

МОДЕЛИРОВАНИЕ УРОВНЕВЫХ ПРОЦЕССОВ В ХИМИЧЕСКИ РЕАГИРУЮЩЕМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ ГАЗЕ

С.А.Лосев, А.Л.Сергиевская, Э.А.Ковач

Научно-исследовательский институт механики Московского Государственного университета им. М.В.Ломоносова,
Мичуринский проспект, 1, Москва, 119192, Россия
e-mail: losev@imec.msu.ru

Рассматриваются модели процессов, протекающих в химических реакциях в газе при сильном и резком воздействии на газ, приводящем к нарушению больцмановского равновесия между поступательными и колебательными степенями свободы молекул-реагентов и с описанием заселенностей отдельных колебательных уровней. Выполнена оценка условий рассмотрения уровневого приближения при решении задач физико-химической кинетики на примере высокотемпературного воздуха. Представлены примеры описания базы моделей уровневых реакций диссоциации и обменных химических реакций. Указаны критерии выбора рекомендуемых моделей по их универсальности, простоте и достоверности.

Введение

Процессы термически неравновесной химической кинетики – это процессы, в которых отсутствует равновесие между поступательными и колебательными степенями свободы молекул как при протекании химических реакций (реагирующий газ), так и без химических превращений (релаксирующий газ). Значительное нарушение равновесия между указанными степенями свободы молекул происходит при сильном и резком воздействии на газ в ударных волнах, при сверхзвуковом течении в соплах и струях, в пограничных слоях, при интенсивном горении, детонации и взрывах, при образовании и реализации активных сред в различных лазерах и воздействии на газ лазерного излучения.

Рассмотрение термически неравновесных процессов проводится в двух приближениях кинетики химических реакций:

(1) в отсутствие равновесия между поступательными и колебательными сте-

пенями свободы молекул-реагентов, но с сохранением больцмановского распределения (двух- и многотемпературный газ, модовая кинетика);

(2) в отсутствие больцмановского распределения с описанием заселенностей отдельных колебательных уровней (уровневая кинетика).

Наличие или отсутствие больцмановского распределения молекул по колебательным уровням приводит к необходимости моделирования соответственно на основе модовой или уровневой кинетики. Возможность применения того или другого подхода определяется ролью колебательно-колебательного VV-обмена в среде молекул реагирующего газа.

Моделирование термически неравновесного газа основано на триаде физических объектов: *частицы* (атомы, молекулы, ионы, электроны), *процессы* (результат взаимодействия частиц), *среда* (совокупность множества частиц и протекающих процессов). Модели этих объектов представляются на трех уровнях (физика–математика–информатика):

- *физическая модель* формируется в виде образов, представлений и допущений при описании частиц, процессов и среды;
- *математическая модель* включает набор переменных для описания исследуемых объектов, формулы, соотношения и уравнения, связывающие эти переменные и входящие в них параметры и коэффициенты;
- *информационная модель* дает структурированное представление элементов информации и связей между ними, реализующее физическую и математическую модели предметной области, что необходимо для обеспечения накопления, обработки и манипулирования информацией в интересах пользователя.

Подробное описание уровней моделей процессов в химически реагирующем высокотемпературном газе представлено во втором издании первого тома Справочника «Физико-химические процессы в газовой динамике» [1]¹.

Оценка необходимости уровняго рассмотрения при решении задач химической кинетики в газе высокой температуры

Относительно быстрый VV-обмен способствует установлению больцмановского распределения по колебательным уровням реагирующих молекул, что обеспечивает применение модовой кинетики. Протекание процессов колебательно-поступательного VT-обмена и различных химических реакций при различных температурах и относительно медленном VV-обмене приводит к разнообразным распределениям молекул-реагентов и продуктов реакций по колебательным уровням – к существенной роли уровняго кинетики.

Оценка необходимости решения задач в уровняго приближении может быть выполнена по результатам сравнения скорости протекания VV-обмена со скоростью протекания VT-обмена и аналогично – со скоростью химических реакций с соответствующими константами скорости $k_{VV}(T)$, $k_{VT}(T)$ и $k_{ch}(T)$, где аргумент T – температура газа. Наиболее значимой оценкой возможности установления больцмановского распределения является расчет скорости указанных процессов с участием самых нижних – основного и первого возбужденного колебательных состояний молекул с соответствующими константами скорости:

$$\begin{aligned}k_{VV}(T) &= k_{10}^{01}(T), \\k_{VT}(T) &= k_{10}(T), \\k_{ch}(T) &= k_{ch}(T, m=0).\end{aligned}$$

Здесь индексы <10>, <01> указывают номера меняющихся колебательных состояний в процессах VV- и VT-обменов, m – номер исходного колебательного уровня молекул-реагентов в химической реакции.

Относительную скорость протекания того или иного рассматриваемого процесса удобно оценить, используя выражение для характерного времени этого процесса:

$$\tau(T) = 1/k(T) \cdot n,$$

где $k(T)$ – константа скорости; n – полное число частиц в единице объема газа. Таким образом, отношение скорости процессов может быть записано в виде отношений характерных времен:

Сравнение VV-обмена и VT-обмена

$$\frac{\tau_{VV}(T)}{\tau_{VT}(T)} = \frac{k_{10}(T)}{k_{10}^{01}(T)}$$

Сравнение VV-обмена и химической реакции

$$\frac{\tau_{VV}(T)}{\tau_{ch}(T)} = \frac{k_{ch}(T)}{k_{10}^{01}(T)}$$

¹ Интернет-информация об этом Справочнике находится на сайте издательства «Научный мир» (Россия, Москва) <<http://bookish.iring.ru>>, заказ на доставку – по адресу <naumir@benran.ru>

Результат такого сравнения приводит к следующему выводу.

Условие образования больцмановского распределения (для описания модовой кинетики):

$$\tau_{VV} \ll \tau_{VT} \quad \tau_{VV} \ll \tau_{ch}$$

Условие отсутствия больцмановского распределения (для описания уровневого кинетики):

$$\tau_{VV} \geq \tau_{VT} \quad \tau_{VV} \geq \tau_{ch}$$

Таким образом равенство $\tau_{VV} = \tau_{VT}$ и $\tau_{VV} = \tau_{ch}$ является условной границей перехода от модового к уровневому описанию процессов.

Оценка эффекта больцманизации зависит от конкретных условий решаемой задачи – молекулярного состава газа, температурного режима изучаемого процесса, моделей, описывающих колебательный энергообмен. Примером такой оценки могут быть процессы в высокотемпературном воздухе за фронтом ударной волны с участием молекул азота, кислорода и окиси азота – до завершения диссоциации. Большую роль при этом играют радикалы – атомы кислорода и азота, образующиеся в этих смесях.

Рассмотрим результаты сравнения характерных времен VV-обмена и VT-обмена в диапазоне температур 1000 ÷ 20000 К. В качестве основного возьмем процесс VV-обмена $N_2(1) + O_2(0) \rightarrow N_2(0) + O_2(1)$ (в скобках указаны номера колебательных уровней) для сравнения с VT-обменом при столкновениях молекул N_2 и O_2 (на первом колебательном уровне) с N, N_2 , NO, O, O_2 .

В рассматриваемом диапазоне температур значения констант скорости k_{VV} и k_{VT} в расчетах по различным моделям заметно различаются. Так, применение обобщенной теории Шварца – Славского – Герцфельда (SSH) (см. [1], стр. 125, модель V.3), модели возмущенного

гармонического осциллятора (модели Адамовича) (см. [1], стр. 129, модель V.4) и обобщенной эйкональной модели Горбачева (см. [1], стр. 133, модель V.5) без учета отмечаемых в первых двух моделях ограничений (выше 10000 К) приводит к результатам, приведенным в таблице 1.

Таблица 1

Значения $\lg(\tau_{VV}/\tau_{VT})$ в расчетах по моделям, указанным в тексте, при VT-обмене:

N_2 – молекул N_2 при столкновениях с молекулами O_2

O_2 – молекул O_2 при столкновениях с молекулами N_2

Модель	$T=1000$	3000	10000	20000	
N_2 {	SSH	-2,92	-1,19	0,39	1,09
	Адамович	-1,68	-0,21	-1,06	1,31
	Горбачев	-3,08	-1,31	-0,14	0,19
O_2 {	SSH	-0,06	-0,88	1,75	2,12
	Адамович	0,68	1,48	1,86	1,66
	Горбачев	-0,2	0,77	1,16	1,04

Результаты расчета отношения τ_{VV}/τ_{VT} по наиболее достоверной модели Горбачева для указанных выше процессов обмена приводятся на рис. 1 и 2. Модовое приближение возможно при рассмотрении колебательного энергообмена молекул азота при не слишком высоких температурах, кроме столкновений с атомами N, O (см. рис.1).

Колебательный энергообмен молекул кислорода приводит к необходимости применения уровневого приближения, что также особенно существенно при учете столкновений с атомами N, O (см. рис.2).

Таким образом, выявляется важная роль уровневого рассмотрения кинетики в смесях с атомарными компонентами.

Химические реакции нарушают больцмановское распределение по коле-

батальным уровням молекул, которое восстанавливается только в результате быстрого VV-обмена. Роль химических реакций оценим на примере диссоциации молекул N_2 , O_2 .

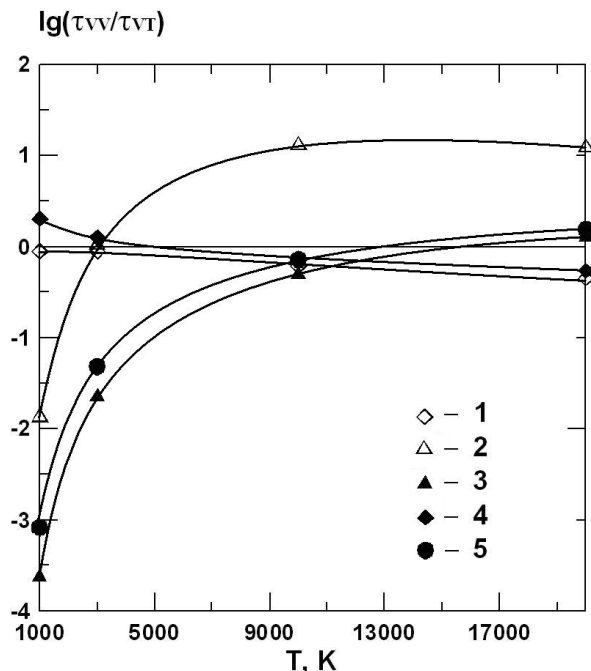


Рис.1. Отношение характерного времени τ_{VV} колебательно-колебательного VV-обмена при столкновениях молекул $N_2 + O_2$ ко времени τ_{VT} колебательно-поступательного VT-обмена в молекуле азота N_2 при столкновениях: 1 – $N_2(1 \rightarrow 0) + N$; 2 – $N_2(1 \rightarrow 0) + N_2$; 3 – $N_2(1 \rightarrow 0) + NO$; 4 – $N_2(1 \rightarrow 0) + O$; 5 – $N_2(1 \rightarrow 0) + O_2$

Наиболее обоснованное моделирование процессов химической кинетики при высоких температурах обеспечивается при решении динамических задач столкновения молекул в рамках классической механики и использовании метода прямого статистического моделирования. Выполняемая таким образом численная реализация решения уравнения Гамильтона с использованием статистического розыгрыша начальных данных определяется как метод квазиклассических траекторий (МКТ). Уровневые константы скорости диссоциации k_d , полученные в результате вычислений по МКТ, представлены в описании γ -модели Лосева и мо-

дели Левицкого (см. ниже) с расчетом переходов молекул с основного колебательного уровня ($m = 0$).

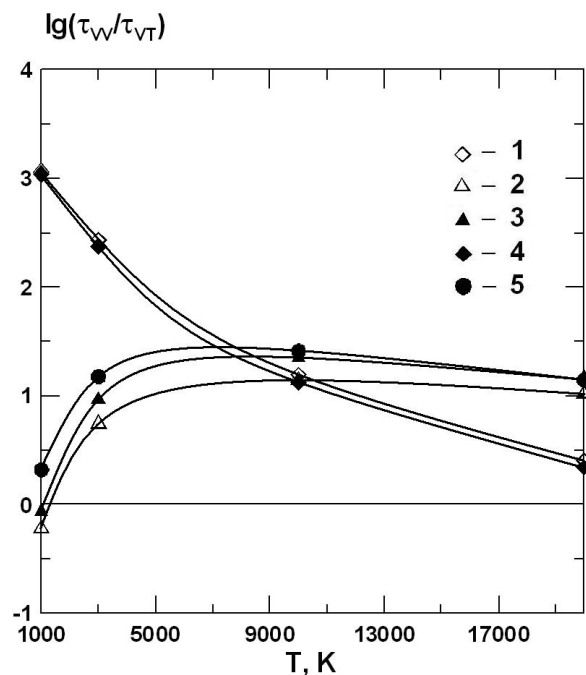


Рис.2. Отношение характерного времени τ_{VV} колебательно-колебательного VV-обмена при столкновениях молекул $N_2 + O_2$ ко времени τ_{VT} колебательно-поступательного VT-обмена в молекуле кислорода O_2 при столкновениях:

1 – $O_2(1 \rightarrow 0) + N$; 2 – $O_2(1 \rightarrow 0) + N_2$; 3 – $O_2(1 \rightarrow 0) + NO$; 4 – $O_2(1 \rightarrow 0) + O$; 5 – $O_2(1 \rightarrow 0) + O_2$

Примеры полученных в расчетах отношений характерного времени VV-обмена к характерному времени химической реакции для различных моделей VV-обмена и химических реакций в воздухе представлены на рис. 3, 4. Рисунок 3 при рассмотрении диссоциации молекул азота (при $m = 0$) по моделям МКТ демонстрирует возможность применения модового описания химической кинетики вплоть до высоких температур.

Рассмотрение диссоциации молекул кислорода (при $m = 0$), как и при сравнении роли VV-обмена с VT-обменом, указывает на необходимость уровневого описания кинетики при высоких температурах (см. рис.4).

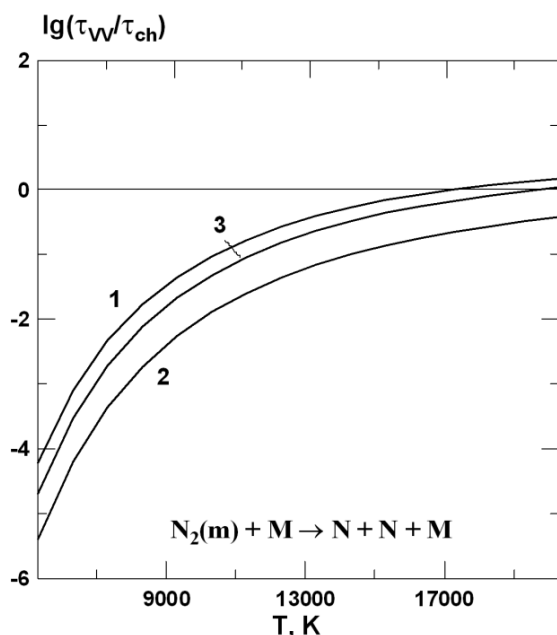


Рис.3. τ_{VV} – характерное время VV-обмена по теории SSH при столкновениях: 1 – $O_2(1 \rightarrow 0) + N_2(0 \rightarrow 1)$; 2 – $O_2(1 \rightarrow 0) + NO(0 \rightarrow 1)$; 3 – $NO(1 \rightarrow 0) + N_2(0 \rightarrow 1)$; τ_{ch} – характерное время диссоциации молекул азота с уровня $m = 0$ по γ -модели

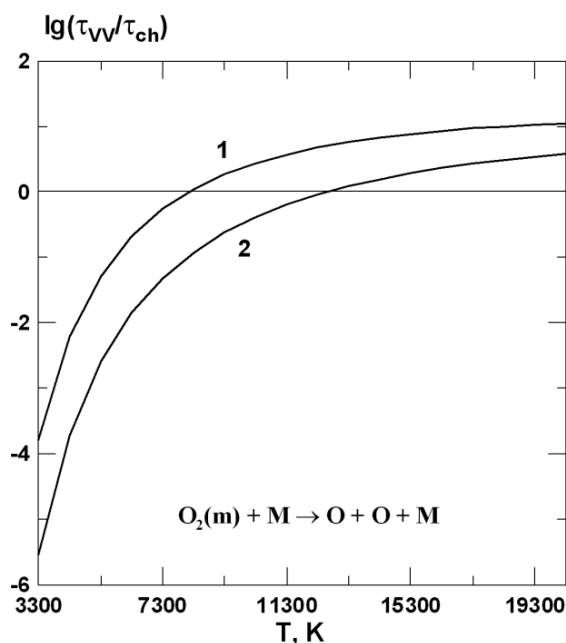


Рис.4. τ_{VV} – характерное время VV-обмена при столкновениях: 1 – $O_2(1 \rightarrow 0) + N_2(0 \rightarrow 1)$ по теории SSH; 2 – $O_2(1 \rightarrow 0) + O_2(0 \rightarrow 1)$, резонансный обмен, по модели Адамовича; τ_{ch} – характерное время диссоциации молекул кислорода с уровня $m = 0$ по модели Левицкого

Проведенные оценки эффекта Boltzmannization в высокотемпературном воздухе не являются однозначными – различия результатов расчета по тем или иным моделям рассматриваемых процессов достигают более одного порядка по величине. Тем не менее, эти оценки позволяют сделать следующие выводы.

- Решение задач термически неравновесной химической кинетики в модальном приближении с Boltzmannian распределением по колебательным состояниям различных молекул наиболее обосновано при невысоких температурах.
- Необходимость решения задач химической кинетики в уровневом приближении с описанием заселенности различных колебательных уровней молекул возрастает при рассмотрении более высоких значений температуры.
- Уровневое описание в широком диапазоне температур необходимо при учете столкновений с атомарными компонентами, радикалами.

База уровневых моделей термически неравновесных процессов

При рассмотрении процессов модальной и уровневой кинетики основной проблемой является знание коэффициентов в соответствующих уравнениях – величин констант скорости колебательного энергообмена и химических реакций. Эти величины являются целевыми функциями информационного фонда, необходимого для решения поставленной задачи.

Этот информационный фонд состоит из двух частей: 1) хранимый (экстенсивный) фонд в виде баз данных, включающих конкретные сведения о тех или иных величинах констант скорости колебательного энергообмена и химических реакций; 2) логико-алгоритмический (интенсивный) фонд в виде баз моделей, позволяющих вычислять значения этих констант в том или ином приближении.

Данные, основанные на экспертном анализе известных работ, в основном – экспериментальных, опубликованы во многих справочниках и обзорах, однако в этих базах данных мало сведений о термически неравновесных реакциях. *Базы данных* включают, как правило, сведения о величинах констант скорости термически равновесных реакций в виде аппроксимированных функций температуры газа $k(T)$. Сведения о константах скорости термически неравновесных реакций представляются формулами, реализующими записи *моделей процессов* – для двухтемпературной (модовой) кинетики в виде $k(T, T_v)$, где T_v – колебательная температура (здесь и далее – аналогично для многотемпературного газа) и для уровневой кинетики в виде $k(T, m)$, где m – номера колебательных уровней.

Наиболее часто в экспериментальных и теоретических работах рассматриваются реакции в определенных колебательных состояниях только молекул-реагентов, либо только молекул-продуктов реакции, и реже – тогда, когда в реакциях фиксируются колебательные состояния как реагентов, так и продуктов реакции. Таким образом, уровневая кинетика химических реакций имеет три приближения:

Исходная уровневая кинетика – в реакцию вступают молекулы-реагенты в определенных колебательных состояниях, а распределение образующихся молекул-продуктов реакции по колебательным состояниям не фиксируется (либо эти состояния отсутствуют – для одноатомных частиц).

Результирующая уровневая кинетика – указываются колебательные состояния молекул, образующихся в реакции, а распределение по колебательным состояниям молекул, вступающих в реакцию, не фиксируются (либо эти состояния отсутствуют – для одноатомных частиц).

Полная уровневая кинетика – рассматриваются колебательные состояния как молекул-реагентов, так и молекул-продуктов реакции.

Сформированная и подготовленная база уровневых моделей включает восемь моделей.

Константа скорости диссоциации двухатомных молекул на m -ом уровне по модели Мэрроуна–Тринора – модели распределенной вероятности диссоциации ([1], стр. 287, 316, модели С.21, С.31) равна

$$k_{dm}(T) = k_d^0(T) \left\{ \frac{Q_v(T)}{Q_v(-U)} \exp \left[\frac{E_m}{k} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{U} \right) \right] \right\}$$

где k_d^0 – термически равновесная константа скорости; E_m – колебательная энергия на m -ом уровне; Q_v – статистическая сумма по колебательным состояниям; U – параметр, характеризующий распределение вероятности диссоциации.

Уровневые константы скорости реакций обмена k_{fm} в предположении полной эффективности поступательной энергии столкновения реагентов в преодолении энергии активации E_a и учета эффективности вклада колебательной энергии в энергию активации αE_a (α -модель) записываются в виде

$$k_{fm}(T) = A(T) \cdot \exp \left[- \frac{E_a - \alpha E_m}{kT} \cdot \bar{\theta}(E_a - \alpha E_m) \right],$$

где α – коэффициент эффективности колебательной энергии; $\bar{\theta}$ – функция Хэ-

висайда: $\bar{\theta}(x) = 1$ при $x \geq 0$, $\bar{\theta}(x) = 0$ при $x < 0$. Предэкспоненциальный множи-

тель $A(T)$ по оценке близок к величине константы скорости газокинетических столкновений – частоте столкновений при единичной концентрации частиц $Z = \pi R_0^2 (8kT/\pi\mu)^{1/2}$; R_0 – радиус упругого столкновения; μ – приведенная масса сталкивающихся частиц.

Значения коэффициента α для многих реакций исходной уровневой кинетики приводятся в [2], примеры: $\alpha = 0,51$ для реакции $N_2(m) + O \rightarrow N + NO$, $\alpha = 0,24$ для реакции $O_2(m) + N \rightarrow O + NO$, $\alpha = 0,94$ для реакции $NO(m) + O \rightarrow N + O_2$, $\alpha = 0,03$ для реакции $OH(m) + H_2 \rightarrow H_2O + H$ и другие – см. описание модели С.19 в [1] (стр. 281).

Аппроксимация результатов решения задач по методу квазиклассических траекторий позволяет сформулировать соответствующую модель. К таким моделям относится модель Левицкого для реакций химического обмена и γ -модель Лосева для реакций диссоциации с учетом реального внутримолекулярного потенциала Ридберга – Клайна – Риса и межмолекулярного потенциала Борна – Майера с параметрами, полученными в экспериментах по рассеянию молекулярных пучков.

По модели Левицкого ([1], стр. 317, модель С.32, см. [3]) аппроксимация ре-

зультатов решения динамической задачи столкновений для реакций химического обмена в приближении исходной уровневой кинетики приводит к уровневой константе скорости:

$$k_{fm}(T) = A \cdot \exp \left[-\frac{E_a - \gamma E_m}{\beta kT} \cdot \bar{\theta}(E_a - \gamma E_m) \right]$$

где β, γ – параметры, характеризующие вклад поступательной и колебательной энергий в реакцию; $A \approx \pi R_0^2 (8kT/\pi\mu)^{1/2}$; $\bar{\theta}$ – функция Хэйвисайда. Примеры приведены в таблице 2.

Таблица 2

Реакция	E_a , эВ	β	γ
$H_2(m) + O \rightarrow OH + H$	0,41	0,72	0,21
$N_2(m) + O \rightarrow NO + N$	3,20	0,90	0,52
$O_2(m) + N \rightarrow NO + O$	0,33	0,46	0,12

Уровневая константа скорости диссоциации по γ -модели Лосева ([1], стр. 315, модель С.30, [3]) записывается в виде

$$k(T, E_m) = k^0(T) \exp \left(\frac{\gamma E_m}{T} \right) \frac{\{1 - \exp [(\gamma - 1)\theta/T]\} [1 - \exp(-D/T)]}{\{1 - \exp [(\gamma - 1)D/T]\} [1 - \exp(-\theta/T)]},$$

$$k^0(T) = A \cdot \exp(-D/T) [1 - \exp(-\theta/T)],$$

где $k^0(T)$ – термически равновесная константа скорости диссоциации; D – энергия диссоциации; E_m – колебательная энергия на m -ом уровне (в градусах); θ – характеристическая колебательная температура молекул, A – предэкспоненциальный множитель в единицах $[cm^3/моль \cdot c]$.

Значения параметра γ получаются путем сравнения с результатами экспериментов по изучению кинетики диссоциации в ударных волнах (см. таблицу 3)

Расчеты по полной (state-to-state) уровневой кинетике выполнены М.Ю. Погосбеяном [4] для обменных реакций $N_2(m) + O \rightarrow NO(m') + N$ и

$\text{CO}(m) + \text{N} \rightarrow \text{CN}(m') + \text{O}$. На рис. 5 представлены результаты расчетов для первой из этих реакций.

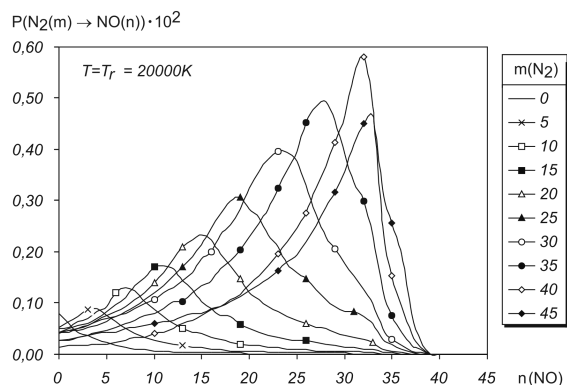


Рис.5. Вероятность обменной реакции $\text{N}_2(m) + \text{O} \rightarrow \text{NO}(m') + \text{N}$ для различных колебательных состояний m молекулы N_2 в зависимости от колебательного состояния m' молекулы NO .

Среди других уровневых моделей отметим также:

– Модель Варнатца на основе теории реагирующих твердых сфер ([1], стр. 318, модель С.33);

– Модель вибронных термов (по Стариковскому [1], стр. 321, модель С.35) для полной уровневой кинетики – как результат расчета вероятности электронно-неадиабатического перехода между сдвинутыми потенциальными поверхностями (см. [2]);

– Теоретико-информационное приближение, основанное на вычислении т.н. априорных констант скорости (по плотности колебательных состояний молекул и полной энергии системы сталкивающихся частиц) и поправочного параметра с учетом известных реальных констант скорости ([1], стр. 319, модель С.34).

Верификация уровневых моделей на основе результатов траекторных расчетов показывает, что параметры моделей не являются постоянными величинами и зависят от температуры T и номера колебательного уровня m . Так, согласно [5], параметр U в модели Мэрроуна–Тринора при низких температурах и $m > 45$ стре-

мится к $U \rightarrow \infty$, равен $U = D_0/6$ при $T \leq 4000$ К, $m \sim 20$ и при $T > 6000$ К, $m > 30$, а при $T \geq 6000$ К и $m \sim 20$ равен $U = 3T$. В работе [6] для реакции $\text{N}_2(m) + \text{O} \rightarrow \text{NO} + \text{N}$ результаты МКТ по расчету уровневой константы скорости $k(m)$ аппроксимированы четырехпараметрической зависимостью для нескольких значений температуры T в диапазоне $T = 7000 \div 14000$ К; практическое применение этих аппроксимаций затрудняется их ограниченностью, отсутствием соответствующих формул с зависимостью $k(m)$ от температуры T . Эти результаты, как и для многих других реакций, не могут быть приняты в статусе моделей процессов, поскольку они представляют лишь конкретную информацию о конкретных реакциях – с определенной достоверностью, но без универсальности и простоты.

Критерии выбора моделей: универсальность, простота, достоверность

Выбор модели для практического применения определяется ее универсальностью, простотой и достоверностью (точностью). Универсальность модели предусматривает возможность рассмотрения большого круга протекающих процессов, в том числе при описании реакций с участием радикалов и других неадиабатических процессов.

В двухтемпературном (модовом) приближении наиболее универсальной и простой является модель Парка, когда в общепринятом выражении для константы скорости химической реакции величина аргумента – температуры газа включает простую зависимость от колебательной температуры в соответствии с больцмановским распределением молекул-реагентов по колебательным уровням (см. [1], стр. 308). Среди уровневых моделей достаточно универсальны и описывают

большое число реакций α -модель и модель Мэрроуна–Тринора с простыми математическими соотношениями (см. выше).

Конкретные ограничения возможности применения моделей указаны в соответствующих разделах справочника [1].

Решение проблемы достоверности (точности) опирается на результаты экспериментальных исследований и моделирование динамики столкновений по методу квазиклассических траекторий (МКТ). Как указывалось выше, результаты экспериментов и реализации МКТ применяются при верификации моделей и определении значений параметров в эмпирических моделях.

Заклучение

Современное информационное обеспечение моделирования процессов термически неравновесной химической кинетики способствует решению задач газовой динамики и лазерной физики. Разрабаты-

ваемые базы моделей обеспечивают проведение исследований в отсутствие информации о кинетических характеристиках в известных базах данных. Возможность и целесообразность применения рекомендуемой модели определяется уровнем ее универсальности, простоты и достоверности.

Развитию и накоплению фонда моделей, их анализу, экспертизе и модификации будет способствовать применение электронных коллекций и электронных журналов, как основы современного информационного обеспечения научных исследований. В частности, по теме статьи таким изданием с 2003 года является Электронный журнал «Физико-химическая кинетика в газовой динамике», с которым можно ознакомиться на сайте <http://www.chemphys.edu.ru>.

Авторы признательны М.Ю.Погосбекяну и Е.Г.Колесниченко за полезные обсуждения и сотрудничество и благодарят Т.А.Суржикову за подготовку статьи к публикации.

Литература

1. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Том 1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. Под ред. Г.Г. Черного, С.А. Лосева. (Научный мир, Москва, 2007).
2. В.Д.Русанов, А.А.Фридман, Физика химически активной плазмы. (Наука, Москва, 1984).
3. С.А.Лосев, Э.А.Ковач, М.Ю.Погосбекян, А.Л.Сергиевская, Электронный журнал «Физико-химическая кинетика в газовой динамике», Т.1, (2003), <http://www.chemphys.edu.ru>. 2003-12-24-001.
4. M.Yu.Pogosbekian, Nonequilibrium Processes and their Applications. V Intern. School-Seminar, (Minsk, 2000), p. 26.
5. M.Capitelli, F.Esposito, E.V.Kustova, E.A.Nagnibeda, Chem. Phys. Lett. 330, 207 (2000).
6. D.Bose, G.V.Candler, J. Chem. Phys. 104, 2825 (1996).

MODELLING OF LEVEL PROCESSES IN A CHEMICALLY REACTING HIGH-TEMPERATURE GAS

S.A.Losev, A.L.Sergievskaya, E.A.Kovach

Institute of Mechanics, M.V.Lomonosov, Moscow State University,
Michurinsky prospect, 1, Moscow, 119192, Russia
e-mail: losev@imec.msu.ru

Models of processes in gas chemical reactions under a strong and abrupt action, resulting in a violation of the Boltzmann equilibrium between translational and vibrational degrees of freedom in reagent molecules are considered with a description of different vibrational level populations. The conditions of the level approximation while solving the problems of physical and chemical kinetics are evaluated using an example of high-temperature air. The examples of description of a base of models for level dissociation and chemical exchange reactions are provided. The criteria of choice of the suggested models are given from the point of view of universality, simplicity, and reliability.