

**ВЗАИМНОЕ ВЛИЯНИЕ АТОМНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ
И КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ Br_2
В УСЛОВИЯХ СВЕРХЗВУКОВОГО РАСШИРЕНИЯ
В СОПЛЕ**

А. П. Генич, С. В. Куликов, Г. Б. Манелис, Ю. П. Мягков

(Черноголовка)

Взаимное влияние процессов колебательной релаксации, диссоциации и рекомбинации в двухатомном газе широко изучалось в последние годы [1—13]. Это взаимодействие колебательной и химической кинетики во многом определяет картину явлений, происходящих при высокотемпературной диссоциации молекулярного газа в ударных волнах и при атомной рекомбинации в расширяющихся потоках. Основная часть исследований в этой области относится к изучению взаимодействия диссоциации и колебательной релаксации [1—11]. Значительно меньше внимания уделялось изучению взаимного влияния химической и колебательной кинетики в процессах, где преобладает рекомбинация [12, 13]. В работе [12] сделана попытка рассмотреть условия, при которых в расширяющемся газовом потоке возможно колебательно-рекомбинационное взаимодействие. Исследовалась рекомбинация атомов кислорода, сильно разбавленных аргоном. Это позволило исключить из рассмотрения колебательно-колебательный обмен энергии. Предполагая, что в процессе рекомбинации устанавливается квазистационарное распределение образующихся молекул по колебательным состояниям, авторы [12] предсказали возможность избыточной заселенности верхних колебательных уровней и соответствующее замедление атомной рекомбинации.

В работе [13] рассмотрены влияние рекомбинации в расширяющемся потоке на скорость колебательной релаксации образующихся молекул и условия, при которых существенное отклонение от равновесного распределения по колебательным уровням происходит в потоке прежде, чем начнет «замораживаться» рекомбинация. Моделируя молекулу обрезанным гармоническим осциллятором, автор показал, что такие условия реализуются при $T_K > (1/16)D/R$, где T_K — колебательная температура газа в момент нарушения равновесного распределения; D — энергия диссоциации. Отмечено, что при этом возможно существенное увеличение «эффективного» времени колебательной релаксации.

Данная работа посвящена численному исследованию течения через сверхзвуковое сопло частично диссоциированного Br_2 с учетом взаимного влияния колебательной и химической кинетики, которое проведено на основе более реальной, чем в предыдущих работах, физической модели.

Частично диссоциированный бром является удобным объектом для таких исследований. Сравнительно низкая энергия диссоциации Br_2 позволяет ожидать, что при температурах торможения около 3000 К и выполнении определенных условий расширения в сопле взаимное влияние может оказаться существенным.

В работе сделана попытка найти критерии, позволяющие судить о том, когда необходим учет колебательно-рекомбинационного взаимодействия при расчете течения через сопло газа с колебательной и химической неравновесностью.

Для решения поставленной задачи рассматривается стационарное одномерное течение идеальной газовой смеси через сопло без учета вязкости, теплопроводности и диффузии. Оно описывается обычными уравнениями газодинамики

$$\rho u S = \text{const}; \quad \rho u \frac{du}{dx} = -\frac{dp}{dx}; \quad \frac{d}{dx} \left(H + \frac{u^2}{2} \right) = 0$$

$$(p = \rho R T / \mu; \quad u = 1/\alpha; \quad \alpha = \alpha_1 + \alpha_2; \quad H = H_1 \alpha_1 + H_2 \alpha_2),$$

где ρ , u — плотность газовой смеси и скорость потока; p , T — давление и

температура газовой смеси; $S(x)$ — площадь поверхности скоростей, равных скорости на оси сопла в точке x (в случае малых углов раскрытия сопла S совпадает с площадью его поперечного сечения); H — энтальпия единицы массы газовой смеси; μ — молекулярный вес смеси; H_i — энтальпия одного моля i -й компоненты; α_i — число ее молей в единице массы смеси (i — пробегает значения 1, 2, которые соответствуют Br_2 и Br).

Процесс колебательной релаксации в двухатомном газе при наличии диссоциации и рекомбинации в данном случае описывается уравнением [4, 5]

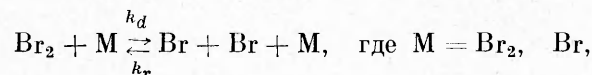
$$(1) \quad \frac{u}{(1-\gamma)^2} \frac{d\gamma}{dx} = \frac{1}{\tau} \frac{(\beta-\gamma)}{(1-\beta)(1-\gamma)} + \frac{(D/R\Theta - \varepsilon)}{\alpha_1} u \frac{d\alpha_1}{dx}$$

$$(\Theta = \hbar\omega_0/k; \quad \gamma = \exp(-\Theta/T_K); \quad \beta = \exp(-\Theta/T); \quad \varepsilon = \gamma/(1-\gamma)),$$

где Θ — характеристическая колебательная температура; ω_0 — частота колебаний; \hbar — постоянная Планка; ε — число квантов колебательной энергии на одну молекулу; D — энергия диссоциации; k — постоянная Больцмана.

Уравнение содержит в правой части два члена, первый из которых описывает релаксацию при неизменном числе молекул, а второй учитывает изменение колебательной энергии за счет изменения числа молекул при диссоциации и рекомбинации.

Уравнения химической кинетики, описывающие реакцию



имеют вид

$$(2) \quad u \frac{d\alpha_1}{dx} = -k_d\alpha_1 + k_r\rho\alpha_2^2, \quad u \frac{d\alpha_2}{dx} = -2(-k_d\alpha_1 + k_r\rho\alpha_2^2),$$

где $k_r = (k_{r1}\alpha_1 + k_{r2}\alpha_2)\rho$; k_{r1} и k_{r2} — константы атомной рекомбинации брома, когда третьим партнером по столкновению является Br_2 и Br ; k_d — неравновесная константа скорости диссоциации.

Приведенное макроскопическое описание релаксации и химической реакции в неравновесных условиях возможно, если среди релаксационных процессов есть процесс, который обеспечивает быстрый обмен энергией между низшими состояниями реагирующей молекулы. Такой обмен приводит к относительно быстрому установлению квазистационарного распределения по этим состояниям, характеризующегося эффективной температурой T_K . Неравновесность химической реакции в этом случае выражается в том, что константа скорости k_d зависит от параметров T и T_K .

При $T_K = T$ $k_d(T)/k_r = K_e$, K_e — константа равновесия. При $T_K \neq T$ $k_d(T, T_K)$ сохраняет смысл истинной константы скорости и может быть с удовлетворительной точностью определена с помощью модели, предложенной в [8].

В этой модели молекула рассматривается как ангармонический осциллятор. Концентрация молекул предполагается достаточной для того, чтобы на нижних колебательных уровнях за счет быстрого обмена колебательными квантами установилось квазиравновесное распределение Тринора [14]. Выше некоторого граничного уровня n^* скорость поступательно-колебательного обмена становится больше скорости колебательно-колебательного обмена и устанавливается больцмановское распределение с температурой поступательного движения.

Константа скорости диссоциации пропорциональна заселенности колебательных уровней вблизи порога диссоциации, поэтому [8]

$$k_d(T, T_K) = k_d(T) \frac{Z(T)}{Z(T_K)} \exp \left[\frac{n^* h \omega_0}{k} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_K} \right) + 2 \chi n^* \left(\gamma \frac{\varepsilon(T_K)}{\varepsilon(T)} - 1 \right) \right],$$

где Z — колебательная статистическая сумма; χ — постоянная ангармоничности. Граничный уровень n^* находится из условия равенства скоростей колебательно-колебательного и поступательно-поступательного обменов

$$(3) \quad \sum_j X_j Q_{n+1,n}^{j,j+1} = P_{n+1,n}^{(1)} + P_{n+1,n}^{(2)} \alpha_2 / \alpha_1.$$

Для вычисления n^* используются вероятности SSH-теории [15]. Вероятность перехода с $n+1$ колебательного уровня на n -й при столкновении с i -й частицей имеет вид

$$(4) \quad P_{n+1,n}^{(i)} = \frac{\delta}{z_0} (n+1) \Phi^2 \Lambda^2 \chi_{n,i}^{1/2} \exp(-3\chi_{n,i}),$$

$$\chi_{n,i} = \left(\frac{\pi^2 \mu_i \omega_n^2}{2\alpha^2 k T} \right)^{1/3}, \quad \Phi^2 = \frac{h \lambda^2 a^2}{2m\omega_0},$$

$$\Lambda_i = \frac{2\pi \mu_i \omega_n}{a^2 h}, \quad \lambda^2 = \frac{1}{2} \frac{m_1^2 + m_2^2}{(m_1 + m_2)^2},$$

где $z_0 = 3$ — ориентационный фактор; m, μ_i — приведенные массы осциллятора и сталкивающихся частиц; i — пробегает значения 1, 2 для V_{r_2} и V_r соответственно; m_1 и m_2 — массы атомов осциллятора. Для V_{r_2} $m_1 = m_2$ и $\lambda^2 = 1/4$, $1/a \approx 2 \cdot 10^{-9}$ см — эффективный радиус действия обменных сил.

Вероятность передачи колебательного кванта осциллятором в $(n+1)$ -м состоянии осциллятору в состоянии j имеет вид

$$(5) \quad Q_{n+1,n}^{j,j+1} = \frac{3 \mu_i^2 \omega_n^2 \Phi^4}{a^2 h} (n+1)(j+1) \operatorname{sech}(A\omega_{nj}),$$

$$A = (2/a) \sqrt{\mu_i / 3kT}, \quad \omega_{nj} = \omega_n - \omega_j.$$

Формула (5) получена путем приближенного усреднения по скоростям сталкивающихся частиц и справедлива при условии $A|\omega_{nj}| < 1,5$. Вычисления, проведенные в данной работе, показали, что решения уравнения для определения n^* находятся в области таких ω_{nj} , при которых это условие выполняется.

Подставляя (4), (5) в (3), получим

$$(6) \quad \frac{3}{4} \frac{kT}{h\omega_0} \sum_j (j+1) X_j \operatorname{sech}(A\omega_{nj}) = \Lambda_1^2 \chi_{1,n}^{1/2} \exp(-3\chi_{1,n}) + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \Lambda_2^2 \chi_{2,n}^{1/2} \exp(-3\chi_{2,n}).$$

Учитывая, что в сумму (6) основной вклад вносит область малых j , положим, следуя [8],

$$X_j = \exp(-j h \omega_0 / k T_K) / Z(T_K), \quad \operatorname{sech}(A\omega_{nj}) = 4 \exp(-2A|\omega_{nj}|).$$

Используя эти соотношения, условие (6) можно преобразовать к виду

$$(7) \quad \frac{3kT}{h\omega_0} \frac{\exp(-2A\omega_{n,n}) (1-\gamma)}{(1-\gamma)^2} = \Lambda_1^2 \chi_{1,n}^{1/2} \exp(-3\chi_{1,n}) + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \Lambda_2^2 \chi_{2,n}^{1/2} \exp(-3\chi_{2,n}).$$

Из решения (7) находится $n = n^*$.

При численном решении задачи уравнения газодинамики интегрировались методом Эйлера с пересчетом [16], а кинетические уравнения методом Ньютона [17]. Это позволило начать расчет из дозвуковой равновесной области и преодолеть трудности, обычно возникающие в задачах такого рода, связанные с интегрированием кинетических уравнений около равновесия. Особая точка, возникающая вблизи критического сечения, находилась путем итерационного подбора массового расхода и сшивки ветвей решения в этой точке. На каждом шаге интегрирования решалось трансцендентное уравнение (7) и вычислялось $k_d(T, T_K)$. Все расчеты выполнены на БЭСМ-6.

Изучалось течение частично диссоциированного брома через плоское клиновидное сопло с полными углами раствора 15; 30 и 60°. Критические сечения этих сопел имели форму щели с высотой 1,6 или 0,3 мм. Ширина сопел во всех случаях 76 мм. Контур дозвукового участка составлял часть окружности с радиусом 1 мм. Условия на входе в сопло $T_0 = 3000$ К и $p_0 = 15$ атм определялись целесообразностью изучения кинетических течений, далеких как от квазиравновесных, так и от квазизамороженных режимов. Кроме того, неравновесный поток должен содержать достаточную концентрацию молекул, чтобы обеспечить быстрый обмен колебательными квантами.

Для величины времени колебательной релаксации Br_2 использованы данные, суммированные в обзоре [18]. Эти значения аппроксимируются температурной зависимостью $\tau_1 = 2,6 \cdot 10^{-9} \exp(40,6 \cdot T^{-1/3})$, τ_1 , атм·с.

Атомарный бром принимался в два раза эффективнее молекулярного. Время релаксации смеси определялось из обычного соотношения

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} + \frac{1}{\tau_2} \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2}.$$

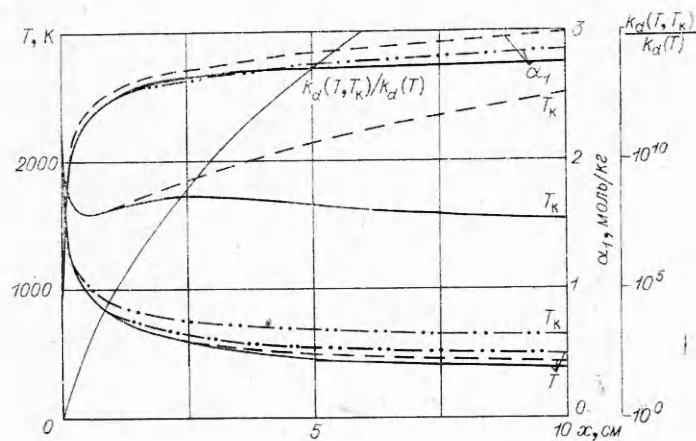
Константы скорости рекомбинации k_{r1} и k_{r2} заимствованы из [19]. Они аппроксимируются температурной зависимостью

$$\begin{aligned} \log k_{r1} \text{ (см}^6\text{/моль}^2\text{·с)} &= (16,89 \pm 0,85) + (3,01 \pm 0,28) \log(300/T), \\ \log k_{r2} \text{ (см}^6\text{/моль}^2\text{·с)} &= (18,22 \pm 2,00) + (4,30 \pm 0,62) \log(300/T). \end{aligned}$$

Расчеты течения в соплах, имеющих высоту критического сечения 1,6 мм, показали, что течение является химически неравновесным, по сохраняется равновесие по колебательным степеням свободы (счет проводился до 15 см вниз по потоку от критического сечения). Это означает, что процессы релаксации и рекомбинации в данных условиях разделяются во времени и не взаимодействуют.

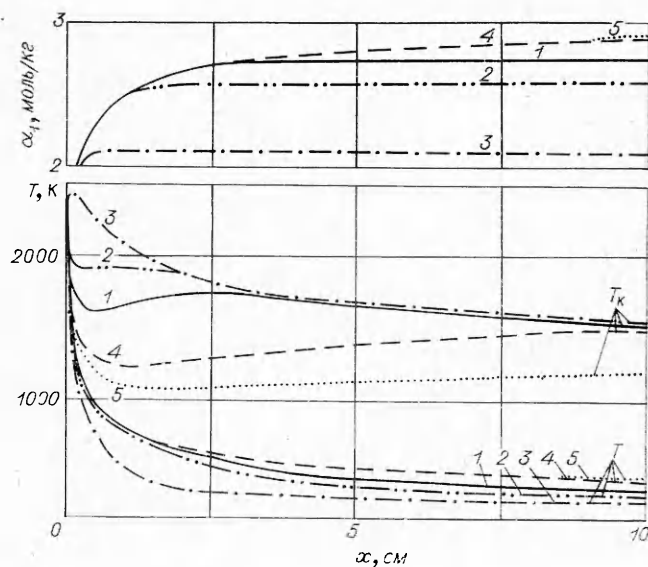
Иная картина наблюдается при рассмотрении результатов расчета для сопла с высотой критического сечения 0,3 мм и углом раствора 60°. На фиг. 1 представлены распределения колебательной и поступательной температур, концентрации Br_2 и отношения $k_d(T, T_K)/k_d(T)$ при течении частично диссоциированного брома в таком сопле. Сплошные линии — решение с учетом взаимного влияния химической и колебательной кинетики, штриховые — решение, при котором учитывалось влияние химической кинетики на колебательную релаксацию, но пренебрегалось обратным влиянием, штрихпунктирные — решение для случая, когда химическая и колебательная кинетика не связаны (в релаксационном уравнении (1) не учитывается изменение колебательной энергии за счет реакции, а в уравнениях (2) константа скорости диссоциации $k_d(T)$ зависит только от поступательной температуры).

Качественное объяснение полученной картины состоит в следующем. При учете взаимного влияния химической и колебательной кинетики кон-

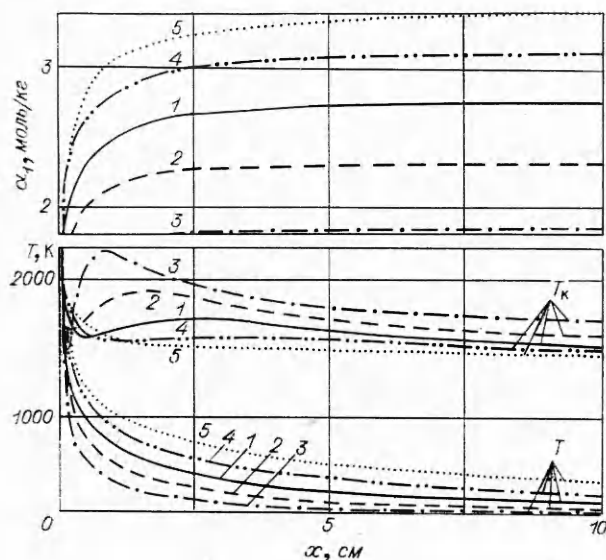


Фиг. 1

курения между уменьшением колебательной энергии за счет дезактивации и ее ростом за счет рекомбинации приводит к тому, что уже на расстоянии 0,5 см от критического сечения уменьшение колебательной энергии молекул прекращается. При этом сильно увеличивается отношение $k_d(T, T_k)/k_d(T)$ и уменьшается скорость образования B_2 . Значение n^* меняется приблизительно с 14 в момент начала отрыва T_k от T до 43 в конце расчета. Когда скорость рекомбинации сравнивается со скоростью неравновесной диссоциации, химический состав в потоке становится почти постоянным. При этом прекращается приток энергии на колебательную степень свободы и T_k , достигнув максимума, начнет падать, причем ее уменьшение определяется только процессом колебательной дезактивации. Необходимо подчеркнуть, что полученное постоянство состава в потоке не означает «замораживание» химического процесса, а является следствием увеличения скорости диссоциации в неравновесных условиях. Это отчетливо видно из решения, где не учтено влияние высокой колебательной



Фиг. 2



Фиг. 3

температуры на скорость распада (штрих). В этом случае кинетическая область течения растягивается вдоль по соплу и на всем ее протяжении не прекращается приток энергии на колебательную степень свободы.

Когда колебательная и химическая кинетика не связаны (штрих-пунктир), в потоке нет дополнительного источника энергии. Скорость ее уменьшения определяется только процессом колебательной релаксации, и соответствующая колебательная температура почти не отличается от температуры поступательного движения.

Для того, чтобы выяснить, как на полученные результаты влияют величины константы скорости рекомбинации и времени колебательной релаксации, проведены расчеты, в которых эти величины варьировались.

На фиг. 2 представлены распределения T , T_k и α_1 вдоль сопла, полученные с учетом колебательно-химического взаимодействия. Цифрами 1—5 обозначены распределения, где время колебательной релаксации принималось равным τ , $\tau/0,66$, $\tau/0,3$, $\tau/2$, $\tau/3$ соответственно. Медленный сток колебательной энергии (большие времена колебательной релаксации) приводит к большему отрыву T_k от T и к уменьшению скорости образования Br_2 на начальном участке течения.

Аналогичная связь между процессами химической и колебательной кинетики проявилась в расчетах, где варьировалась константа скорости

рекомбинации (фиг. 3, где цифрами 1—5 обозначены распределения T , T_k и α_1 вдоль сопла, полученные с k_r , $k_r/3$, $k_r/10$, $k_r/0,33$, $k_r/0,1$ соответственно). Большие константы скорости рекомбинации приводят к меньшим отрывам T_k от T и к соответствующему увеличению скорости образования Br_2 . Это связано с тем, что параметры T и ρ существенно зависят от величины константы рекомбинации.

m	n	τ , с	τ_g , с
1	1	$2,2 \cdot 10^{-5}$	$1,5 \cdot 10^{-5}$
1/0,66	1	$4,3 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-6}$
1/0,3	1	$2,4 \cdot 10^{-7}$	$7,6 \cdot 10^{-7}$
1/2	1	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$6,7 \cdot 10^{-5}$
1	1/3	$9,2 \cdot 10^{-6}$	$9,6 \cdot 10^{-6}$
1	1/10	$5,3 \cdot 10^{-6}$	$9,7 \cdot 10^{-6}$
1	1/0,33	$2,0 \cdot 10^{-5}$	$2,0 \cdot 10^{-5}$

Для того, чтобы выяснить условия, при которых необходимо учитывать колебательно-рекомбинационное взаимодействие в сверхзвуковом потоке, было проведено сравнение характерных времен течения газа τ_g ($\tau_g = [ud(\ln\rho)/dx]^{-1}$) и времен колебательной релаксации τ . В таблице представлены эти величины для точки, где колебательная температура проходит через локальный максимум, полученные в расчетах с варьированием τ и k_r . Приведенные в таблице величины m и n являются множителями варьирования при τ и k_r соответственно. Как видно, в области сильного колебательно-рекомбинационного взаимодействия τ близко по величине к τ_g . Фактически это условие наряду с требованием $\tau_r < \tau_g$, где под τ_r понимается характерное время химической реакции [20] ($\tau_r = [k_{r1}\rho^2/(\alpha_1 + \alpha_2)\mu_2^2\mu_1]^{-1}$), является критерием необходимости учета колебательно-рекомбинационного взаимодействия в расширяющемся потоке.

Поступила 9 III 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Никитин Е. Е. Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. М., «Химия», 1970.
2. Ступоченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М., «Наука», 1965.
3. Куксенко Б. В., Лосев С. А. О релаксационном уравнении для описания колебательного возбуждения и дезактивации молекул в неравновесном потоке реального газа.— «Труды Ин-та механики МГУ», 1970, № 3.
4. Кузнецов Н. М. Взаимосвязь процессов колебательной релаксации и диссоциации двухатомных молекул.— «Докл. АН СССР», 1965, т. 164, № 5.
5. Marrone P. V., Treanor C. E. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels.— «Phys. Fluids», 1963, vol. 6, N 9.
6. Treanor C. E., Marrone P. V. Effect of dissociation on the rate of vibrational relaxation.— «Phys. Fluids», 1962, vol. 5, N 9.
7. Treanor C. E., Marrone P. V. Vibration and dissociation coupling behind strong shock waves.— In: Symposium on dynamics of manned lifting planetary entry. N. Y.— London, 1963.
8. Кузнецов Н. М. Кинетика диссоциации молекул в молекулярном газе.— ТЭХ, 1971, т. 7, № 1.
9. Кузнецов Н. М. К кинетике диссоциации многоатомных молекул при неравновесном распределении колебательной энергии.— «Докл. АН СССР», 1972, т. 202, № 6.
10. Осипов А. И., Шелепин Л. А. Процессы неравновесной диссоциации и молекулярные лазеры.— ЖЭТФ, 1971, т. 61, вып. 2.
11. Rush D. G., Pritchard H. O. Vibrational disequilibrium in chemical reactions.— In: Eleven. Symp. on Combustion. Berkley, Aug. 14—20, 1966. Pittsburg, Pennsylvania, 1967.
12. Bray K. N. C., Pratt N. H. Conditions for significant gas dynamically-induced vibration-recombination coupling.— In: Eleven. Symp. on Combustion. Berkley, Aug. 14—20, 1966. Pittsburg, Pennsylvania, 1967.
13. Кузнецов Н. М. Колебательная релаксация в рекомбинирующем расширяющемся газе.— ТВТ, 1966, т. 4, № 2.
14. Treanor C. E., Rich J. W., Rem R. J. Vibrational relaxation of anharmonic oscillators with exchange-dominated collisions.— «J. Chem. Phys.», 1968, vol. 48, N 4.
15. Schwartz P. N., Herzfeld K. F. The time of vibrational relaxation in gases.— «J. Chem. Phys.», 1968, vol. 22, N 5.
16. Милл В. Э. Численное решение дифференциальных уравнений. М., ИЛ, 1955.
17. Вольперт А. И., Гонтковская В. Т., Озерковская Н. И., Филипенко В. П. Об обосновании численного решения уравнений химической кинетики.— В кн.: Математические проблемы химии. Ч. I. Новосибирск, «Наука», 1973.
18. Millican R. G., White D. R. Systematic of vibrational relaxation.— «J. Chem. Phys.», 1963, vol. 39, N 12.

19. Ip J. K. K., Burns G. Recombination of Br atoms by flash photolysis over a wide temperature range. II. Br₂ in He, Ne, Ar, Kr, N₂ and O₂.— *J. Chem. Phys.*, 1969, vol. 51, N 8.
20. Васильев В. М., Сафарян М. Н., Скребков О. В. О расчете химически неравновесного течения многокомпонентного газа через сопло.— *Изв. АН СССР*, 1971, № 5.

УДК 621.378.33

РЕЗОНАНСНОЕ (10,6 МКМ) ПОГЛОЩЕНИЕ CO₂ ЗА ФРОНТОМ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Р. И. Солоухин, Н. А. Фомин

(Новосибирск)

Углекислый газ широко используется в различных молекулярных лазерных системах, поэтому представляют интерес измерения коэффициента поглощения CO₂ на частоте обычно используемого лазерного перехода (100, J) → (001, J + 1) на длине волны 10,6 мкм в широком диапазоне температур и плотностей газа. Для этой цели полезно воспользоваться методом сжатия и нагрева исследуемого газа в ударных волнах [1, 2]. В настоящее время достаточно подробно исследована зависимость коэффициента поглощения CO₂ α на длине волны 10,6 мкм от давления при комнатной температуре газа [3, 4], однако уже в этой области изменения параметров попытки сопоставления расчетных значений α с экспериментом (при p ≥ 1 атм) выявили значительные расхождения, связанные в первую очередь с несовершенством аппроксимации формы линий колебательно-вращательного спектра молекулы CO₂ лоренцовским контуром.

Интересно проследить за поведением коэффициента поглощения при высоких температурах газа, где значения α могут быть особенно велики. В работе [5] определена зависимость α от температуры при p ≈ 1 атм в диапазоне температур 300—420 К. Выяснилось, что измеренные значения коэффициента поглощения существенно выше расчетных, поэтому для объяснения зависимости α(T) в работе [5] сделано предположение об изменении сечения столкновительного уширения контура линии молекул CO₂ в зависимости от температуры в виде σ_c ~ T^{-1/2}. В [6] аналогичные измерения проведены вплоть до температур ~615 К. Основываясь на расчетах [7], авторы объяснили полученные ими высокие значения α вкладом переходов «смешанных» состояний (11¹⁰ → 01¹¹, 12⁰⁰ → 02⁰¹) без привлечения зависимости сечения уширения от температуры. В работе [8] с использованием техники ударной трубы проведены измерения α до T ~ 1600 К. При расчетах коэффициента поглощения авторы этой работы учитывали вклад «смешанных» переходов и, кроме того, предполагали зависимость σ_c ~ T^{-1/2}.

В данной работе определялась температурная зависимость как для CO₂, так и для смеси CO₂ и азота в широком диапазоне температур (500—2100 К). Проведены также измерения α в зависимости от давления при высоких температурах газа (1100 и 1600 К) как за падающей, так и за отраженной ударной волной. Цель описываемых ниже опытов — определение границ применимости простейших методов теоретического описания резонансного поглощения в CO₂ при умеренных и повышенных давлениях газа.

При расчетах α учитывались следующие обстоятельства. Существенный вклад в значение α для основного перехода (100, J) → (001, J + 1) вносят также и переходы типа (1n0, J) → (0n1, J ± 1), частоты которых лежат достаточно близко к частоте основного перехода, а населенности уровней при T ≥ 500 К (n = 1, 2) становятся значительными. По оценке [7] уже при T = 620 К и p = 1 атм такие переходы увеличивают α в центре линии P 20 на 42,1%. Кроме того, при давлении p ≥ 1 атм становится