

Theoretical study Zeldovich reactions in thermally nonequilibrium conditions

M.Pogosbekian, A.Sergievskaya

*Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University,
1, Michurinsky prospect, Moscow, 119192, Russia
pogosbekian@imec.msu.ru, sergievskaya@imec.msu.ru*

Abstract

The presentation was demonstrated on XI All-Russian Congress of the Fundamental Problems of Theoretical and Applied Mechanics (Kazan, 20 – 24 August, 2015). It contains the results of trajectory calculations for the processes of dissociation of $O_2 + O \rightarrow 3O$, $N_2 + O \rightarrow 2N + O$, and exchange reactions $N_2 + O \rightarrow NO + N$ and $O_2 + N \rightarrow NO + O$, and others. We have obtained the rate constants in the conditions thermal nonequilibrium in the mode and the level approximations. A comparative analysis of the trajectory calculations with theoretical models of Marrone - Treanor, Smekhov, Macheret - Fridman and others was done. The level factor and the nonequilibrium factor for these models were obtained. Temperature dependences of the parameters of the relevant models were proposed as a result of the comparison with trajectory calculations. The new dependences allow to obtain the good description of the results of trajectory calculations with models results in the translational temperature range from 1000 to 20000K.

Keywords: chemical reaction, trajectory calculation, thermal nonequilibrium, model of process

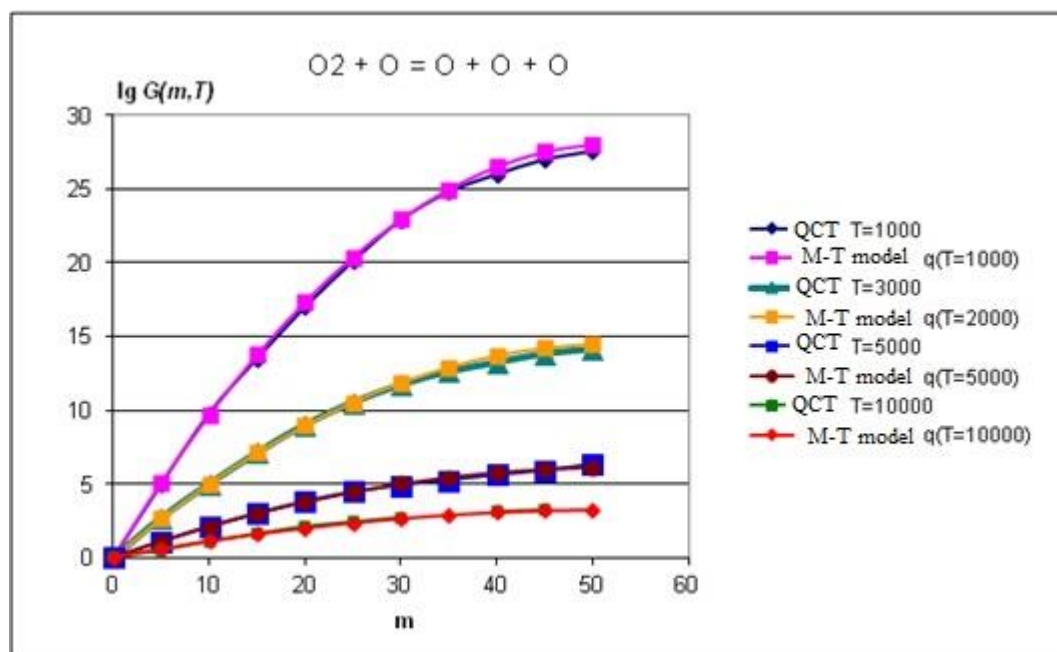


Fig. 1 The comparison of the model Marrone-Treanor with results of QCT calculations in the case when parameter of the model q depends from temperature T .

УДК 539.196+541.127

Теоретическое исследование реакций Зельдовича в термически неравновесных условиях

М.Ю. Погосбемян, А.Л. Сергиевская

*Институт механики МГУ им. М.В.Ломоносова,
119192, Москва, Мичуринский пр., 1
pogosbekian@imec.msu.ru, sergievvska@imec.msu.ru*

Аннотация

Доклад был представлен на XI Всероссийском съезде по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Казань 20 — 24 августа 2015). В работе представлены результаты траекторных расчетов для процессов диссоциации $O_2+O \rightarrow 3O$, $N_2+O \rightarrow 2N+O$, и обменных химических реакций $N_2+O \rightarrow NO+N$ и $O_2+N \rightarrow NO+O$ и др. Получены константы скорости в условиях термической неравновесности как в модовом, так и в уровневом приближении. Проведен сравнительный анализ с теоретическими моделями Мэрроуна-Тринора, Смехова, Мачерета-Фридмана, γ -моделью и др. по уровневому фактору и фактору неравновесности. На основе проведенного сравнения были получены температурные зависимости соответствующих параметров моделей, которые позволяют хорошо описать результаты траекторных расчетов на всем диапазоне поступательных температур от 1000 до 20000К.

Ключевые слова: химическая реакция, траекторный расчет, термическая неравновесность, модель процесса

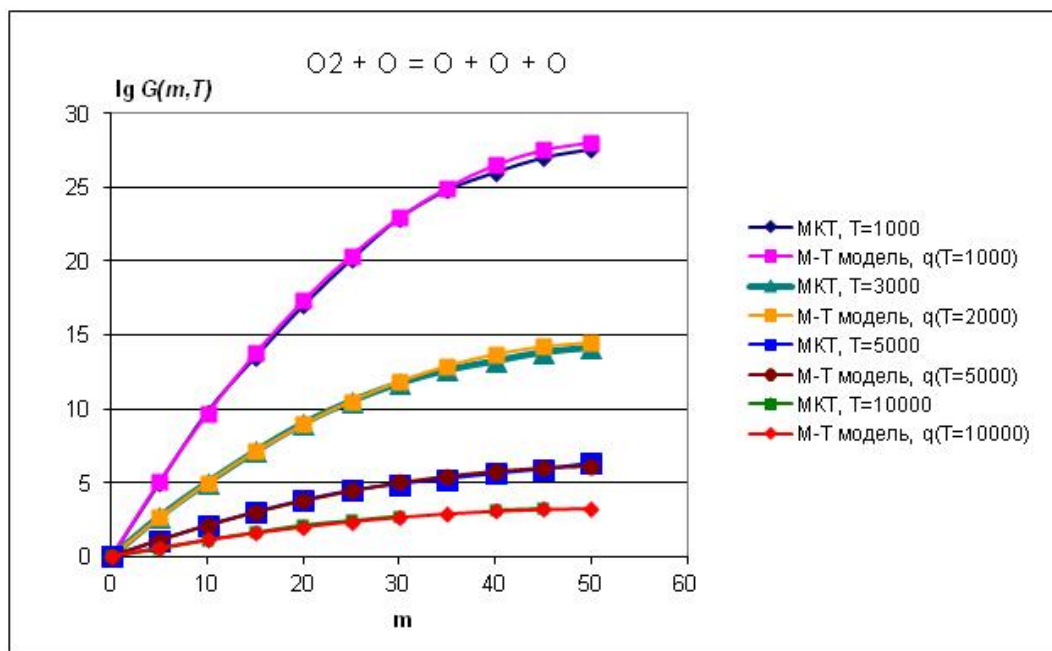


Рис. 1 Сравнение уровня фактора, полученного по модели Мэрроуна-Тринора (М-Т модель), с данными траекторных расчетов (МКТ)