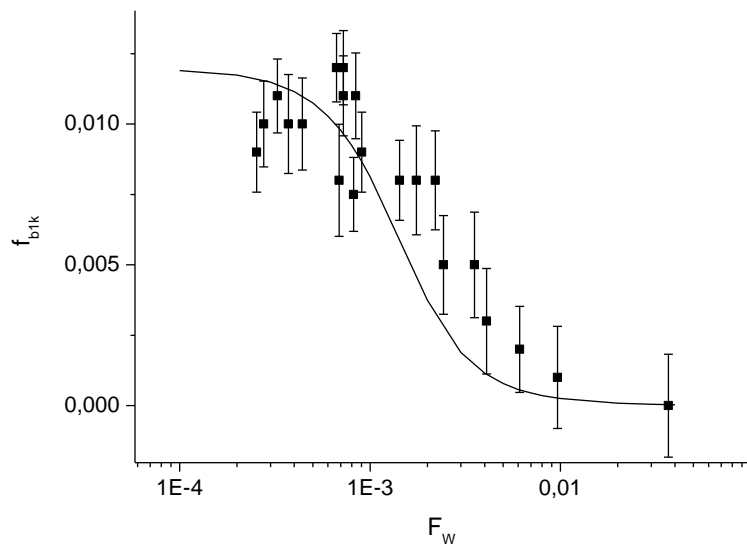
$$k_{wall} = \left( \frac{h^2}{8D} + \frac{2h}{v\gamma} \right)^{-1} \quad (20)$$





# Результаты. Одномерное приближение

$n=0,1$



Сравнение процессов гашения в  
двумерном и одномерном  
приближениях

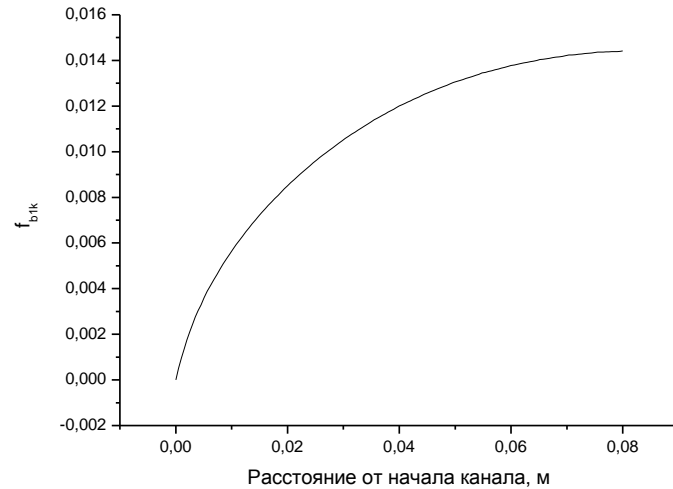
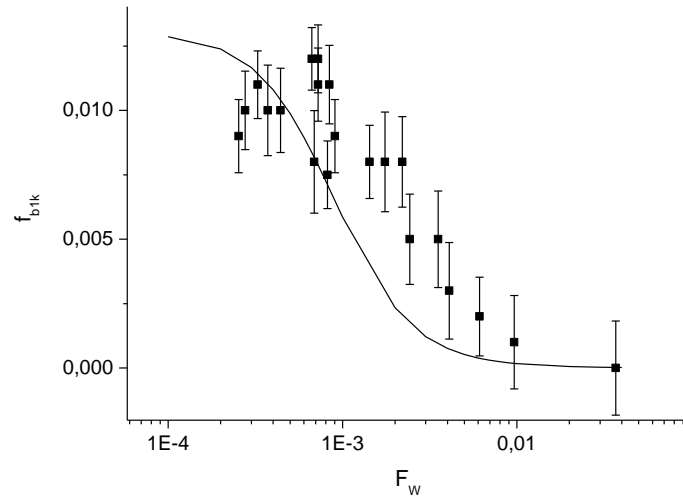


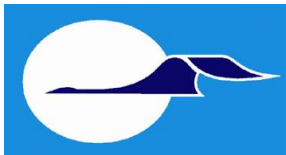
# Стационарное приближение

$$\frac{c_1}{c_0} = \frac{1}{c_0} \frac{nc_a^2 k_1}{k_{80}c_0 + k_{Owall} + k_{7b}c_0 F_W \frac{k_{10W} F_W + \frac{k_{Wwall}}{c_0}}{k_{7f} + k_{10W} F_W}} \quad (21)$$

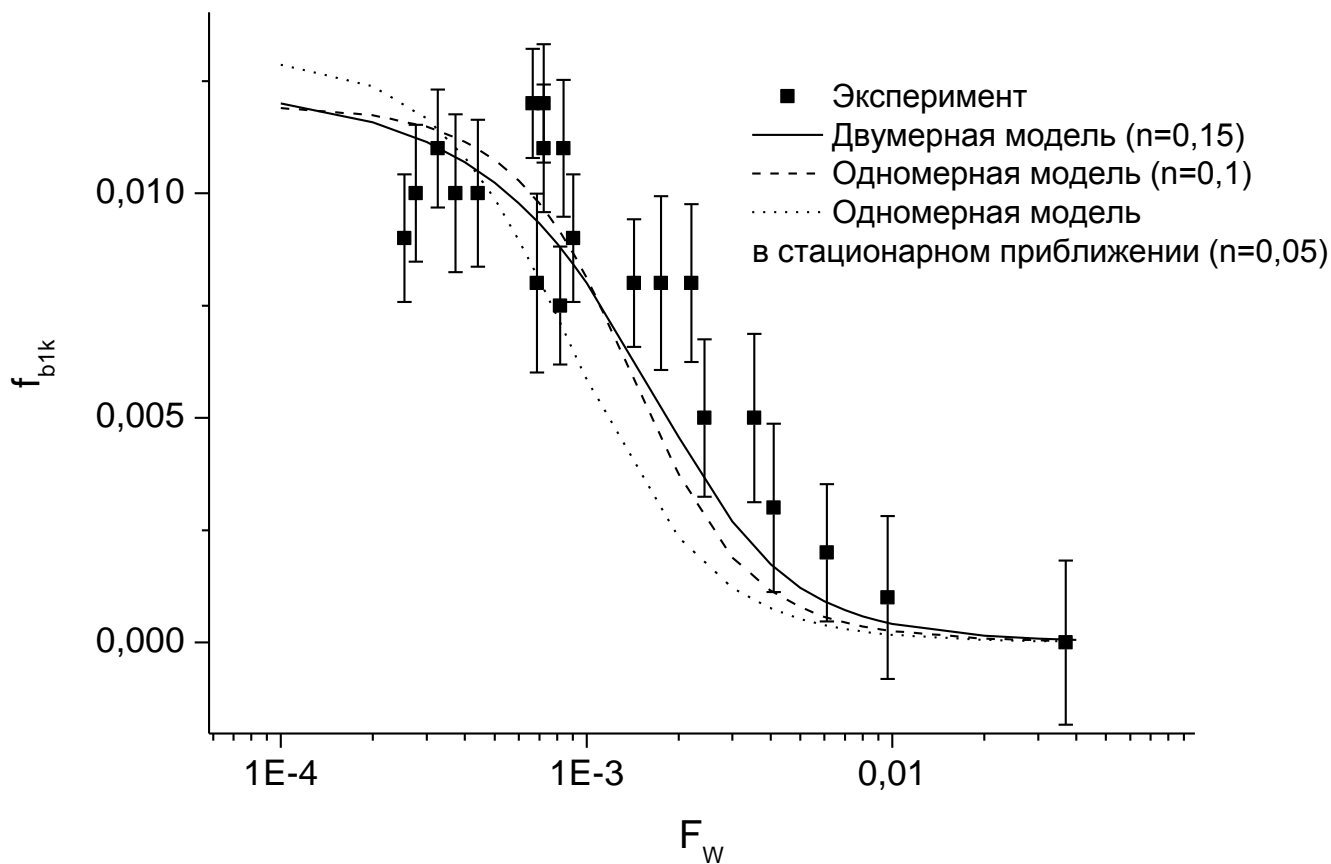
$n=0,05$

Изменение  $f_{b1k}$  по ходу канала





# Сравнение





## Результаты

$$n \approx 0,15$$

$$p_1 < 0,15$$

$$p_2 < 0,075$$

Причины неточности значения:

- Неопределенность значений констант реакций
- Низкая точность измерения температуры
- Низкая точность измерений относительной концентрации