

УДК 533.6.011:535.214

© 1992 г. В. И. ГРАБОВСКИЙ, А. М. СТАРИК

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССОВ МАКРОПЕРЕНОСА В ГАЗАХ НА ИЗМЕНЕНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ РЕЗОНАНСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В настоящее время проявляется значительный интерес к исследованию процессов в газах, обусловленных воздействием резонансного излучения. Интерес вызван необходимостью анализа самовоздействия излучения при его распространении как в лазерно-активных средах, так и в атмосфере различных планет, изучения закономерностей формирования газовых линз, а также задачами лазерной химии и технологии [1—6]. Одним из основных факторов, определяющих характер самовоздействия, является изменение газодинамических параметров среды. Изучению этого вопроса посвящено значительное число работ [1—12]. В большинстве из них рассматривается изменение состояния среды либо в режиме достаточно коротких импульсов, когда длительность воздействия существенно меньше характерных времен теплопроводности и диффузии и, следовательно, этими процессами можно пренебрегать, либо при наличии ярко выраженного бокового конвективного сноса среды в направлении, перпендикулярном оси пучка, когда эти процессы не являются определяющими. Однако существует достаточно большой интервал длительностей импульса воздействующего излучения, когда эти процессы макропереноса необходимо учитывать [13]. Более того, в ряде случаев именно они могут приводить к качественно новым эффектам [7]. Основной особенностью при определении изменения состояния среды под воздействием резонансного излучения является необходимость учета возбуждения внутренних степеней свободы молекул, которое также может оказывать существенное влияние на теплопроводность и диффузию [14]. Изучению основных закономерностей изменения параметров молекулярных газов в этих случаях и посвящена данная работа.

Рассмотрим двухкомпонентную смесь газов $A(1)$ и $B(2)$, частота нормальных колебаний (ν_i) одного из которых (например, A) резонансна частоте воздействующего излучения ν_I

$$\nu_I = \nu_i + \frac{E_i' - E_i}{h} + \Delta\nu$$

Здесь E_i' и E_i — вращательные энергии молекулы сорта A в верхнем и нижнем состояниях поглощающего перехода, $\Delta\nu$ — расстройка. Пусть также время индуцированных переходов τ_i удовлетворяет условию $\tau_i \gg \tau_{RT}, \tau_{VV}$, где τ_{RT} и τ_{VV} — характерные времена вращательно-поступательного и внутримодового колебательно-колебательного обмена.

В этом случае при $t \gg \tau_{RT}, \tau_{VV}$ можно полагать, что поступательные и вращательные степени свободы находятся в равновесии друг с другом, а внутри каждой моды устанавливается локальное больцмановское распределение с некоторой колебательной температурой T_i ($i = 1, 2$)

Для широкого диапазона параметров времена конвекции и установления движения в поле силы тяжести существенно больше других характерных времен макропереноса [13]. В данной работе будем рассматривать импульсы, длительность которых меньше этих времен.

Систему уравнений, описывающую изменение параметров среды при воздей-

ствии на газ резонансного излучения, в этом случае в соответствии с [13—15] можно представить в виде

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \vec{\nabla} [N_i (\mathbf{v} + \mathbf{V}_i)] = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \vec{\nabla}) \mathbf{v} + \vec{\nabla} p = \sum_i N_i \mathbf{X}_i \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial E_{RT}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \vec{\nabla}) E_{RT} + \vec{\nabla} (\rho \mathbf{v}) = k_v I \left(1 - \frac{\nu_i}{\nu_i'} l_i \right) + \sum_i N_i \mathbf{X}_i (\mathbf{V}_i + \mathbf{v}) - Q_{RT}^v - \vec{\nabla} q_{RT} \quad (4)$$

$$\rho \frac{\partial e'_v}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \vec{\nabla} e'_v) + \nabla q'_v = q'_T + q'_{VT} + q'_{VV} \quad (5)$$

$$p = \frac{\rho RT}{\mu}, \quad E_{RT} = \sum_i \left[\left(\frac{3}{2} + C_R^i \right) \frac{R}{\mu} T \gamma_i + \frac{v^2}{2} \right]$$

$$e'_v = \frac{h\nu_i R}{k\mu} \varepsilon \gamma_i, \quad \varepsilon_i = \frac{g \gamma_i}{(1 - \gamma_i)}$$

$$Q_{RT}^v = \sum_i (q'_{VT} + q'_{VV}), \quad y_i = \exp\left(-\frac{h\nu_i}{kT_i}\right), \quad \mu = \sum_i \mu \gamma_i$$

Здесь ρ , p , T — плотность, давление и температура газа; R — универсальная газовая постоянная; h — постоянная Планка; k — постоянная Больцмана; \mathbf{v} — скорость движения среды; μ_i и γ_i — молекулярная масса i -го компонента и его молярная доля в смеси; $N_i = N \gamma_i$, а 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_v — коэффициент поглощения; I — интенсивность воздействующего излучения; l_i — количество колебательных квантов, приобретаемых модой ν_i при индуцированных переходах; $C_R^i = 1$ — для линейных и $C_R^i = 1,5$ — для нелинейных молекул; q_{RT} и q'_v — потоки поступательно-вращательной и колебательной для i -го осциллятора энергий; q'_T , q'_{VT} , q'_{VV} — источники изменения колебательной энергии i -го осциллятора вследствие индуцированных переходов и процессов столкновительного колебательно-поступательного ($V-T$) и междумодового колебательно-колебательного ($V-V'$) обмена; \mathbf{V}_i — вариационная скорость для i -го компонента.

Выражения для потоков q_{RT} , q'_v и скорости \mathbf{V}_i имеют вид [15, 16]

$$q_{RT} = \sum_i \left(\frac{3}{2} + C_R^i \right) k T N_i \mathbf{V}_i - \lambda \vec{\nabla} T - \sum_i \lambda_i^{TV} \vec{\nabla} T_i + \frac{kT}{N} \sum_{i,j} \frac{D_{ij}^T N_j}{m_i D_{ij}} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) \quad (6)$$

$$q'_v = h\nu_i \varepsilon_i N_i \mathbf{V}_i - \lambda_i^{VT} \vec{\nabla} T - \lambda_i^{VV} \vec{\nabla} T_i + N k T \sum_{j=1}^2 D_{ij}^v \mathbf{d}_j \quad (7)$$

$$\mathbf{V}_i = -\frac{1}{N_i m_i} (D_i^T \vec{\nabla} \ln T + D_i^v \vec{\nabla} \ln T_i) + \frac{N^2}{\rho N_i} \sum_{j=1}^2 m_j D_{ij} \mathbf{d}_j \quad (8)$$

$$\mathbf{d}_i = \vec{\nabla} \gamma_i + \left(\gamma_i - \frac{N_i m_i}{\rho} \right) \vec{\nabla} (\ln p) + \frac{N_i m_i}{\rho p} \sum_{j=1}^2 N_j \mathbf{X}_j - \frac{N_i \mathbf{X}_i}{p}$$

где m_i — масса молекулы i -го компонента; λ — коэффициент теплопроводности; λ_i^{TV} — коэффициент колебательно-поступательной проводимости для потока ко-

лебательной энергии i -го осциллятора; λ_i^{VT} и λ_i^V — коэффициенты колебательно-поступательной и колебательной проводимости i -го компонента; D_i^T и D_{ij}^V — коэффициенты термо- и многокомпонентной диффузии для i -го компонента; D_{ij}^V — коэффициент колебательной диффузии между i -м и j -м осцилляторами; D_i^V — коэффициент колебательной термодиффузии. Для модели гармонического осциллятора, используемой в работе, $\lambda_i^{VT} = \lambda_i^{TV} = 0$ [17]. Кроме того, коэффициенты λ_i^V и D_{ij}^V связаны соотношением [18]

$$\lambda_i^V = D_{ij}^V C_{vi}, \quad C_{vi} = \frac{\exp(h\nu_i/kT) N k}{[\exp(h\nu_i/kT) - 1]^2} \left(\frac{h\nu_i}{kT} \right)^2$$

Выражения для источников q_I , q_{VT} , q_{VV} в принятых допущениях представимы в виде

$$\begin{aligned} q_I^1 &= h\nu_i N_i l_i \frac{k_e I}{\tau_i k_e^0 I_0}, \quad q_I^2 = 0 \\ q_{VT}^1 &= -h\nu_i N_i (\varepsilon_i - \varepsilon_u) \sum_j W_{i,0}^j \gamma_j \end{aligned} \quad (9)$$

$$q_{VV}^1 = h\nu_i N_i L_i \frac{r_i}{g_i^1} W_{1,2} N, \quad L_1 = -L_{1,2} \gamma_2, \quad L_2 = L_{1,2} \gamma_1$$

$$\varepsilon_u = \varepsilon_i(T), \quad L_{1,2} = \varepsilon_1^i (\varepsilon_2 + 1)^2 - \varepsilon_2^i (\varepsilon_1 + 1)^2 \exp[(r_2 h\nu_2 - r_1 h\nu_1)/kT]$$

Здесь $W_{i,0}^j$ и $W_{1,2}$ — соответственно константы скорости $V-T$ -обмена в i -м осцилляторе при столкновении с j -м партнером и $V-V'$ -обмена; r_i — количество колебательных квантов, теряемых (приобретаемых) модой i при $V-V'$ -обмене; τ_i — время индуцированных переходов ($\tau_i = h\nu_i N_{i,0}/k\nu_i^0 I_0$). Система (1)–(5) является переопределенной. Действительно, поскольку значения N_1 , N_2 и ρ связаны соотношением

$$\rho = m_1 N_1 + m_2 N_2 \quad (10)$$

то независимыми являются, например, уравнение (1) для одного из компонентов и уравнение (2). Из линейной зависимости двух уравнений вида (1) и уравнения (2), а также равенства $D_{ij}^V = D_{ji}^V$ следует

$$(D_1^T + D_2^T) \vec{\nabla} \ln T + D_1^V \vec{\nabla} \ln T_1 + D_2^V \vec{\nabla} \ln T_2 = 0 \quad (11)$$

Поскольку для обычной термодиффузии справедливо соотношение $D_1^T = -D_2^T$ [16], то из (11) получаем

$$D_1^V \vec{\nabla} \ln T_1 = -D_2^V \vec{\nabla} \ln T_2 \quad (12)$$

Из (12) следует, что в двухкомпонентной смеси лишь один коэффициент колебательной термодиффузии является независимым. Так же как и для обычной термодиффузии, в однокомпонентном газе $D_1^V = 0$ [19].

Рассмотрим случай, когда силами X_i можно пренебрегать [12] и, кроме того, выполняется условие

$$E_n \ll H_0, \quad E_n = \int_0^{\tau_u} \frac{k_e I}{\rho}, \quad H_0 = E_{RT} + \sum_i e_i v + \frac{p}{\rho} \quad (13)$$

Введем безразмерные координаты $r' = r/R_u$ и $t' = t/\tau_u$, где R_u — характерный радиус пучка воздействующего излучения, а τ_u — время воздействия, и проведем линеаризацию уравнений (1)–(5), представляя ρ , N , T , v , N_i , V_i в виде

$$\xi = \xi_0 (1 + \delta\xi'), \quad \xi = \rho, T, N, N_i, \quad v = \delta v R_u / \tau_u \quad (14)$$

$$V_i = \delta V_i' R_s / \tau_u, \quad \delta = k_v' I_0 \tau_u / (\rho_0 E_{RT}')$$

где δ в соответствии с (13) — малый параметр. Здесь и далее индекс ноль отвечает невозмущенному состоянию покоящейся среды при $t=0$.

Подставляя (14) в (1)–(8) и пренебрегая членами с порядком малости выше δ , после исключения из (2), (3) v' получаем следующую систему уравнений для безразмерных возмущений ξ' и безразмерных колебательных температур $T_i' = T_i/T_0$ (далее в обозначениях r' , t' и T_i' штрихи опускаем)

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i'}{\partial t} &= \frac{\tau_u}{\tau_D} \Delta \left(N_i' - \rho' - \frac{m_i N_{i0} (m_i - m_j)}{m_i^2 N_{i0}^2 (P_m + P_c)^2} \rho' \right) + \frac{\tau_u}{\tau_{T1}} \Delta T' + \left(\frac{\vec{\nabla} T_i}{T_i} \vec{\nabla} \right) N_i' \frac{\tau_u}{\tau_{D1}} + \\ &+ \frac{\tau_u}{\delta \tau_{D1}'} \left[\frac{\Delta T_i'}{T_i} - \left(\frac{\vec{\nabla} T_i}{T_i} \right)^2 \right] + \frac{\partial \rho'}{\partial t} \end{aligned} \quad (15)$$

$$\kappa \frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} = \left(\frac{\tau_u}{\tau_s} \right)^2 \Delta (\rho' + T') \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T'}{\partial t} &= k_v' I' \left(1 - \frac{v_i}{v_i'} \right) - \left(\vec{\nabla} V_1' - \vec{\nabla} V_2' \right) \frac{N_{i0} \gamma_{10} \gamma_{20} k}{C_{RT}'} \left(\frac{\tau_D}{\tau_{T1}} - \frac{\tau_D}{\tau_{T2}} \right) + \\ &+ \frac{\tau_u}{\tau_{i1}} \Delta T' + \frac{\tau_u}{\delta} \left\{ \sum_i e_{i0}^T \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_u}{\tau_i^{\nu T}} + \frac{L_{12}}{\tau_{\nu\nu'}} \left(\frac{e_{10}^T}{\gamma_{10}} - \frac{e_{10}^T}{\gamma_{20}} \right) \right\} + \frac{N_0 k}{C_{RT}'} \frac{\partial \rho'}{\partial t} + \\ &+ \sum_i \gamma_{i0} \left(\frac{\vec{\nabla} T_i}{T_i} \vec{\nabla} \right) T' \frac{\tau_u}{\tau_{D1}'} \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} C_{vi}' \frac{\partial T_i}{\partial t} &= \frac{\tau_u}{\tau_i'} \Delta T_i + C_{vi}' \left(\frac{\nabla T_i}{T_i} \nabla \right) T_i \frac{\tau_u}{\tau_{D1}'} + e_{i0}^{\nu} \left\{ \frac{\tau_u}{\tau_i'} k_v' I' \delta_{ii} - \frac{\tau_u}{\tau_i^{\nu T}} (\varepsilon_i - \varepsilon_u) + \right. \\ &+ \left. (-1)^i \frac{L_{12}}{\tau_{\nu\nu'}} \frac{\tau_u}{\gamma_{i0}} \right\} - \delta \vec{\nabla} d_j' \frac{\tau_u}{\tau_i^{\nu}} \frac{k N_{i0}}{C_{vi}'} \end{aligned} \quad (18)$$

$$p' = \rho' + T' \quad (19)$$

$$V_i' = \frac{\tau_u}{\tau_D} \frac{d_j' m_i N_{i0}}{\gamma_{i0}^2 (P_c + P_m) m_i N_{i0}} - \frac{\tau_u}{\tau_{T1}} \vec{\nabla} T' - \frac{\tau_u}{\delta \tau_{D1}'} \frac{\vec{\nabla} T_i}{T_i}$$

$$d_j' = (P_c + P_m) \gamma_{i0}^2 (-1)^i \vec{\nabla} (\rho' - N_i') + \gamma_{i0} \left(1 - \frac{m_j}{m_j \gamma_{i0}} (P_c + P_m)^{-1} \right) \nabla p'$$

$$e_{i0}^{\nu} = \frac{uv_i N_{i0}}{C_{vi}' T_0}, \quad e_{i0}^T = \frac{hw_i N_{i0}}{C_{RT}' T_0}, \quad \kappa = 1 + \frac{\rho_0 R}{\mu C_{RT}'}, \quad P_c = \frac{N_{20}}{N_{10}}$$

$$P_m = \frac{m_1}{m_2}, \quad C_{RT}' = \sum_i \left(\frac{3}{2} + C_R^i \right) k N_{i0}, \quad C_{vi}' = \frac{C_{vi}}{C_{vi}'}.$$

$$C_{vi} = C_{vi}(T_0, N_{i0}), \quad k_v' = \frac{C_{vi}}{C_{vi}'}, \quad I' = \frac{I}{I_0}, \quad i = 1, 2, \quad i \neq j$$

Здесь $\tau_s = R_s/c_0$ — время распространения звука поперек пучка; $\tau_D = R_s^2/D_{1p}$, $\tau_{T1} = R_s^2 m_i N_{i0}/D_{1i}'$, $\tau_{D1}' = R_s^2 m_i N_{i0}/D_{1i}'$, $\tau_i^{\nu} = R_s^2/D_{ij}^{\nu}$ — соответственно времена многокомпонентной диффузии, термодиффузии i -го компонента, диффузии колебательной энергии i -го осциллятора и колебательной диффузии между i -м и j -м осцилляторами; $\tau_{i1} = R_s^2 C_{RT}'/\lambda$ — время теплопроводности; $\tau_i^{\nu} = R_s^2 C_{vi}'/\lambda_i^{\nu}$ — время

колебательной теплопроводности для i -го осциллятора; $\tau_i^{VT} = \left(\sum_j W'_{iD} N_{jD} \right)^{-1}$ — время $V-T$ -релаксации для i -го осциллятора; $\tau_{VV'} = (W_{12} \gamma_{10} \gamma_{20} N_0)^{-1}$ — время $V-V'$ -обмена. Иерархия именно этих времен и определяет степень влияния на изменение газодинамических параметров различных процессов макропереноса.

Из анализа (15)—(18) следует, что обычные газодинамические процессы переноса, действующие и в газах с невозбужденными молекулярными колебаниями (диффузия и теплопроводность), имеют порядок малости δ по сравнению с процессами диффузии колебательной энергии и колебательной теплопроводности. Поскольку D_i^V и D_i^T , а также D_{ij} и D_{ij}^V отличаются не более чем в 2—3 раза [18], то ясно, что возбуждение колебательных степеней свободы молекул может привести к значительному увеличению влияния процессов макропереноса на изменение газодинамических параметров. Действительно, пусть $\tau_u \geq \tau_a \sim \tau_i^{VT}$, $\tau_{VV'}$, τ_D , а $\tau_{D_i}^V$, τ_{D_i} , τ_{T_i} , $\tau_{ij}^V \gg \tau_u$, $\tau_{T_i} \approx \tau_{D_i}^V$, $\tau_D \approx \tau_{ij}^V$. Последние два соотношения характерны для полярных молекул [18]). Если $\delta \tau_{D_i}^V \sim \tau_a$, то из (15)—(18) получаем

$$\frac{\partial N_i'}{\partial t} = \frac{\tau_u}{\delta \tau_{D_i}^V} \left[\frac{\Delta T_i}{T_i} - \left(\frac{\vec{\nabla} T_i}{T_i} \right)^2 \right] + \frac{\partial \rho'}{\partial t} \quad (20)$$

$$\kappa \frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} = \left(\frac{\tau_u}{\tau_a} \right)^2 \Delta (\rho' + T') \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T'}{\partial t} = & k_v' I' \left(1 - \frac{\nu_1}{\nu_1} l_1 \right) + \frac{\tau_u}{\delta} \left\{ \sum_i e_{i0}^T \frac{\epsilon_i - \epsilon_u}{\tau_i^{VT}} + \frac{L_{12}}{\tau_{VV'}} \left(\frac{e_{10}^T}{\gamma_{10}} - \frac{e_{20}^T}{\gamma_{20}} \right) + \right. \\ & \left. + \vec{\nabla} \left(\frac{\vec{\nabla} T_1}{T_1} - \frac{\vec{\nabla} T_2}{T_2} \frac{\tau_{D_1}^V}{\tau_{D_2}^V} \right) \frac{k N_0 \gamma_{10} \gamma_{20}}{C_{RT}} \frac{\tau_D}{\tau_{D_1}^V} \left(\frac{1}{\tau_{D_1}^V} - \frac{1}{\tau_{D_2}^V} \right) \right\} \quad (22) \end{aligned}$$

$$C_{\nu_i}' \frac{\partial T_i}{\partial t} = \left\{ \frac{\tau_u}{\tau_i} \delta_{i,1} k_v' I' - \frac{\tau_u}{\tau_i^{VT}} (\epsilon_i - \epsilon_u) + (-1)^i \frac{L_{12} \tau_u}{\tau_{VV'} \gamma_{i0}} \right\} e_{i0}^V \quad (23)$$

Из (20)—(23) видно, что изменение колебательной температуры, а также плотности не зависит от процессов макропереноса. В то же время изменение концентраций определяется диффузией колебательной энергии возбужденных молекул. Она влияет также и на изменение поступательной температуры, хотя и в значительно меньшей степени. Конкретный анализ проведем на примере воздействия излучения CO_2 -лазера с $\nu_l = 1066,036 \text{ см}^{-1}$ (линия R2 [00⁺1 → 02⁺0]) на смесь газов H_2O и O_2 ($\gamma_{10} = 0,2$; $\gamma_{20} = 0,8$) при $p_0 = 0,4 \text{ кПа}$ и $T_0 = 300 \text{ К}$.

Излучение с такой частотой поглощается на колебательно-вращательном переходе m [000(10₃₈)] → n [010(9₀₉)] молекулы H_2O ($\nu_{mn} = 1066,154 \text{ см}^{-1}$) [20]. Газ при $t = 0$ находится в термодинамическом равновесии. Как показано в [21], для рассматриваемого случая можно полагать, что в молекуле H_2O возбуждаются только деформационные колебания [21]. Эти колебания связаны быстрым почти резонансным $V-V'$ -обменом с колебаниями молекул O_2 . Симметричные же и асимметричные колебания H_2O можно при этом считать невозбужденными. Коэффициент поглощения для рассматриваемого перехода определяется соотношениями

$$k_\nu = \frac{\lambda_{mn}^3}{8\pi^3 2} \sqrt{\frac{\mu_1}{2RT}} A_m^n \left(N_m - N_n \frac{g_m}{g_n} \right) H(a, \nu)$$

$$N_m = \frac{N_1 g_m}{\mu_1 Z_m} \exp \left(-\frac{E_j'}{kT} \right), \quad N_n = \frac{N_1 g_n \gamma_1}{\mu_1 Z_n} \exp \left(-\frac{E_j''}{kT} \right)$$

$$Z_q = (1 - \gamma_1)^{-1} 2 \sqrt{\pi T^3 / (A_q B_q C_q)}, \quad q = m, n$$

Здесь A_m^n — коэффициент Эйнштейна; λ_{mn} — длина волны в центре линии поглощающего перехода; A_q, B_q, C_q — вращательные постоянные молекулы H_2O в состоянии q ; $H(a, \nu)$ — функция Фойхга; g_m и g_n — кратности вырождения уровней m и n ($g_m = 3(2j' + 1)$, $g_n = 3(2j'' + 1)$).

Необходимые для расчета k_v молекулярные постоянные, а также значения W_{ij}^l ($i, j = 1, 2$) и $W_{1,2}$ были взяты такими же, как и в [20]. Коэффициенты D_{12} , D_1^T , λ вычислялись по соотношениям [22] с использованием потенциала Ленарда—Джонса ($D_{12} = 85 \text{ см}^2/\text{с}$, $\lambda = 1,854 \cdot 10^{-2} \text{ Н}/(\text{с} \cdot \text{К})$, $D_1^T = -2,4 \cdot 10^{-6} \text{ г}/(\text{см} \cdot \text{с})$, $D_2^T = -D_1^T$). Значения D_4^V и D_1^V для рассматриваемой смеси газов не определены. Однако измерения, проведенные в [18], показали, что для полярных двухатомных молекул HCl и CO $D_4^V \approx D_4$. В [23] было показано, что коэффициент колебательной диффузии для деформационной моды CO_2 также не отличается от коэффициента обычной самодиффузии. Для молекул O_2 $D_4^V = 0,6 D_4$ [18]. Поэтому полагалось, что $D_{12}^V = D_{12}(\gamma_{10} + 0,6\gamma_{20})$. При вычислении D_1^V на основании результатов [14—16] полагалось, что характер зависимости между коэффициентами D_{12}^V и D_1^V такой же, как и между коэффициентами D_{12} и D_1^T , т. е. $D_1^V \sim D_1^T$, а величина D_2^V определялась по соотношению (12).

Будем рассматривать пучки с гауссовым распределением интенсивности по радиусу: $I(r, t) = I_0(t) \exp(-r^2/R_a^2)$, $I_0(t) = I_0$ при $0 < t \leq \tau_u$ и $I_0(t) = 0$ при $t > \tau_u$ с $R_a \ll k_v^{-1}$ ($R_a = 0,1 \text{ см}$). При этом изменением параметров в продольном направлении можно пренебрегать, а для системы (15)—(19) имеют место следующие начальные и граничные условия:

при $t = 0$

$$\rho' = N_1' = N_2' = T' = 0, \quad T_1 = T_2 = 1$$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} = \frac{m_2 N_0}{\rho_0} \left\{ \frac{\partial N_1'}{\partial t} - \frac{\partial N_1'}{\partial t} \frac{N_{10}}{N_0} \left(1 - \frac{m_1}{m_2} \right) \right\}$$

при $r = 0$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial r} = \frac{\partial N_1'}{\partial r} = \frac{\partial N_2'}{\partial r} = \frac{\partial T'}{\partial r} = \frac{\partial T_1}{\partial r} = \frac{\partial T_2}{\partial r} = 0$$

при $r = R_b$

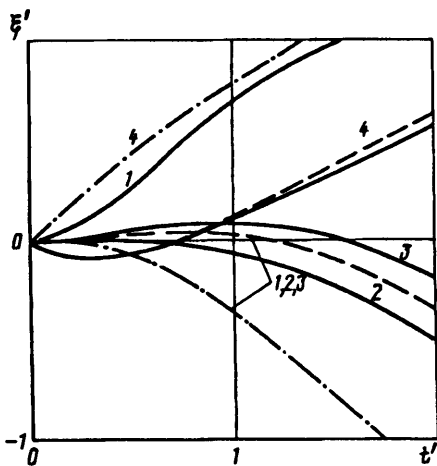
$$\rho' = N_1' = N_2' = T' = 0, \quad T_1 = T_2 = 1$$

Начальное условие для $\partial \rho'/\partial t$ следует из (10), а $R_b = \infty$.

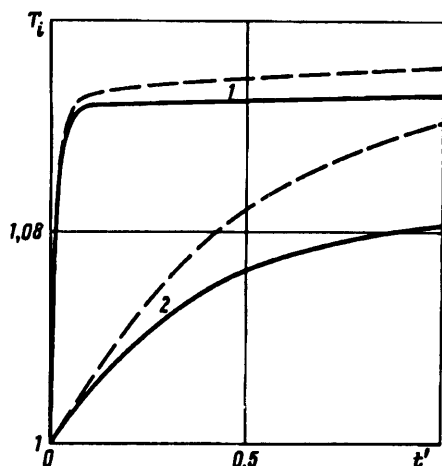
В данной работе в качестве независимых были выбраны два уравнения вида (15), которые решались совместно с уравнением (17) и двумя уравнениями вида (18). Величина ρ' определялась из (16). Численное интегрирование этой системы уравнений проводилось с использованием неявных разностных схем второго порядка точности по пространству и первого по времени [24]. Процедура решения построена на методе последовательных итераций по времени, которые проводятся до достижения требуемой точности. При проведении конкретных расчетов полагалось, что условия на бесконечности выполняются при некотором конечном $r = R_b$, величина которого зависит от отношения τ_u/τ_a и определяется из условия исключения влияния отражения возмущений от внешней условной границы на параметры в центре пучка.

Для рассматриваемых условий характерные времена процессов переноса имеют следующие значения: $\tau_1 = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ с}$, $\tau_1^{VT} = 2,5 \cdot 10^{-6} \text{ с}$, $\tau_2^{VT} = 6,6 \cdot 10^{-1} \text{ с}$, $\tau_{\nu\nu'} = 7,8 \cdot 10^{-5} \text{ с}$, $\tau_a = 2,89 \cdot 10^{-6} \text{ с}$, $\tau_D = \tau_1^V = \tau_2^V = 1,3 \cdot 10^{-4} \text{ с}$, $\tau_\lambda = 1,9 \cdot 10^{-4} \text{ с}$, $\tau_{D1} = \tau_{T1} = 2,5 \cdot 10^{-3} \text{ с}$, $\tau_{T2} = 1,8 \cdot 10^{-2} \text{ с}$, $\tau_{12}^V = 1,9 \cdot 10^{-4} \text{ с}$, $\tau_{D2}^V = 3 \cdot 10^{-2} \text{ с}$.

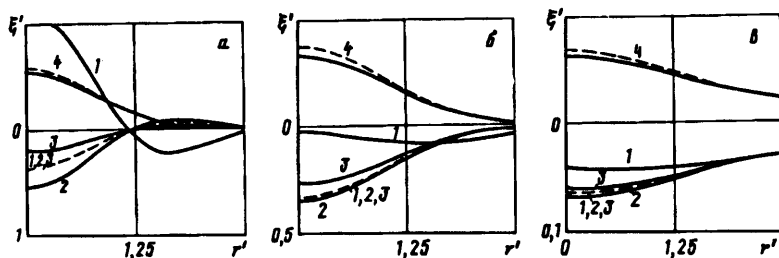
Таким образом, имеем следующую иерархию характерных времен: $\tau_a \sim \tau_1^{VT} < \tau_{\nu\nu'} \sim \tau_1^V \sim \tau_{12}^V \sim \tau_D \sim \tau_\lambda < \tau_{D1}^V \sim \tau_{T1} < \tau_{T2} \sim \tau_{D2}^V \ll \tau_2^{VT}$. Можно выделить три характерных момента времени: $t_1 \approx \tau_a$, $t_2 \approx \tau_D$ и $t_3 \approx \tau_{T1}$, которые соответствуют определенным процессам переноса. Рассмотрение проведем на примере сравнения результатов расчета с использованием полной модели и модели, в которой



Фиг. 1



Фиг. 2



Фиг. 3

процессы переноса, связанные возбуждением колебательных степеней свободы, не учитываются ($D_i^V = D_j^V = \lambda_i^V = 0$) (зависимости для этих моделей показаны соответственно сплошными и штриховыми линиями).

Рассмотрим сначала динамику изменения параметров при $t \leq \tau_a, \tau_1^{VT}$. На фиг. 1 представлено изменение N'_1, N' и T' (цифры 1—4) во времени $t' = t/\tau_a$ на оси пучка с $I_0 = 100 \text{ МВт/см}^2$ (при $t = \tau_a, \delta = 0,46 \cdot 10^{-3}$). Здесь же для сравнения штрихпунктиром показаны аналогичные зависимости, полученные с использованием модели «равновесного поглощения» ($T_1 = T_2 = T$ и $k_s(t) = k_s(t=0)$), которая достаточно часто используется в литературе [3, 10]. Даже при $t = \tau_a$ ($\tau_a \ll \tau_{12}^V, \tau_{21}^V$) колебательная термодиффузия существенно влияет на изменение N'_1 . Так, если в модели с $D_i^V = D_j^V = \lambda_i^V = 0$ $N'_1(t) \simeq N_1^2(t) \simeq N'(t)$ (так же, впрочем, как и в модели «равновесного поглощения»), то при учете колебательной термодиффузии поведение $N'(t), N'_1(t)$ и $N'_2(t)$ качественно различается. Влияние колебательной термодиффузии на поведение $T'(t)$ существенно слабее. Как показывают расчеты, на изменение колебательной температуры деформационной моды $\text{H}_2\text{O}(T_i)$ при $t \sim \tau_a$ также начинает оказывать влияние и колебательная теплопроводность, хотя, вследствие того что τ_a меньше τ_1^V более чем на порядок, влияние это еще не велико.

Приближение равновесного поглощения вообще не позволяет правильно описать динамику изменения параметров. Во-первых, эта модель не учитывает изменение k_s во времени и не описывает кинетическое охлаждение, которое имеет место при поглощении излучения CO_2 -лазера на колебательно-вращательных переходах молекулы H_2O с $E_{r'} < E_r$ (это условие реализуется в рассматриваемом случае) [20]. Во-вторых, в рамках этой модели невозможно описать влияние процессов макропереноса, обусловленных возбуждением молекулярных колебаний.

Влияние колебательной термодиффузии и колебательной теплопроводности

на изменение T_1 и T_2 увеличивается с ростом t . Это иллюстрирует фиг. 2, на которой представлены распределения T_i ($i = 1, 2$) во времени $t' = t/\tau_D$ на оси пучка. Процессы колебательной термодиффузии и колебательной теплопроводности приводят к уменьшению значений T_1 и T_2 . Интересен тот факт, что при учете указанных процессов квазиравновесию между колебаниями H_2O и O_2 , которое устанавливается при $t > \tau_{VV}$, отвечают существенно меньшие значения T_1 и T_2 , чем те, которые реализуются в модели, не учитывающей эти процессы. Это обусловлено тем, что при $\tau_1^V \sim \tau_{VV}$ на процесс установления квазистационарного распределения T_i влияет помимо $V - V'$ -обмена также и колебательная теплопроводность, обуславливающая уменьшение T_i на оси пучка и, наоборот, ее увеличение на периферии.

Процессы колебательной термодиффузии влияют также и на распределение макроскопических параметров по радиусу пучка. На фиг. 3 показаны распределения $N_1'(r')$, $N'(r')$ и $T'(r')$ (цифры 1—4, $r' = r/R_0$) для рассматриваемого случая в моменты времени $t = 2\tau_a$; τ_1^V ; τ_{D1}^V ($a - \theta$) ($\delta = 0,46 \cdot 10^{-3}$; $1,7 \cdot 10^{-2}$; $0,33$ соответственно). Увеличение N_1' на оси пучка при $t = 2\tau_a$ сопровождается его уменьшением на периферии. Это обусловлено тем, что при $t = 2\tau_a$ нагрев среды еще не велик и уменьшение ρ' , которое ведет к уменьшению N_1' , незначительно, в то же время, вследствие того что $D_1^V < 0$, диффузионный поток, возникающий из-за неоднородного изменения T_1 , направлен от периферии к центру пучка и именно он определяет при данном t характер распределения $N_1'(r')$. Величина же $D_2^V > 0$, поэтому для N_2' диффузионный поток направлен от оси к периферии, что приводит к уменьшению N_2' на оси (здесь $N_2' < 0$) и увеличению на периферии ($N_2' > 0$). При $t = \tau_1^V$ уменьшение плотности на оси пучка уже значительно и именно этот процесс начинает определять поведение зависимостей $N_1'(r')$. В этот момент времени распределения $N_2'(r')$ для двух рассматриваемых моделей близки, но распределения $N_1'(r')$ различаются еще довольно существенно. При $t = \tau_{D1}^V$ нагрев среды уже столь велик, что потоки, обусловленные колебательной термодиффузией, не оказывают значительного влияния на изменение $N_1'(r')$, хотя и здесь $N_1' \neq N_2' \neq N'$. При $t = \tau_{D1}^V$ начинают играть роль обычная диффузия и теплопроводность, поскольку даже для модели с $D^V = D_0^V = \lambda_1^V = 0$ значения N_1' , N_2' и N' на оси пучка различаются ($N_1' = -6,61 \cdot 10^{-1}$; $N_2' = -6,92 \cdot 10^{-1}$; $N' = -6,86 \cdot 10^{-1}$).

Влияние колебательной термодиффузии и теплопроводности на изменение N_1' и T' увеличивается с ростом интенсивности воздействующего излучения вплоть до того значения I_0 , при котором наступает насыщение поглощающего перехода.

Полученные результаты указывают на необходимость учета влияния процессов макропереноса в колебательно-возбужденном газе на изменение газодинамических параметров даже на временах, меньших характерных времен этих процессов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gebhardt F. G. High power laser propagation//Appl. Opt. 1976. V. 15. № 6. P. 1479—1493.
2. Распространение лазерного пучка в атмосфере. Под ред. Стробена Д. М.: Мир, 1981. 414 с.
3. Fleck J. A., Jr., Morris J. R., Feit M. D. Time-dependent propagation of high energy laser beams through the atmosphere//Appl. Phys. 1976. V. 10. № 2. P. 129—160.
4. Выслоух В. А., Огнев Л. И. Численное исследование тепловой дефокусировки в импульсном CO_2 -усилителе//Квант. электроника. 1981. Т. 8. № 6. С. 1214—1220.
5. Baillet R. T., Cruickshank F. R., Guthrie R. et al. Short time-scale effects in the pulsed source thermal lens//Mol. Phys. 1983. V. 48. № 1. P. 81—95.
6. Осипов А. И., Панченко В. Я. Тепловые эффекты при взаимодействии лазерного излучения с молекулярными газами. М.: Изд-во МГУ, 1983. 117 с.
7. Бункин Ф. В., Кириченко Н. А., Морозов Ю. Ю. Колебательные процессы при нагреве газовых смесей пучком лазерного излучения//Изв. АН СССР. Сер. физ. 1987. Т. 51. № 6. С. 1162—1169.
8. Старунов В. С., Фабелинский И. Л. Вынужденное рассеяние Мандельштама—Бриллюэна и вынужденное энтропийное (температурное) рассеяние света//Успехи физ. наук. 1969. Т. 98. Вып. 3. С. 441—491.

9. *Soloukhin R. I., Martynenko O. G., Galich N. E.* Thermal interaction of high-power laser radiation with gases//Int. J. Heat and Mass Transfer. 1980. V. 23. № 12. P. 1653—1661.
10. *Гордин М. П., Соколов А. В., Стрелков Г. М.* Распространение мощного лазерного излучения в атмосфере//Итоги науки и техники. Радиофизика. М.: ВИНТИ, 1980. Т. 20. С. 206—289.
11. *Левин В. А., Сорокин А. А., Старик А. М.* О влиянии интенсивности излучения и параметров среды на изменение показателя преломления при поглощении излучения HF-лазера парами воды//ПМТФ. 1989. № 4. С. 10—15.
12. *Журавлев В. В., Сорокин А. А., Старик А. М.* О механизмах самофокусировки при взаимодействии лазерного излучения с газовой средой//Квант. электроника. 1990. Т. 17. № 4. С. 501—506.
13. *Журавлев В. В., Сорокин А. А., Старик А. М.* К вопросу об описании гидродинамического движения среды при воздействии резонансного излучения//Журн. техн. физ. 1991. Т. 61. № 3. С. 33—40.
14. *Жданов В. М., Алиевский М. Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 335 с.
15. *Смит К., Томсон Р. М.* Численное моделирование газовых лазеров. М.: Мир, 1981. 515 с.
16. *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554 с.
17. *Добкин С. В., Сон Э. Е.* Процессы переноса в колебательно-возбужденном молекулярном газе//ПМТФ. 1987. № 2. С. 10—17.
18. *Ahtye W. F.* Thermal conductivity in vibrationally excited gases//J. Chem. Phys. 1972. V. 57. № 12. P. 5542—5555.
19. *Егоров Б. В., Жигулев В. Н., Кузнецов В. М.* Об уравнениях аэродинамики при наличии бинарных молекулярных процессов//Докл. АН СССР. 1965. Т. 164. № 6. С. 1249—1252.
20. *Левин В. А., Сорокин А. А., Старик А. М.* О тепловых эффектах при поглощении излучения CO₂-лазера парами воды//Квант. электроника. 1986. Т. 13. № 3. С. 551—558.
21. *Сорокин А. А., Старик А. М.* О влиянии интенсивности излучения и параметров среды на глубину охлаждения и изменение показателя преломления при поглощении излучения с $\lambda = 9,2—10,6$ мкм парами воды//ПМТФ. 1986. № 6. С. 9—16.
22. *Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 929 с.
23. *Ритынь Е. Н., Рубинов Ю. А., Слободская П. В., Соснов Е. Н.* Коэффициенты диффузии колебательно-возбужденных молекул CO₂//Хим. физика. 1988. Т. 7. № 5. С. 703—710.
24. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.

Москва

Поступила в редакцию
13.VI.1991