

**Описание процесса колебательной релаксации в чистом кислороде, нагретом сильной ударной волной, с использованием моделей поуровневой кинетики**

*А.С. Дикалюк<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт проблем механики РАН им. А.Ю. Ишлинского

Процесс установления равновесия по колебательным степеням свободы (колебательная релаксация) принадлежит к числу наиболее изученных неравновесных явлений, протекающих за фронтом сильных ударных волн. В результате выполненных теоретических и экспериментальных исследований этого явления были поняты основные закономерности его протекания, созданы различные модели и приближения. Развитые подходы оказались оправданными и хорошо зарекомендовали себя при описании процесса в определенном диапазоне параметров (давление исследуемого газа, скорость фронта) ударной волны.

Однако в работах [1, 2] по измерению колебательной температуры в чистом кислороде, нагретом ударной волной, было продемонстрировано, что модели процессов колебательной релаксации и неравновесной диссоциации, широко используемые в настоящее время, не описывают указанные экспериментальные данные при поступательной температуре за фронтом выше 8000 К.

В представленной работе для описания процесса колебательной релаксации используется поуровневый подход. В рамках этого подхода рассматривается 47 колебательных уровней основного электронного состояния молекулы  $O_2$ . Каждый из этих уровней моделируется отдельной компонентой газовой смеси. Для этих компонент составляется механизм возбуждения, формулируются кинетические уравнения типа уравнений химической кинетики. В механизме учитываются всевозможные (в том числе многоквантовые) VT-переходы между рассмотренными колебательными уровнями, а так же диссоциация колебательно-возбужденных молекул  $O_2$  из любого из 47 колебательных состояний. Параметры соответствующих процессов были заимствованы из [3, 4]. Для расчета параметров процессов в [3] используется метод квазиклассических траекторий, параметры в [4] получены с использованием модели Forced Harmonic Oscillator (FHO). Не рассматривается влияние внутреннего состояния «налетающей» частицы (O или  $O_2$ ), приводящей к изменению

колебательного состояния молекулы  $O_2(v)$  ( $v$  – колебательный уровень), на скорость соответствующего процесса. Распределение газодинамических параметров в релаксационной зоне рассчитывается на основе уравнений Эйлера, записанных в системе отсчета, связанной с фронтом ударной волны.

С использованием изложенного выше подхода рассчитан процесс колебательной релаксации для условий экспериментов [1, 2]. Продемонстрировано, что в рамках этого подхода удовлетворительно описывается колебательная температура чистого кислорода, нагретого ударной волной, при температурах за фронтом выше 8000 К.

#### Литература

1. *Быкова Н.Г., Забелинский И.Е., Ибрагимова Л.Б., Сергиевская А.Л., Туник Ю.В., Шаталов О.П.* Исследование колебательной релаксации и термически неравновесной диссоциации молекул  $O_2$  за фронтом ударной волны // Школа-семинар «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем». – 2011. – С. 40-47.
2. *Zabelinskii I.E., Ibraguimova L.B., Shatalov O.P., Tunik Yu.V.* Experimental study and numerical modeling of vibrational oxygen temperature profiles behind a strong shock wave front // Third European conference for aerospace sciences. – 2009. – P. 1-10.
3. *Esposito F., Armenise I., Capitta G., Capitelli M.*  $O-O_2$  state-to-state vibrational relaxation and dissociation rates based on quasiclassical calculations. - Chemical Physics. – 2008. – No. 351. – P. 91–98.
4. *Lino da Silva M., Loureiro J., Guerra V.* A multiquantum dataset for vibrational excitation and dissociation in high-temperature  $O_2-O_2$  collisions. - Chemical Physics Letters. – 2012. – No. 531. – P. 28-33.