

**О РАСЧЕТЕ ХИМИЧЕСКИ
И КОЛЕБАТЕЛЬНО НЕРАВНОВЕСНОГО ТЕЧЕНИЯ
МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА ЧЕРЕЗ СОПЛО**

B. M. Васильев, С. В. Куликов, О. В. Скребков

(Черноголовка)

Введение. Расчет течения многокомпонентной газовой смеси в определенных условиях требует совместного учета кинетики химических реакций и процессов колебательного энергообмена. Однако до сих пор таких расчетов в сколько-нибудь общей постановке не проводилось, и это объясняется как сложностью математического решения, так и трудностями, связанными с последовательной формулировкой задачи и отсутствием сведений о многих кинетических характеристиках, в частности, описывающих взаимное влияние процессов химической и колебательной кинетики.

Обычно на практике принимается, что возможно разделение этих процессов. В конкретных условиях это действительно может быть оправдано. Так, для сопел сравнительно больших диаметров и при высоких температурах резервуара ($T_0 \sim 3000$ К), например, в применении к расчету параметров потока в соплах ракетных двигателей (см., например, обзор в [1]) достаточно учитывать только химическую неравновесность, полагая при этом, что колебательные степени свободы молекул находятся в равновесии с поступательными. Обоснованность такого подхода обусловлена как относительной справедливостью в этих условиях соотношения

$$(0.1) \quad \tau_r \sim \tau_g \gg \tau_q,$$

так и сравнительной малостью запаса колебательной энергии по отношению к химической энергии ($\Delta H_k < 30\% \Delta H_x$) (здесь τ_r , τ_g и τ_q — характерные времена течения, химических реакций и колебательной релаксации).

В расчетах неравновесных течений применительно к газодинамическим CO₂-лазерам (сопла малых диаметров, $T_0 \lesssim 2500$ К, см., например, обзор [2]) достаточно учесть только колебательную неравновесность, предположив постоянство химического состава в соответствии с соотношением

$$(0.2) \quad \tau_r \gg \tau_g \sim \tau_q.$$

Для сравнительно простых систем (рассматривалась смесь CO₂—N₂—He) предположение (0.2) действительно оправдано. На это указывают результаты расчетов [3, 4], в которых наряду с колебательной неравновесностью учитывалась кинетика неравновесной рекомбинации CO₂.

В последние годы обнаружилась тенденция к повышению температур и давлений в резервуарах ГДЛ и усложнению лазерных смесей (добавление воды и других компонентов, использование в качестве рабочего тела продуктов горения топлива). В этих условиях соотношение (0.2) может уже не выполняться (главным образом из-за наличия в сложных смесях большого числа быстрых бимолекулярных реакций обмена), и процессы химической и колебательной кинетики следует рассматривать совместно.

Трудности математического характера для кинетических задач, сформулированных как с использованием (0.1) или (0.2), так и без их использования, являются общими и к настоящему времени в основном преодолены [1].

В данной работе на основе использования ряда упрощающих предположений сформулирована задача расчета химически и колебательно неравновесного течения многокомпонентной газовой смеси через сопло. Для решения задачи использована неявная схема, впервые примененная к расчетам химической кинетики в работе [5]. Приводятся результаты численных расчетов для смеси элементного состава H—O—C—N, иллюстрирующие взаимное влияние химической и колебательной неравновесности.

1. Постановка задачи. Для целого ряда приложений достаточно определить параметры потока (T , ρ , p), концентрации отдельных компонентов n_i и средние энергии колебательных степеней свободы ε_k . Это обстоятельство значительно упрощает формулировку кинетических уравнений,

позволяя использовать следующие упрощающие предположения: а) химические реакции не нарушают максвелловского распределения; б) вращательные степени свободы находятся в равновесии с поступательными; в) каждый тип колебаний молекул (мода) моделируется гармоническим осциллятором; г) $\tau_{vv} \ll \tau_{vt}$, τ_{vv}' , $\tau_r(\tau_{vv}, \tau_{vv}')$, τ_{vt} — характерные времена обмена энергий внутри одной моды, между разными модами и колебательно-поступательного обмена соответственно). Последнее предположение позволяет в качестве меры средней энергии той или иной моды (например, k -й) ввести понятие колебательной температуры T_k .

Последовательный вывод из уравнений баланса населенностей колебательных уровней кинетических уравнений для средних колебательных энергий ε_k без учета химических реакций в предположениях б), в), г) выполнен в работе [6]. Изменение концентраций компонентов описывается обычными феноменологическими уравнениями химической кинетики, причем влияние процесса колебательной релаксации на кинетику химических превращений выражается в зависимости константы скоростей реакций от колебательных температур соответствующих мод. Влияние же химических реакций на процесс колебательной релаксации обусловливает появление в правых частях уравнений колебательной кинетики дополнительного члена [7,8]. Непосредственное применение результатов [6—8] к случаю многокомпонентной газовой смеси приводит к следующим уравнениям для мольных концентраций компонентов на единицу массы n_i и средних чисел колебательных квантов мод ε_k :

$$(1.1) \quad \frac{dn_i}{dt} = \sum_{r=1}^{L_1} (\nu'_{ir} - \nu_{ir}) (R_r - R'_r),$$

$$R_r = k_r \prod_{j=1}^N (\rho n_j)^{\nu_{jr}}, \quad R'_r = k'_r \prod_{j=1}^N (\rho n_j)^{\nu'_{jr}};$$

$$(1.2) \quad \frac{d\varepsilon_k}{dt} = \sum_{q=1}^{L_2} l_{kq} \sum_{i=1}^N Z_{ji} P_{ji}^{(q)} \prod_m \left(\frac{l_{mq} + \lambda_m \sigma_{ji} - 1}{l_{mq}} \right) (Q_q - Q'_q) +$$

$$+ \sum_{r=1}^{L_1} (\nu'_{jr} - \nu_{jr}) [(\chi_{rk} - \varepsilon_k) R_r - (\chi'_{rk} - \varepsilon_k) R'_r] / \rho n_j,$$

$$Q_q = \prod_m \left[\frac{\varepsilon_m^0 (\lambda_m + \varepsilon_{ri})}{\lambda_m (\lambda_m + \varepsilon_m^0)} \right]^{l_{mq}} \prod_n \left[\frac{\varepsilon_n (\lambda_{ri} + \varepsilon_n^0)}{\lambda_n \varepsilon_n^0} \right]^{l_{nq}},$$

$$Q'_q = \prod_m \left(\frac{\varepsilon_m}{\lambda_m} \right)^{l_{mq}} \prod_n \left(\frac{\lambda_n + \varepsilon_n}{\lambda_n} \right)^{l_{nq}},$$

$k = 1, 2, \dots, S$ (мода k принадлежит молекуле j).

Здесь k_r (k'_r) — константа скорости r -й реакции в прямом (обратном) направлении; $P_{ji}^{(q)} = P_{ji} \begin{cases} l_{mq} \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_{nq} \end{cases}$ — вероятность q -го колебательного перехода при одном столкновении молекул i -го и j -го сортов; ν_{ir} , ν'_{ir} — стехиометрические коэффициенты i -го компонента в r -й реакции; Z_{ji} — число столкновений молекул сорта i с молекулами сорта j в единице времени при единичной концентрации первых; $\varepsilon_k^0 = \varepsilon_k(T)$; λ_k — степень вырождения k -й моды; L_1 и L_2 — общее число химических реакций и каналов колебательной релаксации соответственно;

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} 2 & \text{при } j = i \\ 1 & \text{при } j \neq i; \end{cases}$$

N — число компонентов в смеси; S — полное число мод; $\chi_{rk} (\chi'_{rk})$ — среднее число колебательных квантов, получаемое (теряемое) k -й модой при одном акте образования (уничтожения) молекулы сорта j в r -й реакции, здесь за прямое направление реакции принимается такое, в котором обра- зуются молекулы сорта j

$$(1.3) \quad \chi_{rk} = (E_r/\hbar\omega_k) \eta_{kr}, \quad \chi'_{rk} = (E_r/\hbar\omega_k) \eta'_{kr};$$

$$(1.4) \quad k_r(T, T_k) = \alpha_r(T, T_k) k_r^0(T),$$

где $k_r^0(T)$ — константа скорости r -й реакции при термодинамическом равновесии; ω_k — частота k -го колебания; E_r — часть энергии активации r -й реакции, приходящейся на колебательные степени свободы. Согласно предположениям а). б), для величины E_r при достаточно высоких темпера- туратах (поступательное и вращательное движения рассматриваются классически) можно принять

$$(1.5) \quad E_r = E_r^A - (\xi_r + 3) kT/2,$$

где E_r^A — энергия активации r -й реакции в направлении уничтожения молекулы, содержащей k -ю моду (энергия разрыва связи в реакциях диссоциации); ξ_r — число вращательных степеней свободы, участвую- щих в r -й реакции молекул. Хотя формула (1.5) имеет грубо оценочный характер, но для рассматриваемых температур она находится в качественном соответствии с имеющимися экспериментальными данными для бимолекулярных реакций обмена [9] и в удовлетворительном количественном — для реакций диссоциации [10]. В случае реакции диссоциа- ции [7, 8]

$$(1.6) \quad \eta'_{kr} = \beta_{rk}^2 T_k^2 \sum_i \beta_{ri}^2 / \left(\sum_i \beta_{ri}^2 T_i \right)^2, \quad \eta_{kr} = \beta_{rk}^2 / \sum_i \beta_{ri}^2;$$

$$(1.7)^* \quad \alpha_r(T, T_k) = \exp \left[\frac{E_r}{k} \left(\frac{1}{T} - \frac{\sum_i \beta_{ri}^2}{\sum_i \beta_{ri}^2 T_i} \right) \right]$$

(β_{ri} — коэффициенты разложения координаты реакции по нормальным координатам). Из-за недостатка информации о β_{ri} последние в большинстве случаев полагаются равными друг другу. Для бимолекулярных реакций обмена в качестве первого приближения принимается $\eta_{1r} = \eta_{2r} = \dots = 1/b_r$, где b_r — число мод, участвующих в r -й реакции; для оце- нок α_r можно воспользоваться формулой (1.7) или положить $\alpha_r = 1$.

Газодинамические уравнения стандартны для подобных расчетов — течение стационарно, одномерно, вязкость, теплопроводность и диффузия не учитываются:

$$(1.8) \quad \rho v A = G, \quad \frac{dp}{dx} = -\rho v \frac{dv}{dx}; \quad p = n \rho R T;$$

$$n = \sum_{i=1}^N n_i; \quad H + \frac{1}{2} v^2 = H_0; \quad H = \sum_{i=1}^N H_i n_i.$$

Здесь x — координата вдоль оси сопла; $A = A(x)$ — площадь попереч- ного сечения сопла; G — массовый расход; v — скорость потока; R — уни-

* Соотношением (1.7) следует пользоваться осторожно, так как для сильно ангар- монического осциллятора оно может дать большую ошибку [2]; в таких случаях в ка- честве приближения разумно положить $\alpha_r = 1$.

версальная газовая постоянная; $H = H(T_k, T, p)$ — энталпия единицы массы газовой смеси; H_0 — энталпия торможения, H_i — мольная энталпия i -го компонента.

Таким образом, для течения колебательно и химически неравновесной многокомпонентной газовой смеси имеется замкнутая система $N + S + 4$ уравнений (1.1), (1.2), (1.8) относительно такого же числа неизвестных $n_i, \varepsilon_k, p, v, \rho, T$.

2. Метод расчета. В данной работе исходная система уравнений разделяется на две подсистемы: кинетическую — уравнения (1.1), (1.2) с (1.3) — (1.7) (подсистема I) и газодинамическую — уравнения (1.8) (подсистема II), причем решение газодинамической подсистемы сводится к интегрированию уравнения для функции $F = A(x)p/G + v$

$$(2.1) \quad \frac{dF}{dx} = \frac{1}{G} p \frac{dA}{dx}.$$

Температура T на каждом шаге интегрирования определяется из уравнения

$$(2.2) \quad F/2 \pm \sqrt{F^2/4 - nRT} - \sqrt{2(H_0 - H)} = 0.$$

Начало расчета из дозвуковой области наряду с заданием зависимости $A = A(x)$ приводит к появлению особой точки типа «седло». Поэтому массовый расход подбирается итерированием, и в особой точке производится спивка физически реализующихся дозвуковой и сверхзвуковой ветвей решения.

Кинетическая подсистема интегрируется с помощью неявной разностной схемы первого порядка аппроксимации с дальнейшим применением метода Ньютона. Такая схема впервые использовалась в работе [5] для интегрирования уравнений химической кинетики. Однако применение этой схемы ко всей системе уравнений (1.1) — (1.8) затруднительно при использовании уравнения (2.1) из-за неоднозначности решения уравнения (2.2) в районе особой точки, поэтому уравнение (2.1) интегрируется методом Эйлера с пересчетом. Вместо численного решения (2.2) на каждом шаге по x энталпия смеси представляется в виде $H = C_0T + C(T_k)$. Это позволяет перейти от трансцендентного уравнения (2.2) к квадратному уравнению для T . Аналитический вид решения (2.2) дает возможность производить более грубую спивку дозвуковой и сверхзвуковой ветвей решения и, уменьшая H_0 на небольшом участке счета после спивки, избегать при этом появления мнимых корней для T . Это значительно уменьшает число итераций по подбору G без ущерба для точности решения.

В качестве начальных данных используются $T_n, \rho_n, n_{ni}, \varepsilon_{nk}$ в дозвуковой области. Схема расчета такова: 1) шаг по x , решение подсистемы II при значениях n_i и ε_k на предыдущем шаге; 2) решение подсистемы I при полученных T и ρ ; 3) последовательный пересчет и сравнение с имеющимися величинами параметров, далее в зависимости от точности полученного результата либо пересчет, либо новый шаг по x и т. д. Выбор величины шага по x осуществляется автоматически в зависимости от общего числа итераций на каждом шаге.

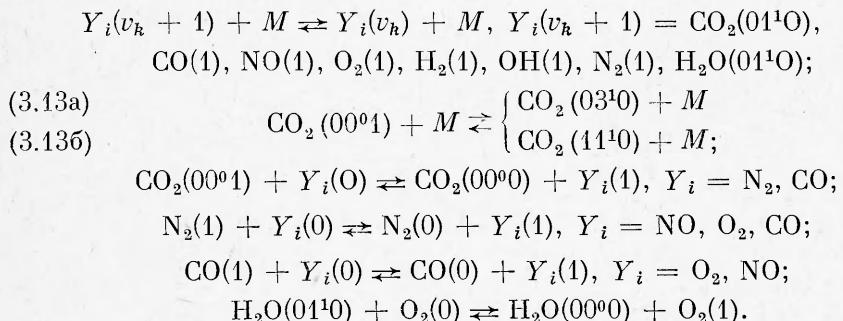
3. Кинетическая схема расчета. Составленная программа позволяет проводить расчеты химически и колебательно неравновесного течения газовой смеси элементного состава $\text{H}-\text{O}-\text{C}-\text{N}$ — инертный газ. При температурах $T < 4000$ К в условиях течения через сопло для расчета состава с точностью до 0,1 % достаточно учесть следующие компоненты: $\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{CO}, \text{H}_2, \text{O}_2, \text{OH}, \text{N}_2, \text{NO}, \text{H}, \text{O}$. Соответственно составу записываются химические реакции и каналы колебательной релаксации,

важные с точки зрения формирования инверсной заселенности колебательных уровней CO_2 и влияния на параметры течения.

Химические реакции:

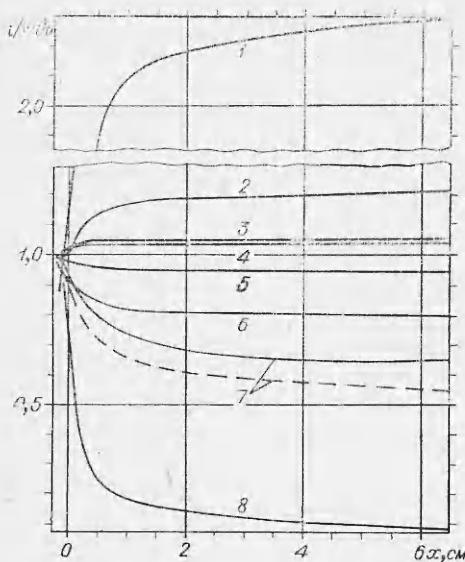
- $$(3.1) \quad \text{CO} + \text{O} + M \rightleftharpoons \text{CO}_2 + M;$$
- $$(3.2) \quad \text{H} + \text{OH} + M \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + M;$$
- $$(3.3) \quad 2\text{O} + M \rightleftharpoons \text{O}_2 + M;$$
- $$(3.4) \quad 2\text{H} + M \rightleftharpoons \text{H}_2 + M;$$
- $$(3.5) \quad \text{H} + \text{O} + M \rightleftharpoons \text{OH} + M;$$
- $$(3.6) \quad \text{O}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{O};$$
- $$(3.7) \quad \text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{OH};$$
- $$(3.8) \quad \text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O};$$
- $$(3.9) \quad \text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{OH};$$
- $$(3.10) \quad \text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons 2\text{OH};$$
- $$(3.11) \quad \text{H} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CO};$$
- $$(3.12) \quad \text{N}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{NO}.$$

Каналы колебательной релаксации:

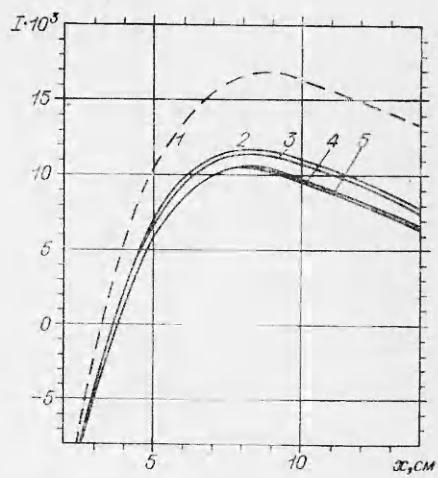


Здесь M — любая молекула. Константы скоростей химических реакций взяты из [11, 12]. Для вероятностей колебательных переходов использовались в основном экспериментальные значения [13—22], но для части процессов колебательно-поступательного обмена при различных M они рассчитывались по известной теории Шварца, Славского, Герцфельда. Каналы релаксации (3.13a) и (3.13b) объединены в один с эффективной вероятностью обмена $P_{\text{CO}_2, M}^{(9)}$, которая обычно и определяется в экспериментах [2, 23].

4. Результаты расчета. Ниже приводятся результаты численного решения задачи, иллюстрирующие взаимное влияние химической и колебательной неравновесности при течении многокомпонентной газовой смеси через сопло. Рассчитывалось течение смеси со следующим элементным составом (в г·атомах на 1 кг смеси): 9,53 — H; 15,76 — O; 47,32 — N; 6,31 — C через плоское клиновидное сопло с углами раствора сходящейся части 60° и расходящейся — 30°, с критическим сечением в виде щели высотой $h = 0,55$ см и шириной 40 см, скругленное в горле по окружности радиуса 0,2 см и переходящее в плоскопараллельный канал высотой $a = 1,6$ см. Параметры торможения смеси $p_0 = 10$ атм, $T_0 = 3000$ К, при этом равновесные концентрации $\text{CO}_2, \text{N}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{CO}, \text{OH}, \text{O}_2, \text{H}_2, \text{NO}, \text{H}, \text{O}$ относятся как 1 : 6,97 : 1,16 : 0,88 : 0,17 : 0,15 : 0,14 : 0,12 :



Фиг. 1



Фиг. 2

0,06:0,04 соответственно. Начальные условия равновесные, $T_{ii} = 2990$ К. В расчетах с учетом взаимного влияния колебательной и химической кинетики полагалось, что для $\text{CO}_2 \beta_{r1}=1, \beta_{r2}=0, \beta_{r3}=1$ *, а все остальные β_{ri} равны друг другу.

На фиг. 1 приведены в зависимости от x отношения концентраций компонентов к их значениям в резервуаре в процессе течения смеси с колебательной и химической неравновесностью $n_i/(n_i)_0$ ($1 - \text{H}, 2 - \text{O}_2, 3 - \text{H}_2\text{O}, 4 - \text{CO}_2, 5 - \text{CO}, 6 - \text{H}_2, 7 - \text{O}, 8 - \text{OH}$). Сплошные кривые соответствуют расчету с учетом взаимного влияния колебаний и химии, штриховые — без него. Как и следовало ожидать (сплошные кривые), наиболее сильное изменение состава происходит в трансзвуковой области течения ($x \sim 0$), затем происходит быстрое замораживание реакций рекомбинации (3.1) — (3.5) (реакция (3.1) замораживается еще в дозвуковой области при $x \approx -0,05$, в горле $x=0$). Быстрые реакции обмена (3.6) — (3.11) продолжают интенсивно протекать и в сверхзвуковой области, на что указывает поведение концентраций компонентов OH, H, O.

Сравнение величин R_r и R'_r показало, что в течение всего процесса расширения эти реакции в основном идут в экзотермических направлениях (3.6'), (3.8'') — (3.12'')**, а в неравновесных условиях в сверхзвуковой области заметную роль начинают играть реакции диссоциации (3.1'') — (3.5''), скорости которых сравнимы со скоростями обменных реакций (см. (2.7)).

Различие штриховой и сплошной кривых для O обусловлено влиянием колебательной неравновесности на скорости реакций (3.1'') — (3.5'') (на фиг. 1 не изображены штриховые кривые, отличающиеся от соответствующих сплошных менее чем на 1%). В целом же в данном расчете влияние взаимодействия химии и колебаний на химический состав несущественно, так как содержание O в смеси мало.

Взаимное влияние химических реакций и процессов колебательного энергообмена показано на фиг. 2, где приведена зависимость инверсии $I(x) = [n_{\text{CO}_2}(001) - n_{\text{CO}_2}(100)]/n_{\text{CO}_2}$ для расчетов, выполненных при

* Здесь и далее индексы 1, 2, 3 относятся к симметрической, деформационной и асимметрической модам CO_2 соответственно.

** Номер реакции с двумя штрихами указывает направление реакции справа налево, а с одним — слева направо.

различных предположениях относительно химической и колебательной кинетики. Кривая 2 соответствует обсуждавшемуся выше расчету с учетом взаимного влияния химической и колебательной неравновесности, штриховая кривая 1 — расчет только колебательной релаксации при постоянном составе, 3 — отсутствие влияния колебательной неравновесности на скорость химических реакций. Пренебрежение химическими реакциями приводит к значительному завышению (на 40% при $I \approx I_{\max}$) инверсной заселенности. Кривая 4 представляет расчет, выполненный без учета взаимодействия химической и колебательной неравновесности. Различие кривых 1 и 4 (56% при $I \approx I_{\max}$) обусловлено тем, что химические реакции уменьшают степень диссоциации смеси; последнее приводит к более «мягкой» газодинамике (эффективный показатель адиабаты уменьшается), а следовательно, к уменьшению колебательной неравновесности в целом. Различие кривых 2 и 4 составляет 10% при $I \approx I_{\max}$ и обусловлено «подкачкой» энергии в колебательные моды за счет химической реакции.

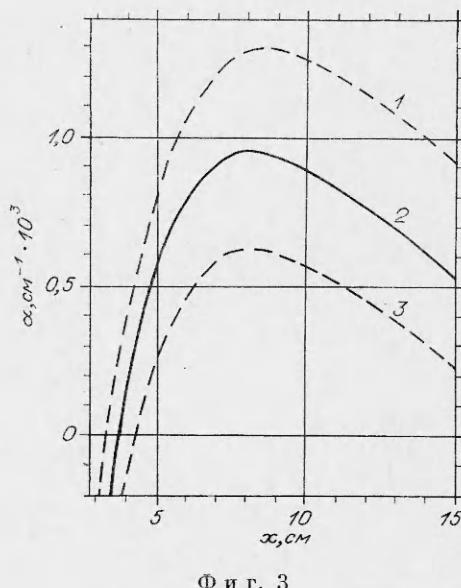
При взаимодействии химической и колебательной неравновесности главным является влияние химических реакций на колебательную релаксацию. На это указывает расположение кривой 3 (в отличие от расчета для кривой 2 здесь все $\chi_r = 1$), которая существенно ближе к кривой 2, нежели к кривой 4. Если в уравнениях (1.2) исключить влияние реакций обмена (3.6) — (3.12) и положить все $\chi_r = 1$ (подобная модель использована в [4]), то расчет дает для $I(x)$ кривую 5. Сравнение кривых 3, 4 и 5 показывает, что на процессы колебательной релаксации главным образом влияют реакции обмена (3.6) — (3.12), приводящие в целом к увеличению I .

Из вышеизложенного следует, например, что изменение концентрации CO_2 в сверхзвуковой области течения в рамках принятой модели описывается следующим механизмом: образование молекул CO_2 в обменной реакции (3.11'') с последующим частичным исчезновением в реакции диссоциации (3.11'). Влияние реакций (3.6'), (3.6'') при этом пренебрежимо мало (на это указывают величины R_6 и R'_6); очень медленны также реакции (3.12'), (3.12'').

Часто используемой и с высокой точностью измеряемой характеристикой ГДЛ является коэффициент оптического усиления α , рассчитываемый по формуле, приведенной в работе [24]; величина коэффициента Эйнштейна для спонтанного перехода $\text{CO}_2(001) \rightarrow \text{CO}_2(100)$ взята из [25]. На фиг. 3 приведены зависимости $\alpha(x)$. Кривые 1 и 2 ($T_n = 2990$ K) получены из тех же расчетов, что и кривые 1 и 2 на фиг. 2.

Как уже отмечалось выше, наиболее интенсивно химические реакции идут в околоскритической области течения; кроме того, уже в дозвуковой области имеет место неравновесность как химическая, так и колебательная ($\approx 100^\circ$). Поэтому для правильного учета

2*



Фиг. 3

химической и колебательной неравновесности в потоке через сопло расчет следует начинать из дозвуковой области и важно корректно выбирать точку начала расчета. Последнее иллюстрируется штриховой кривой 3, полученной из полного кинетического расчета, подобного расчету для кривой 2, но при $T_n = 2900$ К в отличие от кривой 2, где $T_n = 2990$ К. Их различие (35% при $\alpha \approx \alpha_{\max}$) характеризует влияние химической и колебательной неравновесности, возникающей в дозвуковой области (в данных расчетах критическая температура ≈ 2600 К), на величину α .

Следует ожидать, что с уменьшением T_0 влияние химической неравновесности будет уменьшаться. Расчет, проведенный для смеси того же элементного состава, что и выше, но при $T_0 = 2500$ К, показал, что в этих условиях влияние химических реакций на величину α несущественно (не более 5%) и им можно пренебречь.

Рассмотрим вопрос о влиянии колебательной неравновесности на параметры потока, т. е. вопрос о том, при каких значениях τ_r использование предположения (0.1) начинает вносить ошибку в расчет T , ρ и v . Для выяснения этого были выполнены расчеты для различных сопел; из параметров вышеописанного сопла при этом менялись только величины h и a . Сравнение результатов полных кинетических расчетов с расчетами, в которых учитывалась только химическая неравновесность (все $T_k = T$), показало, что влияние колебательной неравновесности на параметры потока становится существенным для сопел с $\bar{\tau}_r \leqslant 10^{-6}$ с, $\bar{\tau}_r$ — среднее характерное время течения. Так, для сопла с $h = 0,55 \cdot 10^{-1}$ см, $\bar{\tau}_r = 0,7 \cdot 10^{-6}$ с учет колебательной неравновесности изменяет T , ρ и v при $p = 1$ атм на 5,6; 5,3 и 1% соответственно, а для сопла с $h = 0,55$ см, $\bar{\tau}_r = 0,6 \cdot 10^{-5}$ соответствующие величины равны 1,3; 1,2 и 0,3%.

Поступила 18 VI 1976

ЛИТЕРАТУРА

- Хайлов В. М. Химическая релаксация в соплах реактивных двигателей. М., «Машгиз», 1975.
- Гордиц Б. Ф., Осипов А. И., Ступченко Е. В., Шелепин Л. А. Колебательная релаксация в газах и молекулярные лазеры. — «Усп. физ. наук», 1972, т. 108, № 4, с. 655.
- Ющенко Н. И., Каленов Ю. А. Химическая и колебательная релаксация в сверхзвуковых потоках двуокиси углерода с примесью азота. — «Журн. прикл. спектроскопии», 1972, т. XVI, вып. 1, с. 39.
- Бирюков А. С., Шелепин Л. А. Кинетика физических процессов в газодинамических лазерах. Влияние формы сопла на инверсию. — ЖТФ, 1974, т. XLIV, вып. 6, с. 1232.
- Вольперт А. И., Гонтьковская В. Т., Озерковская И. И., Филиппенко В. П. Об использовании численного решения уравнений химической кинетики. — В кн.: Математические проблемы химии. Ч. 1. Новосибирск, «Наука», 1973, с. 9.
- Бирюков А. С., Гордиц Б. Ф. Кинетические уравнения релаксации колебательной энергии в смеси многоатомных газов. — ПМТФ, 1972, № 6, с. 29.
- Кузнецов Н. М. К кинетике диссоциации многоатомных молекул при переномерном распределении колебательной энергии. — «Докл. АН СССР», 1972, т. 202, № 6, с. 1367.
- Кузнецов Н. М. Вопросы теории мономолекулярного распада однокомпонентного газа и константа скорости диссоциации CO_2 при высоких температурах. — ПМТФ, 1972, № 3, с. 46.
- Кондратьев В. И., Никитин Е. Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М., «Наука», 1974.
- Лосев С. А. Кинетика релаксационных процессов в ударных волнах и охлаждающихся потоках газов. — ФГВ, 1973, № 6, с. 767.

11. Сафарян М. Н., Скребков О. В. Константы скоростей газофазных реакций в топливных системах. Приложение к отчету. Черноголовка, 1968.
12. Кондратьев В. Н. Константы скоростей газофазных реакций. Справочник. М., «Наука», 1970.
13. Taylor R. L., Bitterman S. Survey of vibrational relaxation data for processes important in the CO₂—N₂ laser system.—«Rev. Mod. Phys.», 1969, vol. 41, N 1, p. 26.
14. Millikan R. G., White D. R. Systematic of vibrational relaxation.—«J. Chem. Phys.», 1963, vol. 39, N 12, p. 3209.
15. Anderson J. D. The effect of kinetic rate uncertainties on gasdynamic laser performance. AIAA Paper, N 74—176.
16. Seery D. J. On a shock tube study of CO₂—CO vibrational energy transfer.—«J. Chem. Phys.», 1972, vol. 56, N 1, p. 631.
17. Rosenberg C. W., Bray K. N. C., Pratt N. H. Shock tube vibrational relaxation measurements N₂ relaxation by H₂O and CO₂—N₂ V—V rate.—«J. Chem. Phys.», 1972, vol. 56, N 7, p. 3230.
18. Sato G., Tsushiya S., Kuratani K. Shock wave study of vibrational energy exchange between diatomic molecules.—«J. Chem. Phys.», 1969, vol. 50, N 5, p. 1911.
19. Taylor R. L., Camac M., Feinberg R. M. Measurements of vibrational-vibrational coupling in gas mixtures.—In: Symposium on Combustion, 11th. Univ. Calif., 1966, California, 1967, p. 49.
20. Kamimoto G., Matsui H. Vibrational relaxation of nitric oxide in argon.—«J. Chem. Phys.», 1970, vol. 53, N 10, p. 3987.
21. Kiefer J. H., Lutz R. W. Vibrational relaxation of hydrogen.—«J. Chem. Phys.», 1966, vol. 44, N 2, p. 668.
22. Kung R. T. V., Center R. E. High temperature vibrational relaxation of H₂O by H₂O, He, Ar and N₂.—«J. Chem. Phys.», 1975, vol. 62, N 6, p. 2187.
23. Лосев С. А., Макаров В. Н. Оптимизация коэффициента усиления в газодинамическом лазере на углекислом газе.—«Квант. электроника», 1974, № 7, с. 1633.
24. Лосев С. А., Макаров В. П., Павлов В. А., Шаталов О. П. Исследование процессов в газодинамическом лазере на ударной трубе большого диаметра.—ФГВ, 1973, № 4, с. 463.
25. Данилов В. В., Кругляков Э. П., Шунько Е. В. Измерение вероятности перехода P 20(0001—1000) CO₂ и ударного уширения при столкновениях с CO₂, N₂ и He.—ПМТФ, 1972, № 6, с. 24.

УДК 621.375.826:541.127

К ТЕОРИИ СТАЦИОНАРНОГО СО-ЛАЗЕРА

A. П. Напартович, И. В. Новобранцев, А. Н. Старостин

(Москва)

Кинетические уравнения, описывающие работу СО-лазера, являющиеся одним из наиболее перспективных в смысле КПД и удельных характеристик, представляют собой нелинейную систему высокого порядка (30—60). Проведенные численные исследования параметрических зависимостей мощности генерации недостаточны для анализа экспериментальных данных и проектирования новых систем. В данной работе предлагается простая модель СО-лазера, позволяющая находить зависимости мощности и спектра генерации от параметров установки.

Приближенная аналитическая теория распределения двухатомных молекул по колебательным уровням в условиях сильного отрыва эффективной температуры колебаний T_1 от температуры газа T построена в работах [1, 2]. Условие применимости использованного в [1, 2] резонансного приближения имеет вид

$$\exp(-\delta_{VV}v^*) \ll C \frac{6\Delta E}{T\delta_{VV}^3},$$