16. Ohmori Y., Shimozuma M., Tagashira H. Boltzmann equation analysis of electron swarm behaviour in monosilane // J. Phys. D: Appl. Phys.— 1986.— V. 19.— P. 1029.
17. Mathieson K. J., Millican P. G., Walker I. S., Curtis M. G. Low-energy-electron collision cross-sections in silane // J. Chem. Soc. Faraday Trans.— 1987.— V. 1183.— P. 1041.
18. Braglia G. L., Romano L., Diligenti M. On the accuracy of experimental electron energy distributions in gases // Nuovo Cimento.— 1985.— V. B85.— P. 193.
19. Chatham H., Hils D., Robertson R., Gallagher A. Total and partial electron collisional cross sections for CH_4, C_2H_6, SiH_4 and Si_2H_6 // J. Chem. Phys.— 1984.— V. 81.— P. 1770.

г. Новосибирск *Поступила 3/III 1993 г.*

УДК 534.222 – 539.196

В. И. Грабовский, А. М. Старик

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИЗМЕНЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧЕНИЯ С КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ ПЕРЕХОДАМИ

Резонансное поглощение газом излучения может приводить, как известно, к возбуждению внутренних степеней свободы молекул, что в значительной степени определяет нелинейный отклик среды. При этом изменяются как мнимая, так и действительная часть диэлектрической проницаемости. Первая связана с коэффициентом поглощения k_v, а вторая — с показателем преломления n. Изменение n в канале пучка приводит к отклонению световых лучей от первоначального направления и в значительной степени определяет характер распространения лазерного пучка в нелинейной среде [1]. Именно поэтому изучению механизмов изменения показателя преломления при воздействии резонансного излучения посвящено значительное число работ. Особое внимание уделяется анализу закономерностей изменения n при распространении импульса излучения ИК-диапазона (излучение этого диапазона поглощается обычно на колебательно-вращательных переходах) [2—7]. Обусловлено это тем, что именно ИК-лазеры способны давать высокие уровни интенсивности, при которых нелинейные эффекты становятся весьма существенными.

Было показано, что основными механизмами изменения n являются изменение поляризуемости молекул среды вследствие возбуждения молекулярных колебаний и изменение плотности вследствие гидродинамических эффектов, обусловленных неоднородным тепловыделением из колебательных в поступательные степени свободы. Анализ влияния гидродинамических эффектов при этом проводился в основном в рамках модели невязкого нетеплопроводного газа без учета влияния диффузии и теплопроводности, которые в колебательно-неравновесном газе существенно зависят от степени возбуждения и могут оказывать значительное влияние на поведение концентраций компонентов смеси даже на временах, меньших характерных времен этих процессов [8]. Поэтому представляет интерес провести комплексный анализ закономерностей изменения показателя преломления смеси газов с учетом всех процессов, связанных с возбуждением молекулярных колебаний резонансным излучением. Такому анализу и посвящена данная работа.

Анализ проведен для двухкомпонентной смеси газов, состоящих из молекул разного сорта, например А (1) и В (2), причем молекулы сорта А обладают, по крайней мере, двумя различными типами колебаний k и q с частотами $\nu_k < \nu_q$, а молекулы сорта В — одним типом колебаний s с частотами $\nu_s \leqslant \nu_q$ или $\nu_s \geqslant \nu_q$. Пусть время колебательно-поступательной релаксации для моды q много больше времен колебательно-колебательных обменов $\nu_q \to \nu_k$ и $\nu_q \to \nu_s$, а частота воздействующего излучения ν_I резонансна частоте центра линии колебательно-вращательного перехода $m \to n$, верхнее n и нижнее m состояния которого принадлежат типам колебаний k и q соответственно:

$$\nu_I = (E_{V''} - E_{V'} + E_{j''} - E_{j'})/h$$

($E_{V''}$ и $E_{V'}$ — колебательные энергии возбужденных состояний n и m молекулы сорта А, а $E_{j''}$ и $E_{j'}$ — их вращательные энергии, h — постоянная Планка). Такая ситуация характерна для многих практически интересных случаев, например, при поглощении излучения CO_2-лазера в смеси CO_2—N_2, использующейся как для теоретического [9—11], так и для экспериментального [12, 13] моделирования различных нелинейных процессов. Будем рассматривать случаи, когда все молекулы находятся в основном электронном состоянии и изменения химического состава не происходит. Величина показателя преломления определяется при этом соотношениями [6, 7]

$$n^2 - 1 = 4\pi \sum_{i=1}^{2} N_i\alpha_i, \quad \alpha_i = \alpha_{i0} + \sum_j \alpha_{ij}^V + \alpha_i^R. \tag{1}$$

Здесь N_i — плотность молекул i-го сорта; α_{i0} — нерезонансная молекулярная поляризуемость молекул i-го компонента при невозбужденном внутреннем движении; α_{ij}^V и α_i^R характеризуют соответственно вклад молекулярных колебаний j-го типа и вклад вращения в нерезонансную часть поляризуемости молекул i-го сорта.

Ограничимся случаями, когда время индуцированных переходов $\tau_I \gg \tau_{RT}, \tau_{VV}$ (τ_{RT} и τ_{VV} — характерные времена вращательно-поступательного и внутримодового колебательно-колебательного обменов). При этом можно считать, что между вращательными и поступательными степенями свободы существует термодинамическое равновесие, а внутри каждой моды j ($j = k, q, s$) с частотой нормальных колебаний ν_j имеет место больцмановское распределение с колебательной температурой T_j. При этих допущениях $\alpha_i^R = \varphi(T)$, а $\alpha_{ij}^V = f(T_j)$. Учитывая, что для газов $\delta n \ll n_0$, а при $\delta T \ll \delta T_j$ (именно такие случаи и рассматриваются) $\delta\alpha_i^R \ll \delta\alpha_{ij}^V$ ($\delta\xi = \xi - \xi_0$, $\xi = T$, T_j, n, α_i^R, α_{ij}^V, индекс 0 отвечает невозмущенным параметрам среды при $t = 0$), изменение показателя преломления в соответствии с (1) можно представить как

$$\delta n = \frac{2\pi}{n_0} \sum_{i=1}^{2} (\alpha_{i0}\delta N_i + N_{i0} \sum_j \delta\alpha_{ij}^V). \tag{2}$$

Из (2) видно, что для вычисления δn необходимо знать, как ведут себя N_i и T_j. Для определения изменения N_i и T_j при воздействии резонансного излучения на покоящуюся среду воспользуемся системой уравнений Навье — Стокса для колебательно-неравновесного газа, которая в соответствии с [8, 14] имеет вид

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla(\rho\mathbf{u}) = 0; \tag{3}$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \nabla[N_i(\mathbf{u} + \mathbf{V}_i)] = 0; \tag{4}$$

$$\rho\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u} + \nabla p = \sum_{i=1}^{2} N_i\mathbf{X}_i + \eta\Delta\mathbf{u} + (\xi + \tfrac{\eta}{3})\nabla(\nabla\mathbf{u}); \tag{5}$$

(6)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(E_{RT} + \frac{u^2}{2}\right)\right] + \nabla\left[\rho\mathbf{u}\left(E_{RT} + \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2}\right) - \mathbf{u}'\sigma' + \mathbf{q}_{RT}\right] = Q_I + \sum_{i=1}^{2} N_i\mathbf{X}_i(\mathbf{V}_i + \mathbf{u});$$

$$\frac{\partial\rho e_V^k}{\partial t} + \nabla(\rho\mathbf{u}e_V^k) + \nabla\mathbf{q}_V^k = h\nu_k N_1\left[-\frac{l_k k_\nu I}{h\nu_I N_1} - (\varepsilon_k - \varepsilon_{k0})W_{k,0} + L_{q,k}r_k W_{q,k}\right]; \tag{7}$$

$$(8)\qquad \frac{\partial \rho e_V^q}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u} e_V^q) + \nabla \mathbf{q}_V^q = h\nu_q N_1 \left[\frac{l_q k_\nu I}{h\nu_I N_1} - L_{q,k} r_q W_{q,k} - L_{q,s} r_q W_{q,s} N_2\right];$$

$$(9)\qquad \frac{\partial \rho e_V^s}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u} e_V^s) + \nabla \mathbf{q}_V^s = h\nu_s N_2\,[-(\varepsilon_s - \varepsilon_{s0})\,W_{s,0} + L_{q,s} r_s W_{q,s} N_1],$$

$$\mathbf{q}_{RT} = \rho T \sum_{i=1}^{2} C_{RT}^i \mathbf{V}_i - \lambda \nabla T + \frac{KT}{N} \sum_{i=1}^{2} \frac{D_i^T N_j}{m_i D_{ij}} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j),$$

$$\mathbf{q}_V^l = \rho e_V^l \mathbf{V}_i - \lambda_i^V \nabla T_l + NKT \sum_{j=1}^{2} D_{ij}^V \mathbf{d}_j \quad \begin{pmatrix} l = k,\ q \to i = 1 \\ l = s \to i = 2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{V}_i = \frac{N^2}{N_i \rho} \sum_{j=1}^{2} m_j D_{ij} \mathbf{d}_j - \frac{1}{m_i N_i} \left(D_i^T \nabla \ln T + \delta_{i,1} \sum_{l=k,q} D_l^V \nabla \ln T_l + \delta_{i,2} D_s^V \nabla \ln T_s\right),$$

$$\mathbf{d}_j = \nabla \left(\frac{N_j}{N}\right) + \left(\frac{N_j}{N} - \frac{N_j m_j}{\rho}\right) \nabla \ln p + \frac{N_j m_j}{\rho p} \sum_{i=1}^{2} N_i \mathbf{X}_i - \frac{N_j \mathbf{X}_j}{p}, \quad j = 1,\ 2,$$

$$p = \frac{\rho R T}{\mu}, \quad E_{RT} = C_{RT} T, \quad C_{RT} = \sum_{i=1}^{2} C_{RT}^i,$$

$$C_{RT}^i = \left(\frac{3}{2} + C_R^i\right) \frac{R}{\mu} \gamma_i, \quad e_V^l = \frac{h\nu_l R}{K\mu} \gamma_l \varepsilon_l,$$

$$\varepsilon_{l0} = \varepsilon_l(T), \quad \varepsilon_l = g_l\,[\exp(h\nu_l / KT_l) - 1]^{-1},$$

$$W_{q,k} = \sum_i W_{q,k}^i N_{i0}, \quad W_{k,0} = \sum_i W_{k,0}^i N_{i0}, \quad W_{s,0} = \sum_i W_{s,0}^i N_{i0},$$

$$L_{l,m} = \left\{\varepsilon_l^{r_l} (g_m + \varepsilon_m)^{r_m} - \varepsilon_m^{r_m} (g_l + \varepsilon_l)^{r_l} \exp\left[(r_m h\nu_m - r_l h\nu_l)/KT\right]\right\} \frac{1}{g_l^{r_l} g_m^{r_m}},$$

$$Q_I = k_\nu I\,(E_{j''} - E_{j'})/(h\nu_I) + \Phi_V,$$

$$\Phi_V = h\nu_k N_1 \left[(\varepsilon_k - \varepsilon_{k0})\,W_{k,0} + L_{q,k} \left(r_q \frac{\nu_q}{\nu_k} - r_k\right) W_{q,k}\right] +$$

$$+ N_2 h\nu_s \left[(\varepsilon_s - \varepsilon_{s0})\,W_{s,0} + L_{q,s} \left(r_q \frac{\nu_q}{\nu_s} - r_s\right) W_{q,s} N_1\right].$$

Здесь ρ, p, T — плотность, давление и температура газа; R — универсальная газовая постоянная; K — постоянная Больцмана; $\mathbf{u}$ — скорость движения среды; $\mu = \Sigma \mu_i \gamma_i$; μ_i и γ_i — молекулярная масса i-го компонента и его молярная доля в смеси; N — полное число молекул в единице объема; g_i — кратность вырождения i-го колебания; $\mathbf{X}_i$ — нелинейная сила, действующая на i-й компонент в электромагнитном поле; k_ν — коэффициент поглощения; I — интенсивность воздействующего излучения; l_j — количество колебательных квантов, приобретаемых модой j, при индуцированных переходах; $C_R^i = 1$ для линейных и $C_R^i = 1{,}5$ для нелинейных молекул; m_i — масса молекулы i-го компонента; λ — коэффициент теплопроводности; λ_i^V — коэффициент колебательной проводимости i-го компонента; D_i^T и D_{ij} — коэффициенты термо- и многокомпонентной диффузии для i-го компонента; D_{ij}^V — коэффициент колебательной диффузии между i-м и j-м осцилляторами; D_j^V — коэффициент колебательной термодиффузии для j-й моды; $W_{k,0}^i$ и $W_{q,k}^i$ — соответственно константы скорости VT-обмена в k-м осцилляторе и внутримолекулярного VV'-обмена между осцилляторами q и k при столкновении с i-м партнером; $W_{q,s}$ — константа скорости межмолекулярного VV'-обмена при столкновении молекул сорта A (q) и B (s); r_j — количество колебательных квантов, теряемых модой j при VV'-обмене; ξ и η — коэффициенты вязкости; $(\mathbf{u}'\sigma')$ — вектор с компонентами $u_j \sigma'_{jk}$; σ'_{jk} — тензор вязких напряжений.

Из линейной зависимости уравнения (3) и двух уравнений вида (4) (ρ, N_1 и N_2 связаны соотношением $\rho = m_1N_1 + m_2N_2$) следует, что наряду с обычными соотношениями между коэффициентами многокомпонентной диффузии и термодиффузии $D_{ij} = D_{ji}$ и $D_1^T = -D_2^T$ должно выполняться также равенство

$$\sum_{j=k,q,s} D_j^V \nabla \ln T_j = 0, \tag{10}$$

т. е. коэффициенты колебательной термодиффузии для мод k, q, s не являются независимыми. Будем рассматривать осесимметричные пучки с гауссовым распределением интенсивности по радиусу $I(r, t) = I_0(t) \times \exp(-r^2/R_a^2)$ с $R_a \ll k_v^{-1}$ (R_a — характерный радиус пучка), а $I_0(t) = I_0$ $(0 \leqslant t \leqslant \tau_и)$ и $I_0(t) = 0$ $(t > \tau_и)$, где $\tau_и$ — длительность импульса воздействующего излучения. Вводя безразмерные координаты $r' = r/R_a$ и $t' = t/\tau_и$ и переходя к безразмерным переменным $\tilde N_i = N_i/N_{i0}$, $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}\tau_и/R_a$, $\tilde\rho = \rho/\rho_0$, $\tilde p = p/(N_0KT_0)$, $\tilde T = T/T_0$, $\tilde{\mathbf{V}}_j = \mathbf{V}_j\tau_и/R_a$, $\tilde T_j = T_j/T_0$, $\tilde k_v = k_v/k_v^0$, $\tilde I = I/I_0$, систему (3)—(9) с учетом того, что $\tilde E_{RT} = E_{RT}/C_{RT}^0T_0$, можно представить в следующем виде (тильды и штрихи далее опускаем):

$$\partial\rho/\partial t = -\nabla(\rho\mathbf{u}); \tag{11}$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = -\nabla\left\{N_i\left[\mathbf{u} - \frac{\tau_и}{\tau_{Ti}}\frac{\nabla\ln T}{N_i} - \frac{\tau_и}{N_i}\left(\delta_{i,1}\sum_{l=k,q}\frac{\nabla\ln T_l}{\tau^V_{Dl}} + \delta_{i,2}\frac{\nabla\ln T_s}{\tau^V_{Ds}}\right) + \frac{\tau_и}{\tau_D}\sum_{j=1}^{2}\mathbf{d}_j\frac{P_m^{2-j}(1+P_N)^2N^2}{(P_m+P_N)P_n^{i-1}N_i\rho}\right]\right\}; \tag{12}$$

$$\rho\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u} = -\left(\frac{\tau_и}{\tau_a}\right)^2\frac{\nabla p}{\varkappa} + \left(\frac{\tau_и}{\tau_k}\right)\left[\Delta\mathbf{u} + \left(\frac{1}{3}+\frac{\xi}{\eta}\right)\nabla(\nabla\mathbf{u})\right] + \left(\frac{\tau_и}{\tau_F}\right)^2\sum_{i=1}^{2}N_i\mathbf{X}_i\gamma_{i0}; \tag{13}$$

$$\begin{aligned}\rho\frac{\partial E_{RT}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}\nabla)E_{RT} ={}& -p\nabla\mathbf{u}(\varkappa-1) + \varkappa(\varkappa-1)\left[\left(\frac{\tau_a}{\tau_F}\right)^2\sum_{i=1}^{2}N_i\mathbf{X}_i\mathbf{V}_i\gamma_{i0} + \frac{\tau_a^2}{\tau_и\tau_k}\nabla(\mathbf{u}'\sigma')\right] + \frac{\xi\tau_и}{\tau_I}\gamma_{10}k_vI + (\varkappa-1)\left[\sum_{l=k,s}\frac{\tau_и}{\tau_l^{VT}}\theta_lN_l(\varepsilon_l-\varepsilon_{l0})\gamma_{l0} + {}\right.\\&\left.+\frac{\tau_и}{\tau^{VV'}_{qk}}L_{q,k}(r_q\theta_q - r_k\theta_k)N_1\gamma_{10} + \frac{\tau_и}{\tau^{VV'}_{qs}}L_{q,s}(r_q\theta_q - r_s\theta_s)N_1N_2\right] -\\&-\nabla\left[\frac{\rho T}{C_{RT}^0}\sum_{i=1}^{2}C_{RT}^i\mathbf{V}_i - \frac{\tau_и}{\tau_\lambda}\nabla T + (\varkappa-1)\frac{T}{N}\sum_{i\neq j}\frac{\tau_D}{\tau_{Ti}}N_j\gamma_{i0}\gamma_{j0}(\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j)\right];\end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}\rho\frac{\partial e_V^k}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}\nabla)e_V^k ={}& \frac{\theta_k}{C^V_{k0}}\left[-l_kk_vI\frac{\tau_и}{\tau_I} - \frac{\tau_и}{\tau^{VT}_k}N_1(\varepsilon_k - \varepsilon_{k0}) + \frac{\tau_и}{\tau^{VV'}_{qk}}N_1L_{q,k}r_k\right] -\\&-\nabla\left[\rho e_V^k\mathbf{V}_k - \frac{\tau_и}{\tau^V_k}\nabla T_k + \frac{NT}{C^V_{k0}\gamma_{10}}\sum_{j=1}^{2}\frac{\tau_и}{\tau^V_{kj}}\mathbf{d}_j\right];\end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned}\rho\frac{\partial e_V^q}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}\nabla)e_V^q ={}& \frac{\theta_q}{C^V_{q0}}\left[k_vI\frac{l_q\tau_и}{\tau_I} - \frac{\tau_и}{\tau^{VV'}_{qk}}L_{q,k}r_qN_1 - \frac{\tau_и}{\tau^{VV'}_{qs}}L_{q,s}r_qN_1N_2\gamma_{10}^{-1}\right] -\\&-\nabla\left\{\rho e_V^q\mathbf{V}_q - \frac{\tau_и}{\tau^V_q}\nabla T_q + \frac{NT}{C^V_{q0}\gamma_{10}}\sum_{j=1}^{2}\frac{\tau_и}{\tau^V_{qj}}\mathbf{d}_j\right\};\end{aligned} \tag{16}$$

$$\rho \frac{\partial e_V^s}{\partial t} + \rho (\mathbf{u}\nabla) e_V^s = \frac{\theta_s}{C_{s0}^V} \left[- \frac{\tau_и}{\tau_s^{VT}} N_2 (\varepsilon_s - \varepsilon_{s0}) + \frac{\tau_и}{\tau_{qs}^{VV'}} L_{q,s} r_s N_1 N_2 \gamma_{20}^{-1} \right] - \tag{17}$$

$$- \nabla \left\{ \rho e_V^s \mathbf{V}_s - \frac{\tau_и}{\tau_s^V} \nabla T_s + \frac{NT}{C_{s0}^V \gamma_{20}} \sum_{j=1}^{2} \frac{\tau_и}{\tau_{sj}^V} \mathbf{d}_j \right\},$$

$$\mathbf{V}_i = - \frac{\tau_и}{\tau_{Ti}} \frac{\nabla \ln T}{N_i} - \frac{\tau_и}{N_i} \left(\delta_{i,1} \sum_{l=k,q} \frac{\nabla \ln T_l}{\tau_{Dl}^V} + \delta_{i,2} \frac{\nabla \ln T_s}{\tau_{Ds}^V} \right) + \frac{\tau_и}{\tau_D} \sum_{j=1}^{2} \mathbf{d}_j \frac{N^2}{N_i \rho} \frac{P_m^{2-j} (1 + P_N)^2}{(P_m + P_N) P_N^{j-1}},$$

$$\mathbf{d}_j = \gamma_{j0} \nabla \left(\frac{N_j}{N} \right) + \gamma_{j0} \left(\frac{N_j}{N} - \frac{N_j P_m^{2-j}}{\rho (P_m + P_N) \gamma_{10}} \right) \nabla \ln p +$$

$$+ \frac{\varkappa \gamma_{j0} \tau_a^2}{p \tau_F^2} \left[\frac{N_j P_m^{2-j} (1 + P_N)}{\rho (P_m + P_N)} \sum_i \frac{P_N^{i-1}}{1 + P_N} N_i \mathbf{X}_i - N_j \mathbf{X}_j \right],$$

$$C_{l0}^V = \frac{\theta_l^2 \exp (\theta_l)}{[\exp (\theta_l) - 1]^2}, \quad \theta_l = \frac{h\nu_l}{KT_0}, \quad \gamma_{i0} = \frac{P_N^{i-1}}{1 + P_N},$$

$$\varkappa = 1 + \left(e_{RT}^0 \frac{\mu_0}{R} \right)^{-1}, \quad \xi = \frac{E_{j''} - E_{j'}}{KT_0}, \quad C_{RT}^0 = \sum_{i=1}^{2} C_{RT}^i \frac{\mu \gamma_{i0} N}{\mu_0 N_i},$$

$$P_N = \gamma_{20}/\gamma_{10}, \quad P_m = m_1/m_2.$$

Здесь $\tau_a = R_a / \sqrt{\frac{\varkappa p_0}{\rho_0}}$ — время распространения звука поперек пучка; $\tau_D = R_a^2 / D_{ij}$, $\tau_{Ti} = R_a^2 m_i N_{i0} / D_i^T$, $\tau_{Di}^V = R_a^2 m_i N_{i0} / D_i^V$, $\tau_{ij}^V = R_a^2 / D_{ij}^V$ — соответственно времена многокомпонентной диффузии, термодиффузии i-го компонента, диффузии колебательной энергии i-го осциллятора, принадлежащего молекуле i-го сорта и колебательной диффузии между i-м и j-м осцилляторами; $\tau_\lambda = \rho R_a^2 C_{RT}^0 / \lambda$ — время теплопроводности; $\tau_i^V = R_a^2 C_{i0}^V N_{i0} K / \lambda_i^V$ — время колебательной теплопроводности для i-го осциллятора; $\tau_i^{VT} = \left(\sum_{k=1}^{2} W_{i0}^k N_{k0} \right)^{-1}$ — время VT-релаксации для i-го осциллятора; $\tau_{q,s}^{VV'} = \{ W_{q,s} \gamma_{10} \gamma_{20} N_0 \}^{-1}$, $\tau_{ij}^{VV'} = \left\{ \sum_{k=1}^{2} W_{i,j}^k N_{k0} \right\}^{-1}$ — времена межмолекулярного и внутримолекулярного VV'-обмена; $\tau_l = N_{10} h\nu_l / k_\nu^0 I_0$; $\tau_F = \sqrt{\frac{\rho_0 P_a}{X_0 / \nu_0}}$ — время изменения состояния среды под действием внешних сил $\mathbf{X}_0$ ($\tau_F = \tau_g$ при $\mathbf{X}_0 = m\mathbf{g}$, $\mathbf{g}$ — ускорение силы тяжести, m — характерная масса молекулы, и $\tau_F = \tau_{NL}$ при $\mathbf{X}_0 = \mathbf{f}_{NL}$, $\mathbf{f}_{NL}$ — сила, действующая на частицу в электромагнитном поле); $\tau_k = R_0^2 \rho_0 / \eta$ — время конвекции вследствие вязкости.

Конкретный анализ проведен на примере резонансного поглощения излучения CO_2-лазера с $\nu_l = 944{,}2$ см$^{-1}$ (линия P20 [$00^01 \to 10^00$]) в смеси газов CO_2—N_2, когда $\tau_и$, τ_l существенно больше времени VV'-обмена между симметричными ν_1 и деформационными ν_2 колебаниями CO_2. При этом можно рассматривать совместную релаксацию энергии мод ν_1 и ν_2, полагая наличие точного резонанса между состояниями 10^00 и 02^00 молекулы CO_2 ($h\nu_1 = 2h\nu_2$). В нашем исследовании эта объединенная мода соответствует ν_k, асимметричные колебания CO_2 (ν_3) — ν_q и колебания N_2 (ν_4) — ν_s. Отметим, что вид правой части уравнения (7) вследствие объединения мод ν_1 и ν_2 в CO_2 несколько меняется [15]. Необходимые для расчета константы скоростей VT- и VV'-процессов и молекулярные постоянные были взяты такими же, как и в [11, 16]. Коэффициенты D_{12}, D_i^T, λ вычислялись по соотношениям [17] ($D_{12} = 1{,}4 \cdot 10^{-3}$ м^2/с, $\lambda = 1{,}1 \cdot 10^{-5}$ Дж/(м·с·К), $D_1^T = 4{,}8 \cdot 10^{-8}$ кг/(м·с)). Значения D_{ij}^V и D_j^V для смеси CO_2—N_2 ни экспериментально, ни теоретически не найдены. Однако в [18—20] определены связи между коэффициентами самодиффузии колебательно-возбужденных молекул CO_2 и N_2 (D_{ii}^{Vj}) и обычной диффузии. Эти связи имеют вид $D_{ii}^{Vj} = K_j^V D_{ii}$, где $K_j^V = \mathrm{const}$, а величина K_j^V зависит от типа колебаний. При $T_0 = 300$ К для деформационных и симметричных колебаний $K_1^V = K_2^V = 1$, а для асимметричных $K_3^V = 0{,}6$, для возбужденного азота $K_4^V = 0{,}4$.

Полагая, как и в [8], что приведенные соотношения справедливы и для коэффициентов диффузии в бинарном газе, получим

$$D_{14}^V = D_{24}^V = D_{12}, \quad D_{34}^V = 0{,}6D_{12}, \quad D_1^V = D_2^V = D_1^T, \quad D_3^V = 0{,}6D_1^T.$$

Величина D_4^V вычислялась в соответствии с (10) в виде

$$D_4^V = -D_2^V \frac{2\nabla \ln T_2 + 0{,}6\nabla \ln T_3}{\nabla \ln T_4}. \tag{18}$$

Коэффициенты колебательной теплопроводности λ_i^V определялись по соотношению

$$\lambda_l^V = D_{li}^V C_l^V N_i K, \quad C_l^V = \frac{\theta_{Vl}^2 \exp(\theta_{Vl})}{[\exp(\theta_{Vl}) - 1]^2}, \quad \theta_{Vl} = \frac{h\nu_l}{KT_l}.$$

Проведем оценку характерных времен для среды $CO_2 - N_2 = 0{,}1 \div 0{,}9$ при типичных условиях эксперимента: $R_a = 0{,}1$—1 см, $I_0 = 0{,}1$—10 кВт/см^2, $p_0 = 1$ кПа, $T_0 = 300$ К. Иерархия этих времен в значительной мере определяет степень влияния различных процессов переноса на изменение N_i и T_j. При указанных условиях $\tau_a = 2{,}9\cdot10^{-6} \div 2{,}9\cdot10^{-5}$ с, $\tau_D = 7\cdot10^{-4} \div 7\cdot10^{-2}$ с, $\tau_{T1} = 3{,}7\cdot10^{-2} \div 3{,}7$ с, $\tau_{D2}^V = 3{,}7\cdot10^{-2} \div 3{,}7$ с, $\tau_{D3}^V = 6{,}1\cdot10^{-2} \div 6{,}1$ с, $\tau_{24}^V = \tau_D$, $\tau_{34}^V = 1{,}7\,\tau_D$, $\tau_\lambda = 9{,}7\cdot10^{-4} \div 9{,}7\cdot10^{-2}$ с, $\tau_2^V = 3{,}5\cdot10^{-4} \div 3{,}5\cdot10^{-2}$ с, $\tau_3^V = 1{,}67\,\tau_2^V$, $\tau_4^V = 1{,}5\cdot10^{-4} \div 1{,}5\cdot10^{-2}$ с, $\tau_k = 5\cdot10^{-2} \div 5$ с, $\tau_{NL} = 3 \div 10$ с, $\tau_g = 0{,}1 \div 0{,}3$ с, $\tau_I = 1{,}3\cdot10^{-2} \div 1{,}3\cdot10^{-4}$ с, $\tau_2^{VT} = 1\cdot10^{-3}$ с, $\tau_{32}^{VV'} = 1{,}1\cdot10^{-3}$ с, $\tau_{34}^{VV'} = 1{,}1\cdot10^{-4}$ с, $\tau_4^{VT} = 3{,}9$ с. Таким образом, имеет место следующая иерархия времен: $\tau_a < \tau_{34}^{VV'} < \tau_D = \tau_2^V = \tau_3^V \sim \tau_I \sim \tau_2^{VT} \sim \tau_{32}^{VV'} \sim \tau_{24}^V \sim \tau_{34}^V \sim \tau_\lambda < \tau_k \sim \tau_{D2}^V < \tau_{D3}^V < \tau_g < \tau_{NL} \sim \tau_4^{VT}$. Будем рассматривать импульсы с $\tau_и \ll \tau_g, \tau_{NL}, \tau_4^{VT}$. Кроме того, при проведении экспериментов в указанных условиях всегда выполняется неравенство $\delta_I \ll 1$,

$$\delta_I = k_1^0 I_0 \tau_и / \rho_0 E_{RT}^0.$$

В этом случае членами, содержащими отношения времен $(\tau_и/\tau_F)^2$, $(\tau_a/\tau_F)^2$ и $\tau_и/\tau_s^{VT}$, в (13), (14), (17) можно пренебречь и провести линеаризацию уравнений (11)—(14), представляя ρ, N_i, T, $\mathbf{u}$, $\mathbf{V}_i$, $\mathbf{d}_i$ в виде $z = 1 + \delta_I z'$, где $z = \rho$, N_i, T, а $\mathbf{V}_i = \delta_I \mathbf{V}_i'$, $\mathbf{d}_i = \delta_I \mathbf{d}_i'$, $\mathbf{u} = \delta_I \mathbf{u}'$.

Система линеаризованных уравнений (11)—(14) и уравнений колебательной кинетики для смеси CO_2—N_2 вида (15)—(17) решалась численно по методике, разработанной в [8]. Вычисление нерезонансной части поляризуемости α_{ij}^V для молекулы CO_2 ($i = 1$, $j = 1 \div 3$) проводилось по формулам [6], а для молекулы N_2 ($i = 2$, $j = 4$) — по формулам [21].

Рассмотрим сначала, как изменяются концентрации компонентов $N_1'(t)$ и $N_2'(t)$ на оси пучка при наличии процессов диффузии и теплопроводности, связанных с возбуждением молекулярных колебаний (характерные времена τ_{D2}^V, τ_{D3}^V, τ_{D4}^V, τ_{24}^V, τ_{34}^V, τ_i^V ($i = 2 \div 4$) имеют конечные значения), и при их отсутствии (эти времена равны бесконечности).

На рис. 1, *а*, *б* показаны зависимости $\delta_I z'(t')$ ($z' = N_1'$, N_2', T' (линии *1—3*), $t' = t/\tau_D$) и $T_i(t')$ ($i = 2 \div 4$ — линии *2—4*) на оси пучка ($r' = 0$), а на рис. 2, *а—в* — распределения N_1', N_2', T' (линии *1—3*) по r' при $t' = 1$; 8; 30 ($\delta_I = 0{,}01$) соответственно, полученные для этих двух случаев (сплошные и штриховые линии) при расчете воздействия излучения с $I_0 = 0{,}1$ кВт/см^2 и $\nu_l = 944{,}2$ см$^{-1}$, $R_a = 0{,}1$ см на смесь газов CO_2—$N_2 = 0{,}1 : 0{,}9$ с $T_0 = 300$ К и $p_0 = 1$ кПа. Из представленных распределений видно, что процессы диффузии, связанные с возбуждением колебательных степеней свободы

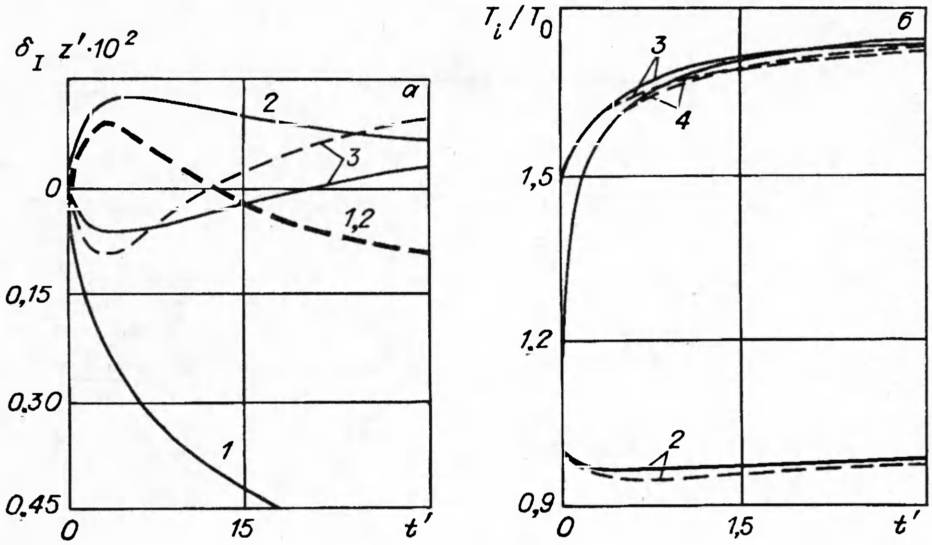


Рис. 1

молекул CO_2 и N_2 (анализ показывает, что доминирующее влияние оказывает колебательная термодиффузия, которая обусловлена значительным градиентом по r колебательных температур T_2, T_3 и T_4), существенно влияют на изменение N_i' и T' даже при $t \ll \tau_{Di}^V$. Так, если в модели с $\tau_{ij}^V = \tau_{Dj}^V = \tau_j^V = \infty$ $N_1' = N_2'$ при любых t, то, когда эти времена конечны, $N_1'(t') \neq N_2'(t')$. Поскольку $\tau_a \ll \tau_D$, то при $t \sim \tau_D$ в случае $\tau_{ij}^V = \tau_{Di}^V$, $\tau_i^V = \infty$ распределения N_1', N_2' и N' по r в точности повторяют распределение $\rho'(r)$, а $\rho' = -T'$. Когда τ_{Di}^V и τ_i^V конечны, на характер распределений $N_i'(r)$ существенно влияют процессы колебательной термодиффузии. При этом поведение $N_1'(r)$ определяется конкуренцией двух диффузионных потоков, направленных в противоположные стороны. Первый обусловлен градиентом T_2 (при небольших t $\nabla T_2 > 0$) и, поскольку $D_2^V > 0$, направлен от периферии к центру пучка. Второй обусловлен градиентом T_3 ($\nabla T_3 < 0$) и, поскольку $D_3^V > 0$, направлен от центра к периферии. Взаимодействие этих двух потоков приводит к достаточно сложному распределению $N_1'(r)$, которое характеризуется наличием минимума в некотором сечении с $r \neq 0$ (рис. 2, *а*), которое тем дальше отстоит от центра пучка, чем больше I_0. С течением времени это сечение сдвигается к оси пучка, что обусловлено уменьшением ∇T_2. Диффузионный поток для $N_2'(r)$ определяется величиной и знаком D_4^V и зависит от ∇T_2, ∇T_3 и ∇T_4. Поэтому, согласно (18), поведение $N_2'(r)$ аналогично поведению $N_1'(r)$ с обратным знаком. Отметим, что диффузионные процессы, обусловленные возбуждением колебательных степеней свободы, приводят к расширению области с $N_i' \neq 0$. Так, если при $\tau_{ij}^V = \tau_{Di}^V = \tau_i^V = \infty$ $N_i' = 0$ уже при $r' \approx 6$, то в случае конечности этих времен $N_i' = 0$ только при $r' \approx 15$.

Поскольку δn в значительной степени определяется изменением концентраций N_1' и N_2', то ясно, что на характер поведения $\delta n\ (t)$ должны оказывать значительное влияние диффузионные процессы, связанные с возбуждением молекулярных колебаний. Это влияние иллюстрирует рис. 3, на котором

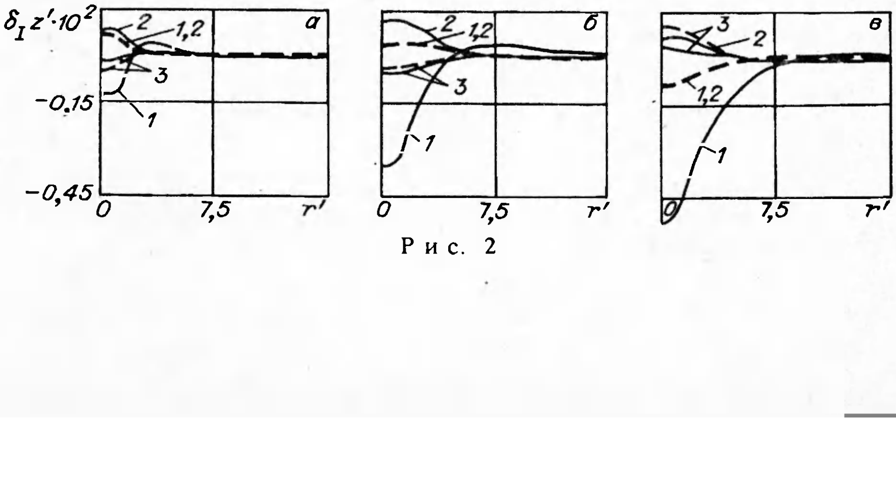


Рис. 2

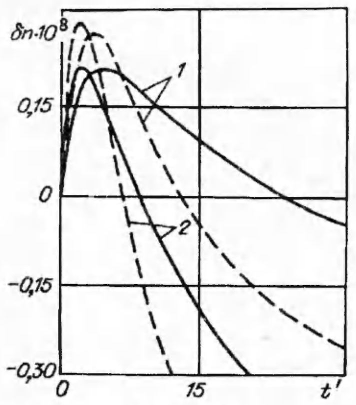
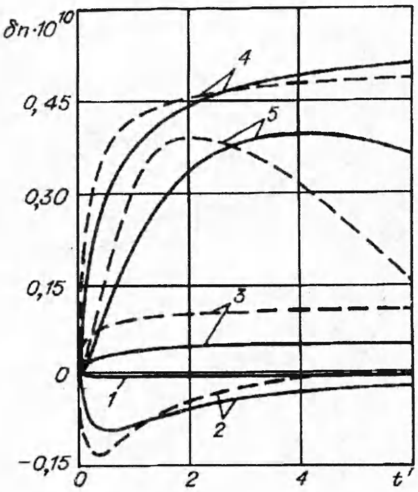


Рис. 3

Рис. 4→



показаны зависимости $\delta n\,(t')$ при $r = 0$ для смеси $CO_2 - N_2 = 0{,}1 : 0{,}9$ и $0{,}2 : 0{,}8$ (линии *1*, *2*) с $T_0 = 300$ K, $p_0 = 1$ кПа, $I_0 = 0{,}1$ кВт/см^2 для случая, когда $\tau_{ij}^V = \tau_{Di}^V = \tau_i^V = \infty$ и когда эти времена конечны (штриховые и сплошные линии соответственно). Видно, что с увеличением концентрации CO_2 влияние колебательной термодиффузии на δn усиливается. Относительную роль концентрационной составляющей δn и вкладов в δn нерезонансных частей поляризуемости, вызванных возбуждением отдельных мод молекул CO_2 и N_2, иллюстрирует рис. 4. Здесь линии *1—4* относятся к зависимости $\delta n\,(t)$, обусловленной возбуждением симметричных, деформационных и антисимметричных колебаний CO_2 и колебаний N_2, а *5* — к зависимости $\delta n\,(t)$, обусловленной изменением N_1' и N_2' (масштаб для концентрационной составляющей δn уменьшен в 50 раз). Штриховые и сплошные линии, как и на рис. 3, относятся к смесям с различным содержанием компонентов. Видно, что определяющее влияние при данных условиях оказывает изменение концентраций CO_2 и N_2. Лишь при малых t изменение n вследствие изменения поляризуемости может конкурировать с концентрационной частью δn.

Часто по изменению показателя преломления определяют изменение температуры среды (в частности, судят о глубине кинетического охлаждения [13]) при воздействии резонансного излучения. Из представленных результатов следует, что такой метод не применим в большинстве практически интересных случаев. Даже когда изменение нерезонансной части поляризуемости вследствие возбуждения колебаний молекул мало, величина δn не связана простым соотношением с изменением температуры T ($\delta n = -(n_0 - 1)\,\delta T/T_0$), а зависит от изменения концентрации компонентов смеси, которое существенным образом определяется процессами колебательной термодиффузии.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Виноградова М. Б., Руденко О. В., Сухоруков А. П.** Теория волн.— М.: Наука, 1979.
2. **Wallace J., Camac M.** Effects of absorption at 10,6 μm on laser-beam transmission // J. Opt. Soc. Amer.— 1970.— V. 60, N 11.— P. 1587—1594.
3. **Wood A. D., Camac M., Gerry F. T.** Effects of 10,6 μm laser induced air chemistry on the atmospheric refractive index // Appl. Optics.— 1971.— V. 10, N 8.— P. 1877—1882.
4. **Осипов А. И., Панченко В. Я., Филиппов А. А.** О показателе преломления колебательно-возбужденных газов // Квант. электроника.— 1984.— Т. 11, № 9.— С. 1874—1876.
5. **Басов И. Г., Данилычев В. А., Рудой И. Г., Сорока А. М.** Кинетическая самофокусировка излучения CO_2-лазера в воздухе // ДАН СССР.— 1985.— Т. 284, № 6.— С. 1346—1349.

6. **Буланин М. О., Бурцев А. П., Коротков С. А.** Влияние колебательного и вращательного возбуждения на поляризуемость и рефракцию молекулярных газов // Хим. физика.— 1988.— Т. 7, № 13.— С. 1615—1619.
7. **Журавлев В. В., Сорокин А. А., Старик А. М.** О механизмах самофокусировки при взаимодействии лазерного излучения с газовой средой // Квант. электроника.— 1990.— Т. 16, № 4.— С. 501—506.
8. **Грабовский В. И., Старик А. М.** Влияние процессов макропереноса на изменение газодинамических параметров при воздействии импульса резонансного излучения // Докл. РАН.— 1992.— Т. 322, № 4.— С. 674—680.
9. **Выслоух В. А., Огнев Л. И.** Резонансная самофокусировка в смеси CO_2 и N_2 // ПМТФ.— 1980.— № 4.— С. 50—57.
10. **Егоров К. Д., Кандидов В. П., Огнев А. И.** Самовоздействие светового пучка в условиях кинетического охлаждения // Квант. электроника.— 1981.— Т. 8, № 5.— С. 1012—1017.
11. **Левин В. А., Нетесов В. В., Старик А. М.** Численное исследование распространения импульса излучения с $\lambda = 10{,}6$ мкм через поглощающие среды // ПМТФ.— 1984.— № 3.— С. 14—19.
12. **Gebhardt F. C., Smith D. C.** Kinetic cooling of a gas by absorption of CO_2 laser radiation // Appl. Phys. Lett.— 1972.— V. 20, N 3.— P. 129—132.
13. **Гордиенко В. М., Горшков В. А., Панченко В. Я., Сухоруков А. П.** Кинетическое охлаждение смеси газов CO_2—N_2 излучением CO_2-лазера // ЖЭТФ.— 1977.— Т. 73, № 3.— С. 1396—1399.
14. **Смит К., Томсон Р.** Численное моделирование газовых лазеров.— М.: Мир, 1981.
15. **Бирюков А. С.** Кинетика физических процессов в газодинамических лазерах // Тр. ФИАН.— 1975.— Т. 83.— С. 13—99.
16. **Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А.** Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры.— М.: Наука, 1980.
17. **Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.** Молекулярная теория газов и жидкостей.— М.: ИЛ, 1961.
18. **Ритынь Е. Н., Рубиков Ю. А., Слободская П. В., Соснов Е. Н.** Коэффициенты диффузии колебательно-возбужденных молекул // Хим. физика.— 1988.— Т. 7, № 5.— С. 703—710.
19. **Гордеев Е. П., Уманский С. Я.** Диффузия колебательно-возбужденных молекул // Хим. физика.— 1991.— Т. 10, № 10.— С. 1435—1437.
20. **Ahtye W. F.** Thermal conductivity in vibrationally exited gases // J. Chem. Phys.— 1972.— V. 57, N 12 (II).— P. 5542—5555.
21. **Булдаков М. А., Королев В. В., Матросов И. И., Павлова Т. Н.** Поляризуемость молекул N_2 и O_2 // Оптика и спектроскопия.— 1987.— Т. 62, № 3.— С. 519—523.

г. Москва *Поступила 3/XI 1992 г., в окончательном варианте — 2/III 1993 г.*

УДК 532.59

Н. В. Гаврилов

НЕПОДВИЖНЫЕ В ЛАБОРАТОРНОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ ВНУТРЕННИЕ УЕДИНЕННЫЕ ВОЛНЫ И ПЛАВНЫЕ БОРЫ

Уединенные волны и плавные боры являются объектом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований в современной гидродинамике [1—8]. В результате лабораторного моделирования [5—8] достигнута определенная ясность относительно достоинств и недостатков теоретических подходов к описанию этих волн. Однако некоторые вопросы остались открытыми. В частности, в опытах [5—8] волны перемещались относительно наблюдателя с медленно меняющейся скоростью, т. е. были нестационарными. Эта нестационарность могла быть обусловлена двумя причинами: тем, что в пределах экспериментальной установки еще продолжалось формирование стационарной волны из начального возмущения, или тем, что происходила диссипация энергии из-за вязкости. Какая из