02;07

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССОВ МАКРОПЕРЕНОСА В ГАЗАХ НА ИЗМЕНЕНИЕ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ПРИ ПОГЛОЩЕНИИ ИЗЛУЧЕНИЯ НА КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДАХ

В.И.Грабовский, А.М.Старик

Анализируется влияние процессов диффузии и теплопроводности на изменение показателя преломления двухкомпонентной смеси газов при возбуждении молекулярных колебаний резонансным излучением. Для гауссовых пучков проведено численное моделирование влияния различных параметров на изменение показателя преломления при наличии и отсутствии процессов макропереноса, связанных с возбуждением колебаний молекул смеси.

Необходимость исследования динамики изменения показателя преломления в молекулярных газах связана с тем, что именно она в значительной степени определяет характер самовоздействия при распространении импульса излучения в поглощающей среде. Изучению этого вопроса было посвящено значительное число работ (см., например, [1–6]). Было показано, что основными механизмами изменения показателя преломления при поглощении излучения ИК диапазона (излучение этого диапазона поглощается на колебательно-вращательных переходах) являются изменение поляризуемости молекул смеси и изменение плотности вследствие газодинамических эффектов. При этом, однако, влияния таких процессов макропереноса, как диффузия и теплопроводность, на изменение показателя преломления не рассматривалось. В то же время недавно в [7] было показано, что эти процессы в ряде случаев могут оказывать значительное влияние на изменение газодинамических параметров среды. Поскольку показатель преломления зависит от них существенным образом, то представляет интерес определить, какова роль процессов диффузии и теплопроводности при возбуждении молекулярных колебаний воздействующим излучением в изменении его величины. Этому вопросу и посвящена данная работа.

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

$$\nu_I \doteq \nu_1 + \frac{E_{j''} - E_{j'}}{h} + \Delta\nu. \tag{1}$$

Здесь $E_{j''}$ и $E_{j'}$ — вращательная энергия молекулы сорта A в верхнем и нижнем состояниях поглощающего перехода $m(V_1' = 0, j') \to n(V_1'' = 1, j'')$ (V — колебательное, j — вращательное квантовые числа); $\Delta\nu$ — расстройка; h — постоянная Планка.

При поглощении излучения на колебательно-вращательных переходах величина показателя преломления n определяется следующим соотношением [6]:

$$n^2 - 1 = 4\pi \sum_i N_i \alpha_i,$$

$$\alpha_1 = \alpha_{10} + \alpha_1^V + \alpha_{mn}, \qquad \alpha_2 = \alpha_{20} + \alpha_2^V. \tag{2}$$

Здесь α_{i0} — нерезонансная молекулярная поляризуемость молекулы i-го компонента при невозбужденном внутреннем движении, α_{mn} — резонансная часть поляризуемости, α_i^V характеризует вклад молекулярных колебаний в нерезонансную часть поляризуемости молекул i-го сорта.

Учитывая, что для газов $\delta n \ll n_0$ ($\delta n = n - n_0$, индекс 0 отвечает невозмущенным параметрам среды), изменение показателя преломления в соответствии с (2) можно представить в виде

$$\delta n = \frac{2\pi}{n_0} \sum_{i=1}^{2} (\alpha_{i0} \delta N_i + N_{i0} \delta \alpha_i). \tag{3}$$

Вводя безразмерные переменные $\tilde{N}_i = N_i / N_{i0}$ и $\tilde{\alpha}_i = \alpha_i / \alpha_{i0}$, соотношение (3) удобно переписать в следующей форме:

$$\delta n = \frac{1}{2n_0} \sum_{i=1}^{2} \left\{ (n_{0i}^2 - 1)[\delta \tilde{N}_i + \delta \tilde{\alpha}_i] \right\}. \tag{4}$$

Из (4) видно, что в общем случае величина δn определяется как изменением концентраций компонентов смеси, так и изменением их поляризуемостей.

Будем рассматривать случаи, когда время индуцированных переходов $\tau_I \gg \tau_{RT}, \tau_{VV}$, где τ_{RT} и τ_{VV} — характерные времена вращательно-колебательного обмена. При этом можно полагать, что между вращательными и поступательными степенями свободы существует термодинамическое равновесие, а внутри каждой моды устанавливается локальное больцмановское распределение с колебательной температурой T_i ($i = 1, 2$). При этих допущениях $\alpha_i^V = f(T_i)$ и $\alpha_{mn} = \varphi(T_1)$.

Для определения изменения N_i и T_i при воздействии резонансного излучения на неподвижный газ воспользуемся системой уравнений Навье-Стокса для колебательно-неравновесного газа, которая в переменных $r' = r/R_a$ и $t' = t/\tau_u$, где R_a — характерный радиус пучка, а τ_u — длительность импульса воздействующего излучения, может быть приведена к следующему виду [7] (штрихи далее опускаем):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho \mathbf{U}),$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = -\nabla \left\{ N_i \left[\mathbf{U} - \frac{\tau_u}{\tau_{Ti}} \frac{\nabla \ln T}{N_i} - \frac{\tau_u}{\tau_{Di}^V} \frac{\nabla \ln T_i}{N_i} + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{\tau_u}{\tau_D} \sum_k d_k \frac{P_m^{2-k}(1+P_N)^2}{(P_m+P_N)P_N^{i-1}} \frac{N^2}{N_i \rho} \right] \right\},$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho(\mathbf{U}\nabla)\mathbf{U} = -\frac{\nabla p}{\varkappa} \left(\frac{\tau_u}{\tau_a} \right)^2 + \frac{\tau_u}{\tau_k} \left[\Delta \mathbf{U} + \left(\frac{\xi}{\eta} + \frac{1}{3} \right) \nabla(\nabla \mathbf{U}) \right] +$$

$$+ \left(\frac{\tau_u}{\tau_F} \right)^2 \sum_k N_k \mathbf{X}_k \gamma_{k0},$$

$$\rho \frac{\partial E_{RT}}{\partial t} + \rho(\mathbf{U}\nabla)E_{RT} = -p\nabla\mathbf{U}(\varkappa-1) + \varkappa(\varkappa-1)\left[\sum_i \mathbf{X}_i \mathbf{V}_i N_i \left(\frac{\tau_a}{\tau_F} \right)^2 \gamma_{i0} + \right.$$

$$\left. + \frac{\tau_a^2}{\tau_u \tau_k} \nabla \mathbf{U}' \sigma' \right] + k_\nu I \delta_I \frac{\zeta}{\theta_1 + \zeta} + (\varkappa-1) \sum_i \left[\frac{\tau_u}{\tau_i^{VT}} \theta_i \gamma_i (\varepsilon_i - \varepsilon_{i0}) - \right.$$

$$\left. - \frac{\tau_u}{\tau_{VV'}} L_{1,2} \frac{(-1)^i \theta_i r_i}{\gamma_{i0} g_i^{r_i}} \right] - \nabla \left[\frac{\rho T}{C_{RT}^0} \sum_i C_{RT}^i \mathbf{V}_i - \frac{\tau_u}{\tau_\lambda} \nabla T + \right.$$

$$\left. + \frac{T}{N} \sum_{i \neq j} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j)(\varkappa - 1) \frac{N_j \gamma_{i0} \gamma_{j0} \tau_D}{\tau_{Ti}} \right], \tag{5}$$

$$\rho \frac{\partial e_i^V}{\partial t} + \rho(\mathbf{U}\nabla)e_i^V = \left[\delta_{1,i} k_\nu I \frac{\tau_u}{\tau_I} - \frac{\tau_u}{\tau_i^{VT}} (\varepsilon_i - \varepsilon_{ie}) + (-1)^i \times \right.$$

$$\left. \times \frac{L_{1,2} r_i \tau_u}{\gamma_{i0} g_i^{r_i} \tau_{VV'}} \right] \frac{\theta_i}{C_{i,0}^V} - \nabla \left\{ \rho e_i^V V_i - \frac{\tau_u}{\tau_i^V} \nabla T_i + \frac{NT}{C_{i,0}^V \gamma_{i0}} \sum_k \frac{\tau_u}{\tau_{ik}^V} \mathbf{d}_k \right\},$$

$$\mathbf{V}_i = -\frac{\tau_u}{\tau_{Ti}} \frac{\nabla \ln T}{N_i} - \frac{\tau_u}{\tau_{Di}^V} \frac{\nabla \ln T_i}{N_i} + \frac{\tau_u}{\tau_D} \sum_k \mathbf{d}_k \frac{N}{\gamma_i \rho} \frac{P_m^{2-k}(1+P_N)^2}{(P_m+P_N)P_N^{i-1}},$$

$$\mathbf{d}_k = \gamma_{k0} \nabla(\gamma_k) + \gamma_{k0} \left(\gamma_k - \frac{N_k}{\rho} \frac{P_m^{2-k}(1+P_N)^2}{(P_m+P_N)P_N^{i-1}} \right) \nabla \ln p + \frac{\varkappa \gamma_{k0} \tau_a^2}{p \tau_F^2} \times$$

$$\times \left(\frac{N_k P_m^{2-k}(1+P_N)}{\rho(P_m+P_N)} \sum_j \frac{P_N^{j-1}}{(1+P_N)} N_j \mathbf{X}_j - N_k \mathbf{X}_k \right),$$

$$C_{i,0}^V = \frac{\theta_i^2 \exp(\theta_i)}{[\exp(\theta_i)-1]^2}, \quad \theta_i = \frac{h\nu_i}{kT_0}, \quad \gamma_{i0} = \frac{P_N^{i-1}}{1+P_N},$$

$$\varkappa = 1 + \left(C_{RT}^0 \frac{\mu_0}{R} \right)^{-1}, \qquad \zeta = \frac{E_{j''} - E_{j'}}{kT_0},$$

$$\delta_I = \frac{k^0_\nu I_0 \tau_u}{\rho_0 C^0_{RT} T_0} = (\theta_1 + \zeta)\frac{\tau_u}{\tau}(\varkappa - 1)\gamma_{10},$$

$$I_{1,2} = \varepsilon_1^{r_1}(\varepsilon_2 + 1) - \varepsilon_2^{r_2}(\varepsilon_1 + 1)^{r_1} \exp[(r_2 h\nu_2 - r_1 h\nu_1)/kT],$$

$$e_i^V = C_V^i T_i, \qquad \gamma_i = N_i/N, \qquad E_{RT} = T\frac{\sum\limits_i C^i_{RT}}{\sum\limits_i C^{i0}_{RT}},$$

$$C^i_{RT} = (1.5 + C^i_R)\frac{R}{\mu}\gamma_i\gamma_{i0}, \qquad C^0_{RT} = C^i_R\frac{\mu}{\mu_0\gamma_i},$$

$$C^i_V = \frac{N_i \exp[\theta_i(1/T_i - 1)]}{T_i^2 \exp(\theta_i/T_i) - 1]^2}[\exp(\theta_i) - 1]^2,$$

$$k_\nu = \frac{1 - \exp(-\zeta)\varepsilon_1}{1 - \exp(-\zeta)\varepsilon_{10}}, \quad \varepsilon_i = g_i[\exp(\theta_i/T_i) - 1]^{-1}, \quad \varepsilon_{i0} = g_i[\exp(\theta_i) - 1]^{-1}.$$

Уравнения (1)–(5) записаны относительно безразмерных значений плотности $\tilde{\rho} = \rho/\rho_0$, температуры $\tilde{T} = T/T_0$, плотности молекул данного компонента $\tilde{N}_i = N_i/N_{i0}$, давления $\tilde{P} = P/N_0kT_0$, где N_0 — полное число частиц в единице объема, k — постоянная Больцмана, скорости $\tilde{\mathbf{U}} = \mathbf{U}\tau_u/R_a$, колебательной температуры i-го осциллятора $\tilde{T}_i = T_i/T_0$, кроме того, введены безразмерный коэффициент поглощения $\tilde{k}_\nu = k_\nu/k^0_\nu$, безразмерная интенсивность излучения $\tilde{I} = I/I_0$, внешняя сила $\tilde{\mathbf{X}}_i = \mathbf{X}_i/X_0$, действующая на одну частицу i-го сорта ($\mathbf{X}_i = \{m_i\mathbf{g}; \mathbf{f}^i_{NL}\}$, g — ускорение силы тяжести, $\mathbf{f}_{NL}$ — сила, действующая на частицу i-го сорта в электромагнитном поле, а m_i — ее масса). Здесь и далее тильды опущены, а индекс нуль отвечает параметрам при $t = 0$, $\tau_a = R_a/\sqrt{\varkappa(p_0/\rho_0)}$ — время распространения звуковых колебаний поперек пучка; $\tau_D = R_a^2/D_{ij}$, $\tau_{Ti} = R_a^2 m_i N_{i0}/D_i^T$, $\tau^V_{Di} = R_a^2 m_i N_{i0}/D_i^V$, $\tau^V_{ij} = R_a^2/D^V_{ij}$ — соответственно времена многокомпонентной диффузии, термодиффузии i-го компонента, диффузии колебательной энергии i-го осциллятора и колебательной диффузии между i-м и j-м осцилляторами; $\tau_\lambda = \rho R_a^2 C^0_{RT}/\lambda$ — время теплопроводности; $\tau_i^V = R_a^2 C^i_{V0}/\lambda_i^V$ — время колебательной теплопроводности для i-го осциллятора; $\tau_i^{VT} = \left(\sum\limits_j W^j_{i,0} N_{j0}\right)^{-1}$ — время $V - T$-релаксации для i-го осциллятора, $\tau_{VV'} = (W_{12}\gamma_{10}\gamma_{20}N_0)^{-1}$ — время $V - V'$-обмена; $\tau_I = N_{10}h\nu_I/k^0_\nu I_0$; $\tau_k = (R_a^2\rho_0)/\eta$ — время конвекции вследствие вязкости; $\tau_F = \sqrt{\rho_0 R_a/X_0 N_0}$ — время изменения состояния среды под действием внешних сил X_0 ($\tau_F = \tau_g$ при $X_0 = mg$ и $\tau_F = \tau_{NL}$ при $X_0 = f_{NL}$); δ_{ij} — символ Кронекера; μ — молекулярная масса смеси; D_i^T и D_{ij} — коэффициенты термо- и многокомпонентной диффузии для i-го компонента; D^V_{ij} — коэффициент диффузии колебательной энергии между i-м и j-м осцилляторами; D_i^V — коэффициент колебательной термодиффузии; λ_i^V — коэффициент колебательной проводимости для i-го осциллятора; λ — коэффициент теплопроводности; ζ и η — коэффициенты вязкости; $(\mathbf{U}'\sigma')$ — вектор с компонентами $\mathbf{U}_j\sigma'_{jk}$, а σ'_{jk} — тензор вязких напряжений; W^j_{i0} — константа скорости колебательно-поступательного $V-T$-обмена при столкновении молекул i-го сорта с j-м партнером $(j=1,2)$; $W_{1,2}$ — константа скорости междумодового колебательно-колебательного $V-V'$-обмена; r_i — количество колебательных квантов, теряемых i-м партнером при $V-V'$-обмене; g_i — кратность вырождения i-го типа колебаний.

Времена τ_D, τ_λ, τ^V_{Di}, τ^V_{ij}, τ^V_i, τ_{Ti} не являются независимыми, поскольку они связаны соотношениями [7,8]

$$\tau^V_{ij}=k_V^{-1}\tau_D,\quad \tau^V_i=\tau^V_{ij},\quad \tau_\lambda=\varkappa\tau_D,\quad \tau^V_{D1}=k_{V1}^{-1}\tau_{T1},$$

$$\tau_{Ti}=\frac{(P_m+P_N)}{(1+P_N)^2}\left(\frac{P_N}{P_m}\right)^{i-1}\frac{\tau_D}{k_{Ti}},\quad \tau^V_{D2}=-\tau_{D1}\frac{P_N\nabla\ln T_2}{P_m\nabla\ln T_1}.$$

Здесь $P_N=\gamma_{20}/\gamma_{10}$, $P_m=m_1/m_2$, k_{Ti} — термодиффузионные отношения $(k_{T1}=-k_{T2}$, их величина зависит от P_m, P_N и параметров потенциала межмолекулярного взаимодействия [9]. Величина $k_{Vi}(k_V)$ может изменяться в зависимости от сорта молекул от 0.4 до 1 [8]. При расчетах полагалось, что характер взаимодействия молекул при столкновениях определяется потенциалом Леннарда–Джонса [9] с типичными для двухатомных молекул параметрами $\sigma=2.8$ Å, $\varepsilon=3\cdot10^{18}$ эрг, а $k_{V1}=1$, что характерно для дипольных молекул. Для практически важных случаев τ_k, $\tau_g\gg\tau_D$, τ^V_i, τ_{Ti}, τ_I, τ^V_{Di}, $\tau_{VV'}$, τ^{VT}_i, τ_a. Для дальнейшего анализа необходимо конкретизировать $\mathbf{f}^i_{NL}$, которая действует на молекулы i-го компонента. Она складывается из так называемой градиентной силы $\mathbf{F}^i_{GR}$, направленной поперек пучка, силы Абрагама $\mathbf{F}^i_A$ и силы светового давления $\mathbf{F}^i_P$, направленными вдоль направления распространения [6]. Будем рассматривать случаи, когда $\mathbf{F}^i_P$ и $\mathbf{F}^i_A$ можно пренебрегать [6]. При этом для $\mathbf{f}^i_{NL}$ имеем [10]

$$\mathbf{f}^i_{NL}=\alpha_i\frac{2\pi}{cn}\nabla I.$$

Здесь $\nabla=\partial/\partial r$, c — скорость света. Обычно для рассматриваемого случая $\alpha_{i0}\gg\alpha^V_i$, α_{mn} и $n\approx1$, поэтому в (6) можно положить $\alpha_i=\alpha_{i0}$. При определении τ_{NL} будем далее полагать

$$X_0=2\pi\alpha_{10}\frac{I_0N_{10}}{cR_a}.$$

Будем рассматривать пучки с гауссовым распределением интенсивности по радиусу $I(r,t)=I_0(t)\exp(-r^2/R_a^2)$ с $R_a\ll k_\nu^{-1}$, а $I_0(t)=I_0$ при $0<t\leqslant\tau_u$ и $I_0(t)=0$ при $t>\tau_u$. При этом влиянием изменения параметров в продольном направлении на их распределение в поперечном сечении пучка можно пренебрегать. Пусть также величина поглощенной газом энергии существенно меньше энергии вращательных и поступательных степеней свободы молекул смеси, т.е. $\delta_I\ll1$. В этом случае ρ, N_i, T, $\mathbf{U}$, $\mathbf{V}_i$, $\mathbf{d}_i$ можно представить в виде

$$z=1+\delta_Iz',\quad z=\rho,N_i,T,\quad \mathbf{U}=\delta_I\mathbf{U}',\quad \mathbf{V}_i=\delta_I\mathbf{V}'_i,\quad \mathbf{d}_i=\delta_I\mathbf{d}'_i. \tag{7}$$

Подставляя (6) и (7) в (1)–(5) и пренебрегая членами с порядком малости выше δ_I, после исключения из (1), (2) $\mathbf{U}'$ получим следующую систему уравнений для возмущений N_i', ρ', T' и T_i:

$$\frac{\partial N_i'}{\partial t} = \frac{\tau_u}{\tau_D}\Delta\left(N_i' - \rho' - \frac{P_N^{j-1}P_m(1-P_m^{i-j})(1+P_N)}{(P_m+P_N)^2}P'\right) + \frac{\tau_u}{\tau_{Ti}}\Delta T' +$$

$$+\left(\frac{\nabla T_i}{T_i}\nabla\right)N_i'\frac{\tau_u}{\tau_{Di}^V} + \frac{\tau_u}{\delta_i\tau_{Di}^V}\left[\frac{\Delta T_i}{T_i} - \left(\frac{\nabla T_i}{T_i}\right)^2\right] + \frac{\partial\rho'}{\partial t} -$$

$$-\frac{\tau_u\tau_a^2\varkappa}{\delta_I\tau_F^2\tau_D}\Delta I\frac{(-P_m)^{i-1}P_N^{2-i}}{(P_m+P_N)^2}(1+P_N)^2(1-P_mP_\alpha), \tag{8}$$

$$\frac{\partial^2\rho'}{\partial t^2} = \frac{1}{\varkappa}\left(\frac{\tau_u}{\tau_a}\right)^2\Delta(\rho'+T') - \frac{\tau_u^2}{\tau_F^2\delta_I}\Delta I(1+P_NP_\alpha), \tag{9}$$

$$\frac{\partial T'}{\partial t} = \frac{\zeta[1-\exp(-\zeta)\varepsilon_1]}{(\theta_1+\zeta)[1-\exp(-\zeta)\varepsilon_{10}]}I - (\varkappa-1)(\nabla V_1' - \nabla V_2')k_{T1} + \frac{\tau_u}{\varkappa\tau_D}\Delta T' +$$

$$+\frac{\tau_u}{\delta_I}(\varkappa-1)\left\{\sum_i\theta_i\frac{P_N^{i-1}(\varepsilon_i-\varepsilon_{ie})}{(1+P_N)\tau_i^{VT}} + \frac{L_{12}}{\tau_{VV'}}[(1+P_N)\theta_1-\theta_2]\right\} +$$

$$+(\varkappa-1)\frac{\partial\rho'}{\partial t} + \sum_i\left(\frac{\nabla T_i}{T_i}\nabla\right)T_i\frac{\tau_uP_N^{i-1}}{\tau_{Di}^V(1+P_N)} + \frac{(\nabla L)^2}{\delta_I}\frac{\tau_u}{\tau_D}\left(\frac{\tau_a}{\tau_F}\right)^4\times$$

$$\times\varkappa^2(\varkappa-1)\frac{P_N(1+P_N)^2}{(P_m+P_N)^2}(1-P_mP_\alpha)^2, \tag{10}$$

$$C_{Vi}'\frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{\tau_u}{\tau_i^V}\Delta T_i + C_{Vi}'\left(\frac{\nabla T_i}{T_i}\nabla\right)T_i\frac{\tau_u}{\tau_{Di}^V} + \frac{\theta_ikN_{i0}}{C_{i,0}^V}\left\{\frac{\tau_u}{\tau_I}\frac{[1-\exp(-\zeta)\varepsilon_1]}{[1-\exp(-\zeta)\varepsilon_{10}]}I\delta_{i,1} -\right.$$

$$\left.-\frac{\tau_u}{\tau_1^{VT}}(\varepsilon_i-\varepsilon_{ie}) + (-1)^i\frac{I_{12}\tau_u}{\tau_{VV'}\gamma_{i0}}\right\} - \delta_I\nabla\mathbf{d}_j'\frac{\tau_ukN_{i0}}{\tau_D^VC_{i,0}^V},$$

$$\mathbf{V}_i' = \frac{\tau_u}{\tau_D}\frac{\mathbf{d}_j'(1+P_N)^2P_m}{(P_N+P_m)P_N^{i-1}} - \frac{\tau_u}{\tau_{Ti}}\nabla T' - \frac{\tau_u}{\delta_I\tau_{Di}^V}\frac{\nabla T_i}{T_i}, \quad P_\alpha = \frac{\alpha_{20}}{\alpha_{10}},$$

$$\mathbf{d}_j' = \frac{(P_N+P_m)}{(1+P_N)^2}(-1)^j\nabla(\rho'-N_1') + \frac{P_N^{j-1}}{1+P_N}\left[1 - \frac{P_m^{2-j}(1+P_N)}{(P_N+P_m)}\right]\nabla p' +$$

$$+\left(\frac{\tau_\alpha}{\tau_F}\right)^2\varkappa\frac{P_N}{P_m+P_N}(-1)^j(1-P_mP_\alpha)\nabla I. \tag{11}$$

Для рассматриваемой задачи справедливы следующие начальные и граничные условия:

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

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} = \left[\frac{\partial N_1'}{\partial t} P_m + \frac{\partial N_2'}{\partial t} P_N\right] (P_m + P_N)^{-1},$$

$$r = 0: \quad \frac{\partial \rho'}{\partial r} = \frac{\partial N_i'}{\partial r} = \frac{\partial T'}{\partial r} = \frac{\partial T_i}{\partial r} = 0,$$

$$r = \infty: \quad \rho' = N_i' = T' = 0, \quad T_1 = 1.$$

Ограничимся рассмотрением случаев, когда τ_2^{VT}, $\tau_{VV'} \gg \max(\tau_1^{VT}, \tau_D, \tau_I, \tau_a, \tau_{Ti}, \tau_i^V, \tau_{Di}^V)$ (такое соотношение времен характерно для многих смесей из двухатомных дипольных и гомоядерных молекул) и $R_a < \tau_u c_0$, где c_0 — скорость распространения звука. При этом для большинства практически интересных случаев основной вклад в изменение показателя преломления будет давать δN_i [6]. Из (8)–(11) следует, что характер изменения N_i и других газодинамических параметров $(\rho, T, \dot{T}_i)$ определяется в рассматриваемом случае следующими безразмерными величинами: θ_1, ζ, P_m, P_N, $\varkappa$, $P_I = \tau_u/\tau_I$, $P_D = \tau_u/\tau_D$, $P_V = \tau_u/\tau_1^{VT}$, $P_\alpha = \alpha_{20}/\alpha_{10}$, $P_F = \tau_u/\tau_{NL}$, $\varepsilon_{10} = 4\pi N_{10}\alpha_{10}$.

Для выделения безразмерных параметров, определяющих изменение показателя преломления, представим (4) в виде

$$\delta n = \frac{\varepsilon_{10}}{2} \left[\delta N_1 + P_\alpha P_N \delta N_2 + \frac{\delta(\alpha_{mn} + \alpha_1^V)}{\alpha_{10}}\right]. \tag{12}$$

При $R_a < \tau_u c_0$ изменение α_1^V и α_{mn} может давать заметный вклад в δn только при очень малых t $(t \leqslant 0.1\tau_1^{VT})$. Поэтому при дальнейшем анализе членом $(\delta\alpha_{mn} + \delta\alpha_1^V)$ будем пренебрегать. Из (12) видно, что в этом случае для определения δn достаточно задать только указанные выше параметры.

Моделирование влияния диффузии и теплопроводности на характер изменения δn при возбуждении молекулярных колебаний проводилось на основе численного интегрирования системы (8)–(11) и выражения (12) с учетом принятых допущений. Использовались неявные разностные схемы второго порядка точности по пространству и первого по времени [11]. Полагалось, что условия на бесконечности выполняются при некотором конечном $r = R_b$, величина которого зависит от P_a и определяется из условия исключения влияния отражения возмущений от фиктивной внешней границы на параметры в центре пучка.

Рассмотрим сначала влияние изменения параметров P_F и P_α на характер поведения зависимостей $N_i'(t)$, $i = 1, 2$ на оси пучка при наличии процессов диффузии и теплопроводности, связанных с возбуждением молекулярных колебаний$(k_{V1} = 1)$ и при их отсутствии $(k_{V1} = 0)$ (влияние θ_1, ζ, P_m, P_N, $\varkappa$, P_I, P_D, P_V анализировалось ранее для случая $P_F = 0$ в [7]). На рис. 1 зависимости $N_1'(t')$ и $N_2'(t')$ представлены для случаев $P_F = 0$ (*а*) и $P_F = 1$ (*б*) при $\varepsilon_{10} = 2.5 \cdot 10^{-7}$, $\theta_1 = 7$, $\zeta = -1$, $P_m = 0.5$, $P_N = 4$, $P_V = P_D = P_I = 1$, $P_a = 10$, $\varkappa = 1.4$ и $P_\alpha = 0.5, 2$. Здесь и далее сплошные линии соответствуют $k_{V1} = 1$, а штриховые — $k_{V1} = 0$, $t' = t/\tau_D$, $\delta_I = 0.46$. Отметим, что принятое при расчетах значение ε_{10} соответствует, например, $\alpha_{10} = 10^{22}$ см^3 и $N_{10} = 2 \cdot 10^{16}$ см$^{-3}$ (такое значение

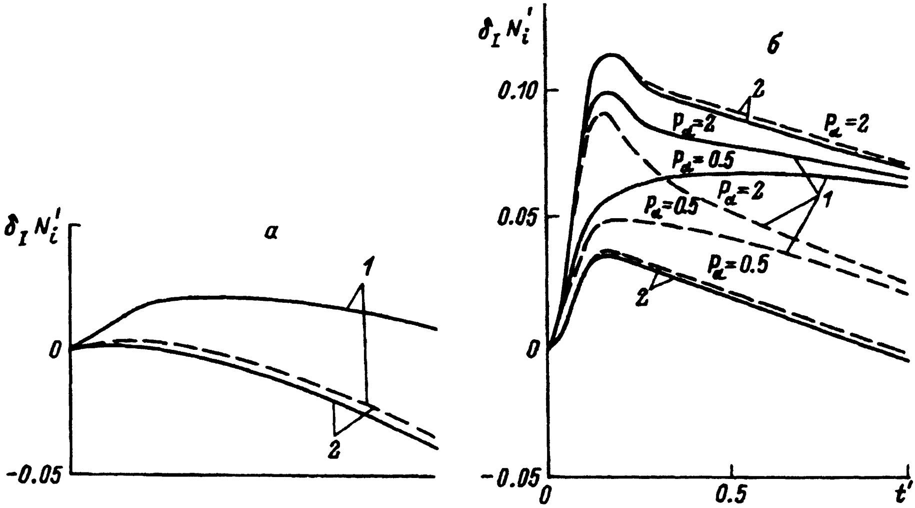

Рис. 1.

α_{10} является достаточно типичным для дипольных молекул, а N_{10} соответствует $p_0 = 0.4$ кПа, $T_0 = 300$ К). Из представленных распределений видно, что процессы диффузии, связанные с возбуждением молекулярных колебаний, оказывают существенное влияние на характер изменения N_i' ($i = 1, 2$) во времени (определяющее влияние оказывает колебательная термодиффузия) как при $P_F = 0$, так и при $P_F = 1$. В случае, когда влиянием f_{NL}^i можно пренебречь ($P_F = 0$), именно эти процессы приводят к различию в изменении $N_1'(t)$ и $N_2'(t)$ (на оси пучка происходит увеличение концентрации более легкого компонента A и уменьшение более тяжелого B). При $P_m = 0.5$ и $P_N = 4$ диффузионный поток для первого компонента A направлен от периферии к центру пучка ($D_1^V < 0$), что и приводит к росту N_1' на оси. При $\zeta < 0$ (в рассматриваемом случае $\zeta = -1$) на определенном временном интервале $0 < t < \tau_1^{VT}$ имеет место кинетическое охлаждение среды [12]. Поскольку $P_a = 10 P_V$, то за время существования эффекта кинетического охлаждения на оси пучка успевает сформироваться область с $\rho' > 0$, что и приводит вначале к некоторому увеличению N_2'. Для второго компонента B диффузионный поток направлен от оси к периферии ($D_2^V > 0$), поэтому величина N_2' на оси очень быстро начинает уменьшаться. При $t > 0.5\tau_D$ изменение N_i' определяется уже изменением плотности, которая вследствие релаксационного нагрева среды начинает на оси пучка уменьшаться. При $D_1^V = D_2^V = 0$ $N_1'(t) \simeq N_2'(t)$.

При $P_F = 1$ (влиянием f_{NL}^i на изменение N_i' пренебрегать нельзя) характер поведения $N_i'(t)$ как при $k_{V1} = 1$, так и при $k_{V1} = 0$ зависит также и от величины P_α (при принятых значениях P_I, P_a, P_N, θ_1, ζ и ε_{10} $P_F = 1$ реализуется при $I_0 = 100$ ГВт/см^2, при увеличении P_a до 100 и ε_{10} до $2.5 \cdot 10^{-6}$ $P_F = 1$ уже при $I_0 = 100$ МВт/см^2). Интересным здесь является тот факт, что даже при $k_{V1} = 0$ появляется различие в поведении $N_1'(t)$ и $N_2'(t)$. В результате это различие обусловлено разной величиной f_{NL}^i

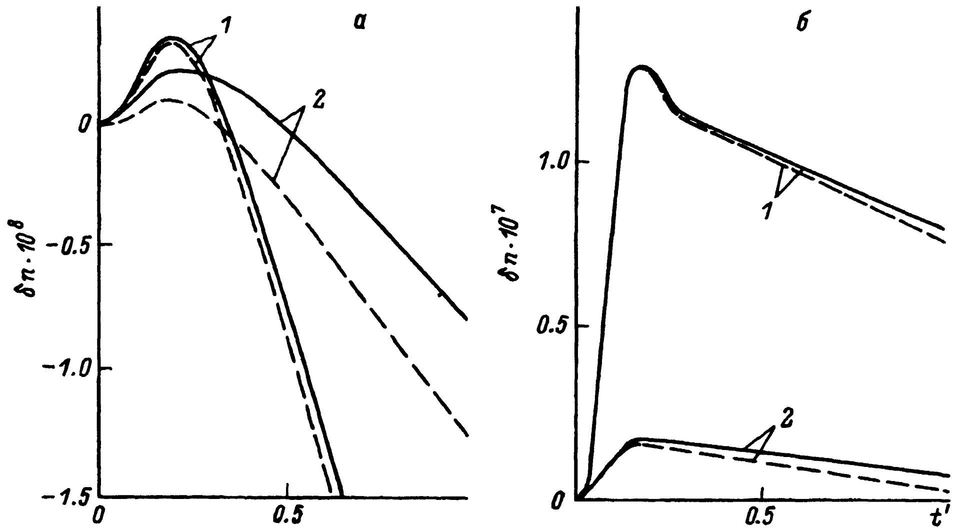

Рис. 2.

для $i = 1$ и 2, действующей соответственно на молекулы газа A и B и направленной к центру гауссова пучка. При $P_\alpha > 1$ сильнее на оси пучка увеличивается концентрация компонента B, а при $P_\alpha < 1$ — компонента A. Колебательная термодиффузия ($k_{V1} = 1$) приводит в этом случае к еще большему отличию $N_1'(t)$ и $N_2'(t)$, причем в основном ее влияние, как и при $P_F = 0$, сказывается на изменении N_1'. Наличие более ярко выраженного по сравнению со случаем $P_F = 0$ максимума для зависимостей $N_i(t)$ объясняется в данном случае также действием сил f_{NL}^i, которые приводят к движению молекул обоих компонентов к центру пучка и которые при $t \leqslant 0.2\tau_D$ доминируют над уменьшением плотности среды при нагреве вследствие термализации поглощенной молекулами компонента A энергии воздействующего излучения.

Изменение показателя преломления, как следует из (12), даже при $P_F = 0$ будет зависеть от величины P_α. При $P_F = 1$ эта зависимость будет проявляться также и через изменение N_i'. Это иллюстрирует рис. 2, на котором при тех же, что и ранее, безразмерных параметрах представлены зависимости $\delta n(t')$ на оси пучка при $P_F = 0$ (*а*) и $P_F = 1$ (*б*). Здесь кривые *1, 2* отвечают $P_\alpha = 2$ и 0.5, а штриховые и сплошные линии — случаям $k_{V1} = 0$ и 1. Видно, что при $t \leqslant 0.1\tau_D$ влияние процессов макропереноса, обусловленных возбуждением молекулярных колебаний, на величину δn незначительно. Однако с увеличением t это влияние растет и при $t = \tau_D$ может быть весьма существенным. Интересным здесь является то, что при $P_F = 0$ и 1 характер зависимости величины δn от P_α различен. Так, если при $P_F = 0$ $\delta n > 0$ только при $t < 0.3\tau_D$ для $P_\alpha = 2$ и при $t < 0.5\tau_D$ для $P_\alpha = 0.5$, то при $P_F = 1$ $\delta n > 0$ даже при $t > \tau_D$ как для $P_\alpha = 2$, так и для $P_\alpha = 0.5$. Это различие связано как раз с тем, что при $P_F = 1$ от P_α начинает зависеть характер изменения $N_i'(t)$ (рис. 1,*б*).

Величина P_α также существенным образом влияет и на вид зависимости $\delta n(r')$. Это иллюстрирует рис. 3, на котором эти зависимости представлены в момент времени $t = \tau_D$ для случая $P_F = 0$ с $P_\alpha = 0.5$, 1, 2 (кривые *1–3* соответственно) и прежних значениях остальных пара-

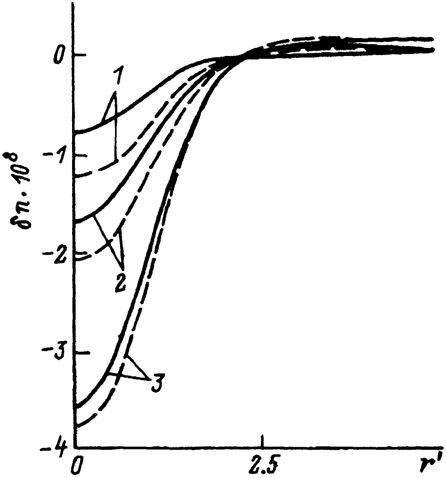

Рис. 3.

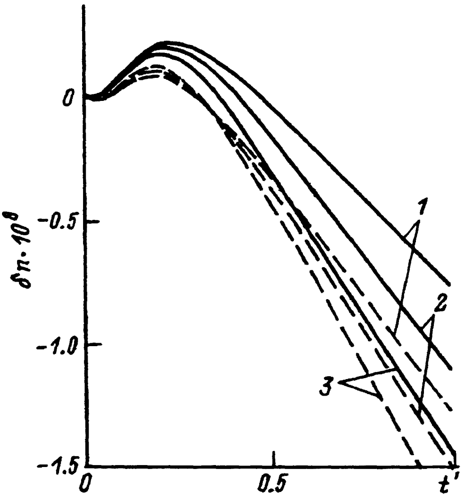

Рис. 5.

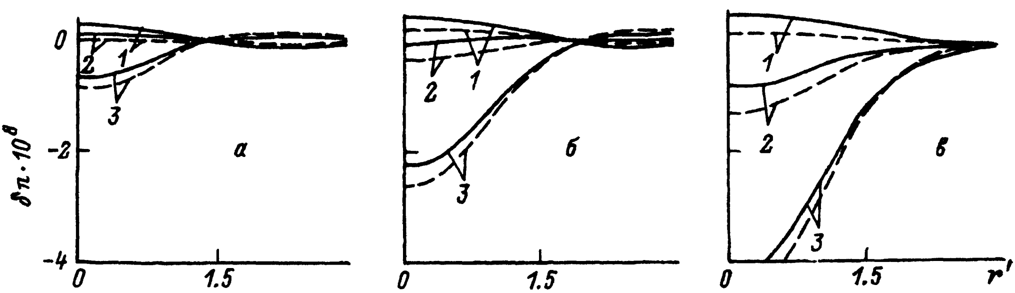

Рис. 4.

метров. Видно, что чем меньше P_α, тем сильнее проявляется влияние колебательной термодиффузии на характер распределения δn по радиусу пучка. При $P_F = 1$ это влияние также весьма существенно, хотя в этом случае как при $k_{V1} = 1$, так и при $k_{V1} = 0$ в центральной части пучка $\delta n > 0$.

Другим важным фактором, определяющим характер изменения показателя преломления, является скорость термализации поглощенной молекулами энергии излучения. В рассматриваемой задаче она связана с величиной P_V (с увеличением P_V скорость тепловыделения из колебательных в поступательные степени свободы возрастает). Влияние параметра P_V на изменение δn иллюстрирует рис. 4, котором в моменты времени $t = 0.25\tau_D$, $0.5\tau_D$, τ_D (*а–в* соответственно) представлены распределения $\delta n(r')$ при $P_V = 0.1$, 1, 10 (кривые *1–3*) для случая $P_F = 0$, $P_\alpha = 0.5$ и прежних значениях остальных параметров. Здесь, как и ранее, сплошные линии соответствуют $k_{V1} = 1$, а штриховые $k_{V1} = 0$. Видно, что с увеличением P_V влияние процессов колебательной термодиффузии на характер изменения δn уменьшается. Связано это с тем, что при больших скоростях тепловыделения определяющее влияние на изменение N_i', а следовательно, и δn оказывает изменение плотности, которое при

$P_F = 0$ не зависит от процессов макропереноса. В то же время при малых P_V влияние колебательной термодиффузии весьма существенно и может привести даже к изменению знака δn.

Как следует из (12), на величину δn также значительное влияние должен оказывать параметр P_N. На рис. 5 показано изменение δn во времени на оси пучка при значениях $P_N = 4, 1, 0.25$ (кривые *1–3*) и тех же, что и в предыдущем случае, значениях других параметров. Из представленных распределений видно, что с увеличением содержания поглощающего компонента в смеси (это соответствует уменьшению P_N) влияние процессов колебательной термодиффузии на характер изменения δn уменьшается. Это обусловлено тем, что при малых P_N и соответственно больших γ_{10} выделение энергии из колебательных в поступательные степени свободы приводит к значительному нагреву газа и уменьшению N_1' на оси пучка, которое при рассматриваемых параметрах доминирует над увеличением N_1' вследствие колебательной термодиффузии. При больших P_N тепловыделение не столь велико и доминирующим оказывается процесс увеличения N_1' на оси пучка вследствие диффузионного потока, направленного от периферии к центру.

Полученные результаты указывают на необходимость учета в ряде практически важных случаев влияния процессов диффузии и теплопроводности в газе с возбужденными колебательными степенями свободы на изменение показателя преломления при воздействии резонансного излучения. С уменьшением степени возбуждения влияние этих процессов на величину δn также уменьшается.

Список литературы

[1] *Ахманов С.А., Сухоруков А.П., Хохлов Р.В.* // УФН. 1967. Т. 93.№ 1. С. 69–70.
[2] *Стробен Д.* Распространение лазерного пучка в атмосфере. М.: Мир, 1981.
[3] *Осипов А.И., Филиппов А.А.* // Хим. физика. 1984. Т. 3. № 8. С. 1069–1074.
[4] *Буланин М.О., Бурцев А.П., Коротков С.А.* // Опт. и спектр. 1987. Т. 63. Вып. 3. С. 467–469.
[5] *Левин В.А., Сорокин А.А., Старик А.М.* // ДАН СССР. 1989. Т. 304. № 5. С. 1073–1076.
[6] *Журавлев В.В., Сорокин А.А., Старик А.М.* // Квантовая электрон. 1990. Т. 17. № 4. С. 501–506.
[7] *Грабовский В.И., Старик А.М.* // ДРАН. 1992. Т. 322. № 4. С. 674–680.
[8] *Athye W.F.* // J. Chem. Phys. 1972. Vol. 57. N. 12 (II). P. 542–555.
[9] *Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Ил, 1961.
[10] *Шен И.Р.* Принципы нелинейной оптики. М.: Наука, 1989.
[11] *Самарский А.А.*Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.
[12] *Старик А.М.* // ЖТФ. 1984. Т. 54. Вып. 8. С. 1631–1634.

Центральный институт авиационного моторостроения им.П.И.Баранова
Москва

Поступило в Редакцию
15 января 1991 г.