

21. Зуев А. П., Ткаченко Б. К. Определение времени релаксации уровня ($v = 1$) N_2 при наличии паров воды.— Изв. высш. учебн. заведений. Сер. Физика, 1978, № 6.
22. Anderson J. D. The effect of kinetic rate uncertainties on gasdynamic laser performance. AIAA Paper, 1974, N 74—126.
23. Taylor R. L., Bitterman S. Survey of vibrational relaxation data for processes important in the CO_2-N_2 laser system.— Rev. Modern Physics., 1969, vol. 41, N 1.
24. Meinzer R. A. Experimental gasdynamic laser studies.— AIAA J., 1972, vol. 10, N 4. Рус. пер. Майцер Р. А. Экспериментальное исследование газодинамического лазера.— Ракетн. техника и космонавтика, 1972, т. 10, № 4.

УДК 539.196.5

ВЛИЯНИЕ ТОКА КВАНТОВ НА РЕЛАКСАЦИЮ СПАРЕННЫХ МОД МОЛЕКУЛ CO_2

B. N. Файзулаев

(Москва)

В [1] выяснены основные особенности квазистационарного распределения молекул CO_2 по уровням спаренных мод, связанные с резонансом Ферми. Рассмотрение велось в рамках триноровской модели колебательной кинетики в приближении нулевого тока квантов через мультиплеты. Дальнейший анализ, проведенный в [2] для двухмодовой системы ангармонических осцилляторов, показал, что это приближение допустимо лишь при слабом перевозбуждении колебаний. В [3] найдено решение задачи о релаксации ангармонических осцилляторов с учетом тока квантов, возбуждающего $V-V$ -обмен в неравновесных условиях.

Цель данной работы — провести более детальное исследование колебательной кинетики спаренных мод CO_2 , используя метод [3]. Рассматриваемый пример интересен не только спецификой проявления ангармонизма в колебательных системах с резонансом Ферми, но и с практической точки зрения в связи с возможностью создания газодинамических лазеров (ГДЛ) на переходах между уровнями спаренных мод CO_2 [4—6].

1. Напомним, что спаренными принято называть симметричное продольное v_1 и дважды вырожденное изгибное v_2 типы колебаний молекулы CO_2 . В гармоническом приближении вследствие кратности частот $\omega_1 = 2\omega_2$ они образуют единую симметричную моду, уровни энергии которой $E_v = v\omega$ вырождены с весом $g_v = (v + a)(v + b)/4$, где $\omega = \omega_2$, $v = 2v_1 + v_2$ (нижним индексом отмечен тип колебания), $a = b = 2$, если v четное; $a = 1$, $b = 3$, если v нечетное. Ангармонизм колебаний приводит к расщеплению случайно вырожденных уровней $(v_1v_2^l0)$ с одинаковым колебательным моментом l (резонанс Ферми). В результате возникает мультиплетная структура уровней спаренных мод CO_2 . Энергия расщепления мультиплетов ΔE_v зависит от колебательного числа v и в наиболее интересной для рассмотрения нижней части спектра $v = 2—5$ составляет 1—3 W , где $W = 51 \text{ см}^{-1}$ — постоянная ферми-взаимодействия. Из-за небольшой по сравнению с $\omega = 667 \text{ см}^{-1}$ величины ΔE_v (это не единственная причина) характерные скорости нерезонансного $V-V$ -обмена и (внутренних) $V-T$ -переходов в мультиплетах оказываются значительно выше соответствующей (внешним) $V-T$ -переходам между соседними мультиплетами. Наличие такой шкалы скоростей $V-T$ - и $V-V$ -процессов дает возможность использовать для группы нижних мультиплетов триноровскую модель заселения уровней [7, 8]. В квазиравновесном приближении ей отвечает следующий вид функции распределения молекул CO_2 по уровням спаренных мод [1]:

$$(1.1) \quad N_{v\beta} = g_\beta \exp[-v\omega/T_1 - (E_{v\beta} - \omega v)/T],$$

где $N_{v\beta}$ — относительная населенность; $E_{v\beta}$ — энергия; g_β — статистический вес уровня ($v\beta = (v_1v_2^l0)$ или иначе β -компоненты мультиплета с колебательным числом $v = 2v_1 + v_2$; причем $g_\beta = 1$, если $l = 0$, и $g_\beta = 2$, если $l \neq 0$); T_1 — колебательная температура.

Это распределение является аналогом триноровского для одномодовых ангармонических осцилляторов, однако по виду существенно отличается.

чается от последнего немонотонным характером распределения молекул по уровням спаренных мод CO_2 , обусловленным разным по знаку и величине смещением компонентов относительно центров своих мультиплетов. По той же причине здесь нет и единого как для ангармонических осцилляторов разграничения спектра на докритическую и сверхкритическую области, соответствующие нисходящей и восходящей ветвям триоровского распределения. Такое разграничение можно ввести лишь по отношению к распределению молекул по мультиплетам в целом, определяя критическое значение v_* как колебательное число, при котором достигается минимум для приведенной (на ед. стат. веса) населенности мультиплетов $\bar{N}_v = \sum_{\beta \in v} N_{v\beta}/g_\beta$. На фиг. 1 ($T_1 = 1200$ К, $T = 75$ К) точками и ломаной кривой показан вид квазиравновесного распределения приведенных населенностей отдельных уровней $\bar{N}_{v\beta} = N_{v\beta}/g_\beta$, а гладкой сплошной кривой — мультиплетов \bar{N}_v симметричной моды. Существенно, что распределение для \bar{N}_v при ферми-резонансном расщеплении мультиплетов имеет восходящую ветвь и соответствует триоровскому [7]

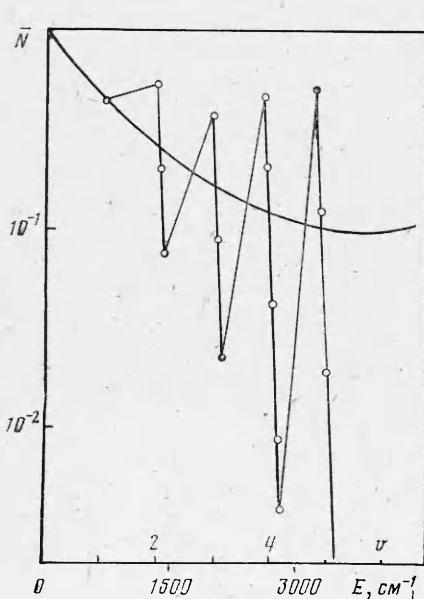
$$N_v^T = \exp [-v\omega/T_1 - (\bar{E}_v - \omega v)/T]$$

для симметричной моды с $\bar{E}_v = \bar{E}_v = \omega v - \bar{\chi}_v \omega v^2$ и «постоянной ангармонизма»

$$\bar{\chi}_v = \frac{T}{\omega v^2} \ln \sum_{\beta \in v} \frac{g_\beta}{g_v} \exp \left(-\frac{E_{v\beta} - \omega v}{T} \right),$$

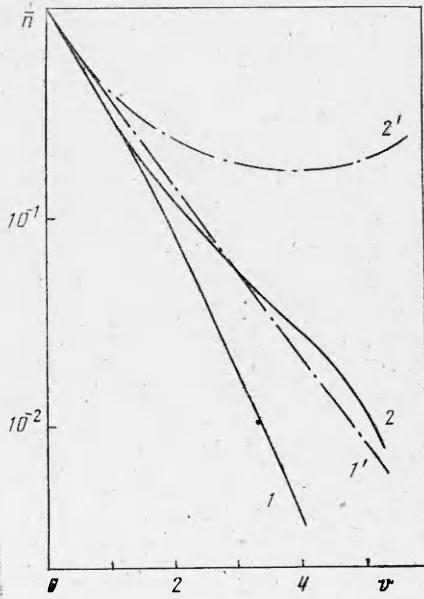
зависящей от газовой температуры. Причем величина $\bar{\chi}_v$ оказывается почти одинаковой для всех мультиплетов в нижней части спектра (кроме первого $\bar{\chi}_1 = 0$) и составляет, например, $\bar{\chi} = 0,0041$ при $T = 100$ К и $0,0066$ при $T = 50$ К. Качественно такое соответствие можно объяснить тем, что при колебательном квазиравновесии большая часть молекул находится в нижних состояниях мультиплетов. Поскольку расщепление мультиплетов растет с увеличением v , то естественно, что резонанс Ферми влияет на \bar{N}_v подобно тому, как ангармонизм на колебательное распределение в одномодовом осцилляторе.

2. Существование восходящей ветви у \bar{N}_v указывает на возможность тока квантов на верхние уровни. В неравновесной системе ангармониче-



Фиг. 1

10



Фиг. 2

ских осцилляторов он возникает вследствие преимущественного перехода квантов с нижних уровней на высокие при $V-V$ -обмене и их гибели в верхней части спектра, где доминируют $V-T$ -процессы. В [3] показано, что $V-V$ -ток приводит к неустойчивости восходящей ветви тригоровского распределения. Учет его влияния в случае спаренных мод CO_2 требует кинетического описания тригоровской модели, которое в принципе должно основываться на уравнениях баланса населенностей $n_{v\beta}$ для каждого уровня ($v\beta$) и поэтому включать, помимо $V-V$ -процессов, также $V-T$ -переходы внутри мультиплетов. Однако задача упрощается, если иметь в виду, что внутренние $V-T$ -процессы не меняют величины потока квантов через мультиплеты и относятся к группе быстрых процессов. Тогда

$$n_{v\beta} = g_\beta x_v \exp[-(E_{v\beta} - \omega v)/T]$$

и кинетическое описание сводится к уравнениям баланса лишь для населенностей мультиплетов n_v :

$$(2.1) \quad dn_v/dt = I_v - I_{v+1}, \quad I_v = x_{v-1}R_{v-1,v} - x_v R_{v,v-1},$$

где

$$(2.2) \quad R_{vv'} = \frac{Z}{F} \sum_{u\lambda, u'\lambda', \mu, \mu'} g_{\lambda'} g_{\mu'} n_{u\lambda} \left(\frac{n_{v\mu}}{x_v} \right) Q_{v\mu, v'\mu'}^{u\lambda, u'\lambda'}, \quad F = \sum_{u\lambda} n_{u\lambda};$$

$Q_{v\mu, v'\mu'}^{u\lambda, u'\lambda'}$ — вероятность $V-V$ -обмена, сопровождающегося переходом одной молекулы из состояния $u\lambda$ в $u'\lambda'$, а другой — из $v\mu$ в $v'\mu'$, причем $u' - u = v - v' = \pm 1$; Z — частота столкновений. При записи (2.1) — (2.2) в соответствии с тригоровской моделью кинетики не учитывались $V-T$ -переходы между соседними мультиплетами. Считается, что они, как и другие процессы, вызывающие диссипацию квантов в спаренных модах, существенны лишь на высоких уровнях в области $v \geq v_0 + 1$. Тогда (2.1) можно рассматривать как уравнение непрерывности для потока квантов через мультиплеты $v = 1 - v_0$, причем величина I_v есть полная сила тока, n_v — концентрация квантов на переходе $v - 1 \rightarrow v$. Решение уравнений такого типа в приближении стационарного стока

$$(2.3) \quad I_v = I \neq 0 \quad (v = 1, 2, \dots, v_0)$$

хорошо известно, например, из теории нуклеации [9, 10]. Оно легко находится методом прогонки из рекуррентного соотношения для x_v , вытекающего из (2.1), (2.3), и имеет вид

$$(2.4) \quad \frac{x_v}{X_v} = 1 - \frac{I}{J_{v-1}},$$

$$X_v = \prod_{m=1}^v \frac{R_{m-1,m}}{R_{m,m-1}}, \quad J_v^{-1} = \sum_{m=0}^v (X_m R_{m,m+1})^{-1}, \quad I = J_{v_0}.$$

При выводе (2.4) учитывалось, что кванты, достигшие граничного $v_0 + 1$ мультиплета, быстро удаляются из системы и, следовательно, $x_{v_0+1} = 0$ (граничное условие).

3. Решение (2.4) определяет стационарное токовое распределение молекул по центрам мультиплетов в области $v = 1 - v_0$. При $I = 0$ это распределение переходит в Больцмановское $x_v = X_v \equiv \exp(-v\omega/T_1)$ с колебательной температурой, в общем случае отличной от газовой. Именно в этом (квазиравновесном) приближении и рассмотрена кинетика релаксации спаренных мод в [1]. Отметим, что такой подход оправдан лишь в случае слабой неравновесности [2].

На фиг. 2 представлены результаты расчета влияния $V-V$ -тока на распределение молекул CO_2 по уровням спаренных мод в условиях сильной неравновесности при $T_1 = 1000$ К, $T = 50$ К ($v_{\pm} = 4$). Кривые 1, 2 соответствуют токовому распределению величин x_v , n_v , а 1', 2' — квазиравновесному X_v , N_v . Расчет проводился по формуле (2.4) при $v_0 = 6$

v	Состояние $(v\beta) = \sum C_\beta v\beta\rangle$	$\frac{E_{v\beta} - \omega v}{W}$
1	$01^10 = 01^10\rangle$	0
2	$02^00, 100 = 0,707 100\rangle + 0,707 02^00\rangle$ $02^20 = 02^20\rangle$	∓ 1 0
3	$03^10, 11^10 = 0,707 11^10\rangle + 0,707 03^10\rangle$ $03^30 = 03^30\rangle$	$\mp 1,41$ 0
4	$04^00, 200 = 0,408 200\rangle + 0,707 12^00\rangle + 0,577 04^00\rangle$ $04^20, 12^20 = 0,707 12^20\rangle + 0,707 04^20\rangle$ $12^00 = 0,816 200\rangle - 0,577 0,4^00\rangle$ $04^40 = 04^40\rangle$	$+2,45$ $+1,73$ 0 0
5	$05^10, 21^10 = 0,447 21^10\rangle \mp 0,707 13^10\rangle + 0,547 05^10\rangle$ $05^30, 13^30 = 0,707 0,5^30\rangle + 0,707 13^30\rangle$ $13^10 = -0,774 21^10\rangle + 0,632 05^10\rangle$ $05^50 = 05^50\rangle$	$+3,16$ +2 0 0
6	$06^00, 300 = 0,243 300\rangle + 0,529 22^00\rangle + 0,674 14^00\rangle \mp 0,47 06^00\rangle$ $06^20, 14^20 = 0,463 22^20\rangle + 0,707 14^20\rangle + 0,535 06^20\rangle$ $06^40, 14^40 = 0,707 06^40\rangle + 0,707 14^40\rangle$ $14^00, 22^00 = 0,682 300\rangle + 0,48 22^00\rangle - 0,208 14^00\rangle + 0,512 06^00\rangle$ $22^20 = -0,756 22^20\rangle + 0,654 06^20\rangle$ $06^60 = 06^60\rangle$	$+4,3$ $+3,74$ $+2,23$ $+1,22$ 0 0

методом итераций. В качестве исходных для J_v принимались значения скоростей $R_{vv'}$, вычисленные в предположении доминирующей роли дальнего $V-V$ -обмена, т. е. $V-V$ -переходов с участием нижнего состояния (01^10). Затем в $R_{vv'}$ последовательно вносились поправка, связанная с учетом вклада мультиплетов с $v = 2-5$. Сдвиг энергии $\Delta E_{v\beta} = E_{v\beta} - \omega v$ и правильные волновые функции колебательных состояний $(v\beta) = \sum_{\beta \in v} C_\beta |v\beta\rangle$ рассчитывались так же, как и в [1], — в первом порядке теории возмущений в пренебрежении ангармоническими членами, отличными от ферми-резонансных. Соответствующие данные этого расчета для $v = 1-6$ представлены в таблице. Следует отметить, что полученные таким образом значения $\Delta E_{v\beta}$ хорошо (в пределах 3%) совпадают с экспериментальными [11]. Для вероятностей $V-V$ -обмена использовалось следующее соотношение [8]:

$$Q_{v-1\mu, v\mu'}^{u\lambda, u-1\lambda'} = V_{v-1\mu, v\mu'}^2 V_{u\lambda, u-1\lambda'}^2 Q_{01}^{10} \exp\left(-\bar{\delta} |\Delta E_{\mu\mu'}^{\lambda\lambda'}| + \frac{\Delta E_{\mu\mu'}^{\lambda\lambda'}}{2T}\right),$$

где $\Delta E_{\mu\mu'}^{\lambda\lambda'} = E_{u\lambda} - E_{u-1\lambda'} - E_{v\mu'} + E_{v-1\mu}$ — дефект резонанса; $\bar{\delta}$ — фактор адиабатичности $V-V$ -обмена. При этом матричные элементы переходов

$$V_{v-1\mu, v\mu'} = \sum_{\mu\mu'} C_\mu C_{\mu'} \langle v-1\mu | V | v\mu' \rangle$$

вычислялись в дипольном приближении

$$\langle v_1 v_2^{ll} | V | v_1 (v_2 + 1)^{l \pm 1} \rangle = \sqrt{\frac{1}{8} (v_2 \pm |l| + 2)}$$

— отличные от нуля члены.

Из фиг. 2 видно, что в режиме сильной неравновесности токовое распределение молекул по центрам мультиплетов может заметно отклоняться от больцмановского с температурой T_1 уже в нижней части спектра. При этом оно характеризуется колебательными температурами мультиплетов $T_v = \omega / \ln(x_{v-1}/x_v)$, которые уменьшаются с ростом v . Из-за этого «охлаждения» спаренных мод $V-V$ -током стационарное распределение для n_v не имеет восходящей ветви и довольно быстро спадает в области $v > v_*$.

Тем самым обеспечивается конечность и, что важно, близость статистической суммы F к соответствующей гармоническому приближению для спаренных мод CO_2 . Последнее обычно априори и предполагается при проведении расчетов колебательной кинетики в CO_2 -ГДЛ по трипоровской модели [4, 6, 12]. Отметим, что если вычисление F проводить по квазивесной функции распределения (1.1) и при этом не накладывать надлежащего ограничения на предел суммирования по $v(v \leq v_*)$, то возможна большая ошибка в конечных результатах расчета. Примером тому являются работы [5, 13], где ввиду неверной нормировки колебательного распределения, проведенной методом непосредственного суммирования (1.1) (до $v = 8$), оказались сильно заниженными оценки инверсии и усиления в CO_2 -ГДЛ на спаренных модах.

4. В заключение рассмотрим вопрос о влиянии $V-V$ -тока на скорость релаксации энергии спаренных мод CO_2 при сильной неравновесности. Как известно [2, 3], потери колебательной энергии в ангармонических осцилляторах при $V-V$ -токе могут вызываться двумя причинами: гибелью квантов на высоких уровнях при $V-T$ -процессах в области $v > v_0$ и непосредственно нерезонансным $V-V$ -обменом. В первом случае скорость токовой релаксации энергии $\Gamma = d\varepsilon/dt$, а точнее ее составляющая, определяется как $\Gamma_{(1)} = \omega_{v_0+1} I$; во втором — как $\Gamma_{(2)} = \sum_{v=1}^{v_0} \bar{\Delta\omega}_v I$,

где $\omega_v = E_v - E_{v-1}$ — энергия кванта; $\bar{\Delta\omega}_v$ — среднее значение дефекта резонанса $V-V$ -обмена, возбуждающего ток квантов на переходе $v - 1 \rightarrow v$. В спаренных модах вследствие расщепления уровней к указанным добавляются еще и потери энергии при внутренних $V-T$ -процессах в мультиплетах в области $v \leq v_0$.

Оценки показывают, что, как и в ангармонических осцилляторах, токовые каналы колебательной релаксации спаренных мод CO_2 могут быть очень эффективными при низких температурах. Так, при $T = 50 \text{ K}$, $T_1 = 1000 \text{ K}$, согласно расчетным данным, токовая релаксация колебательной энергии ε через верхние уровни при $Q_{01}^{10} = 0,01$ протекает столь же быстро (в расчете на одно столкновение), как и обычна $V-T$ -релаксация спаренных мод в углекислом газе, нагретом до температуры $T = 600-1000 \text{ K}$, и характеризуется вероятностью $P = \Gamma_{(1)}/Z\varepsilon \sim 10^{-4}$. Что же касается остальных каналов потерь энергии, связанных со своим рода эффектом «трения» при $V-V$ -токе, то их эффективность в этих условиях заметно меньше. Дело в том, что при низких температурах и сильном возбуждении колебаний спаренных мод основной вклад в $V-V$ -ток вносит ближний $V-V$ -обмен, протекающий с участием близких по величине смещения нижних компонентов мультиплетов. Поэтому средний дефект резонанса $\bar{\Delta\omega}_v$, характеризующий $V-V$ -ток, оказывается малым не только по сравнению с ω , но и с энергией расщепления ΔE_v и составляет $0,1-0,3 \text{ W}$. Поскольку $V-V$ -ток течет преимущественно по нижним компонентам мультиплетов, то столь же небольшой должна быть и средняя энергия $\bar{\Delta E}_v$, теряемая молекулами при $V-T$ -переходах внутри мультиплетов. Приближенно ее можно оценить по величине «постоянной ангармонизма» $\bar{\chi}$ для симметричной моды $\bar{\Delta E}_v \simeq \bar{\chi}\omega \sim 0,1-0,2 \text{ W}$. Отсюда следует также, что энергия квантов, уносимых $V-V$ -током в область гибели их при внешних и внутренних $V-T$ -процессах, должна быть близка к ω . Все это, а также обусловленная быстрым перекрыванием и сгущением спектра мультиплетов $v \sim 8-10$ относительная узость токовой области $v - 1 - v_0$ и приводят к тому, что потери энергии по внутреннему $V-T$ -и нерезонансному $V-V$ -каналам оказываются здесь несущественными: $\Gamma_{(2,3)}/(\Gamma_{(1)} \simeq 2\bar{\chi}v_0 \sim 10^{-1}$. Отметим, что с уменьшением колебательного возбуждения спаренных мод удельный вес потерь энергии на «трение» возрастает, и в пределе слабой неравновесности, когда $V-V$ -ток возбуждается дальним $V-V$ -обменом, становится, согласно оценке $\bar{\Delta\omega}_v \sim \bar{\Delta E}_v \simeq$

$\simeq 2\bar{\omega}ov$ и $\Gamma_{(2,3)} \simeq \bar{\omega}ov_0^2 I$, сравнимым с соответствующим удельным весом при гибели квантов на верхних уровнях.

Автор благодарит В. К. Конюхова за постоянное внимание к работе и полезные замечания.

Поступила 29 X 1981

ЛИТЕРАТУРА

- Ликальтер А. А. О релаксации симметричной моды колебаний молекул CO₂.— ПМТФ, 1975, № 3.
- Ликальтер А. А. О колебательном распределении многоатомных молекул.— ПМТФ, 1976, № 4.
- Конюхов В. К., Файзулаев В. Н. Влияние тока квантов на колебательное распределение и релаксацию энергии ангармонических осцилляторов.— Краткие сообщения по физике, 1981, № 8.
- Конюхов В. К., Файзулаев В. Н. К возможности создания газодинамического лазера на переходах между уровнями спаренных мод CO₂.— Квант. электроника, 1978, т. 5, № 12.
- Веденеев А. А., Волков А. Ю. и др. Газодинамический лазер с тепловой накачкой на переходах между деформационной и симметрической модами CO₂.— Письма в ЖТФ, 1978, т. 4, вып. 11.
- Конев Ю. Б. Усиление газодинамического CO₂-лазера при частичной инверсии на длине волны 16 мкм.— ЖТФ, 1979, т. 49, № 9.
- Treanor C. E., Rich J. W., Rehm R. G. Vibrational relaxation of anharmonic oscillators with exchange-dominated collisions.— J. Chem. Phys., 1968, vol. 48, N 4.
- Гордиц Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980.
- Becker R., Doring W. Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen.— Ann. Phys., 1935, Bd 24, S. 719.
- Лушников А. А., Сутугин А. Г. Современное состояние теории гомогенной нуклеации.— Усп. химии, 1976, № 3.
- Rothman L. S., Benedict W. S. Infared energy levels and intensities of carbon dioxide.— Appl. Opt., 1978, vol. 17, N 16.
- Файзулаев В. Н. Кинетика гетерогенных процессов в газодинамических лазерах. Дис. на соиск. учен. степени канд. физ.-мат. наук. М.: ФИАН СССР, 1979.
- Веденеев А. А., Волков А. Ю. и др. Теоретическое и экспериментальное исследование газодинамического лазера с тепловой накачкой на смеси CO₂—Ag (Xe) с длиной волны генерации 18,4 мкм. Препринт ФИАН СССР, 1979, № 120.

УДК 535.2,532,529,5/6

СТАЦИОНАРНЫЙ РЕЖИМ РАЗЛЕТА ПАРОВ, НАГРЕВАЕМЫХ ПОТОКАМИ ИЗЛУЧЕНИЯ ИЛИ БЫСТРЫХ ЧАСТИЦ

A. B. Добкин, T. B. Малешина, I. B. Немчинов

(Москва)

Мощные потоки излучения или быстрых частиц, испаряя поверхностные слои вещества преграды, вызывают их разогрев до высоких температур и разлет с большими скоростями. На преграде создается высокое давление. Эти явления привлекают в последнее время внимание в связи с проблемой импульсного управляемого термоядерного синтеза (УТС). В качестве источников энергии в основном рассматривались лазеры и электронные пучки. В последнее время наметился значительный прогресс в создании мощных ионных пучков (см., например, [1—7]). Уже достигнуты плотности потока порядка 1 ГВт/см² при длительностях импульса 0,01—1 мкс [7]. Производились оценки параметров, необходимых для достижения условий УТС с помощью ионных пучков [7—10]. Обсуждались возможности использования для тех же целей мощного излучения сплошного спектра, испускаемого сильными ударными волнами, генерируемыми, например, оболочками, разогнанными пучками частиц [11].

Явление взаимодействия потоков излучения и частиц с преградой представляет интерес не только в связи с проблемой УТС, но и для моделирования удара микрометеоритов о преграду и взрыва, разгона микрообъектов до очень больших скоростей, исследования оптических свойств и уравнения состояния вещества в экстремальных условиях, для диагностики самих пучков и источников излучения, а также для многих других научных и технологических целей. Картина процесса нагрева и движения паров в общем случае представляется весьма сложной нестационарной и в ряде случаев