

УДК 534.222—539.196

В. И. Грабовский, А. М. Старик

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДИФФУЗИИ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ  
НА ИЗМЕНЕНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ  
ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОЛЕБАНИЙ  
РЕЗОНАНСНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ**

Необходимость исследования закономерностей изменения гидродинамических параметров среды при воздействии лазерного излучения на резонансно-поглощающие среды обусловлена тем, что в широком классе задач лазерного зондирования атмосферы, лазерной химии и технологии эти процессы определяют физику явления. Изучение этих закономерностей проводилось в основном в рамках модели невязкого нетеплопроводного газа без учета влияния диффузии [1—6]. В тех же работах, где при анализе гидродинамического движения среды учитывались различные процессы переноса (конвекция, диффузия, теплопроводность), полагалось, что возбуждения внутренних степеней свободы молекул при воздействии излучения не происходит [7—11]. В то же время, как показали исследования [12—15], возбуждение, например, молекулярных колебаний в газе может оказывать существенное влияние на процессы переноса.

Цель данной работы — анализ влияния процессов переноса на изменение параметров среды при резонансном поглощении излучения на колебательно-вращательных переходах молекул.

Исследуем двухкомпонентную равновесную покоящуюся смесь газов, состоящих из двухатомных молекул А(1) и В(2) с однородным распределением параметров. Пусть воздействующее излучение поглощается в центре линии колебательно-вращательного перехода  $m(V', j') \rightarrow n(V'', j'')$  молекул сорта А ( $V$  — колебательное, а  $j$  — вращательное квантовые числа) из основного колебательного состояния ( $V' = 0$ ) в возбужденное ( $V'' = 1$ ). При этом

$$\nu_I = \nu_1 + (E_{j''} - E_{j'})/h,$$

где  $\nu_1$  — частота нормальных колебаний молекул сорта А, а  $\nu_I$  — действующего излучения;  $E_{j''}$  и  $E_{j'}$  — вращательные энергии молекул сорта А в состояниях  $n$  и  $m$ ;  $h$  — постоянная Планка. Пусть также все молекулы находятся в основном электронном состоянии, ионизация не происходит, а химические реакции отсутствуют. Рассмотрим случаи, когда время индуцированных переходов  $\tau_I \gg \tau_{RT}, \tau_{VV}$  ( $\tau_{RT}$  и  $\tau_{VV}$  — характерные времена вращательно-поступательного и внутримодового колебательно-колебательного энергообмена). При анализе изучаемых в работе процессов можно считать, что между вращательными и поступательными степенями свободы существует термодинамическое равновесие, а внутри каждой моды  $\nu_i$  ( $i = 1, 2$ ) устанавливается локальное бальцмановское распределение с колебательной температурой  $T_i$  (колебания молекул моделируются при этом гармоническим осциллятором).

Воспользуемся для описания движения среды системой уравнений Навье — Стокса для колебательно-неравновесного газа, которые полу-

чаются в приближении первого порядка теории возмущений относительно двухпараметрической функции распределения из кинетического уравнения Больцмана [16, 17]:

$$(1) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{U}) = 0;$$

$$(2) \quad \frac{\partial N_i}{\partial t} + \nabla[N_i(\mathbf{U} + \mathbf{V}_i)] = 0;$$

$$(3) \quad \rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho(\mathbf{U} \nabla) \mathbf{U} + \bar{\nabla} p = \sum_i N_i \mathbf{X}_i + \eta \Delta \mathbf{U} + \left( \xi + \frac{\eta}{3} \right) \nabla(\nabla \mathbf{U});$$

$$(4) \quad \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( E_{RT} + \frac{U^2}{2} \right) \right] + \nabla \left[ \rho \mathbf{U} \left( E_{RT} + \frac{p}{\rho} + \frac{U^2}{2} \right) - \mathbf{U}' \sigma' + \mathbf{q}_{RT} \right] = \\ = Q_I + \sum_i \mathbf{X}_i (\mathbf{V}_i + \mathbf{U}) N_i;$$

$$(5) \quad \frac{\partial \rho e_i^V}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{U} e_i^V) + \nabla \mathbf{q}_V^i = q_I^i + q_{VT}^i + q_{VV'}^i,$$

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

$$\mathbf{q}_V^i = \rho e_i^V \mathbf{V}_i - \lambda_i^V \nabla T_i + N k T \sum_{j=1}^2 D_{ij}^V \mathbf{d}_j,$$

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

$$\mathbf{d}_j = \nabla \left( \frac{N_j}{N} \right) + \left( \frac{N_j}{N} - \frac{N_j m_j}{\rho} \right) \nabla \ln p + \frac{N_j m_j}{\rho p} \sum_i N_i \mathbf{X}_i - \frac{N_j \mathbf{X}_j}{p},$$

$$Q_I = k_V I \left( 1 - \frac{v_1}{v_I} \right) - \sum_i (q_{VT}^i + q_{VV'}^i), \quad q_I^i = k_V I \frac{v_i}{v_I} \delta_{i,1},$$

$$q_{VT}^i = -h v_i N_i (\varepsilon_i - \varepsilon_{ie}) \sum_j W_{i,0}^j N_j, \quad E_{RT} = C_{RT} T,$$

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

$$L_{1,2} = \varepsilon_1^{\tau_1} (\varepsilon_2 + 1)^{\tau_2} - \varepsilon_2^{\tau_2} (\varepsilon_1 + 1)^{\tau_1} \exp[(r_2 h v_2 - r_1 h v_1)/kT],$$

$$p = \rho RT/\mu, \quad e_i^V = \frac{h v_i R}{k \mu} \varepsilon_i \gamma_i, \quad C_{RT}^i = \left( \frac{3}{2} + C_R^i \right) \frac{R}{\mu} \gamma_i, \quad C_{RT} = \sum_i C_{RT}^i,$$

$$\varepsilon_i = g_i [\exp(h v_i / k T_i) - 1]^{-1}, \quad \varepsilon_{ie} = \varepsilon_i(T).$$

Здесь  $\rho$ ,  $p$ ,  $T$  — плотность, давление и температура газа;  $\mathbf{U}$  — скорость движения среды;  $\mu = \sum_i \mu_i \gamma_i$ ;  $\mu_i$ ,  $\gamma_i$  — молекулярная масса  $i$ -го компонента и его молярная доля в смеси;  $N_i = N \gamma_i$ ;  $N$  — полное число частиц в единице объема;  $m_i$  — масса молекулы  $i$ -го компонента смеси;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $k$  — постоянная Больцмана;  $g_i$  — кратность вырождения моды  $v_i$ ;  $C_R^i = 1$  для линейных и  $C_R^i = 1,5$  для нелинейных молекул;  $\lambda_i^V$  — коэффициент колебательной проводимости для  $i$ -го компонента;  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности;  $D_i^T$  и  $D_{ij}$  — коэффициенты термо- и многокомпонентной диффузии для  $i$ -го компонента;  $D_{ij}^V$  — коэффициент диффузии колебательной энергии между  $i$ -м и  $j$ -м осцилляторами;  $D_i^V$  — коэффициент колебательной термодиффузии;  $\eta$  и  $\xi$  — коэффициенты вязкости;  $(\mathbf{U}' \sigma')$  — вектор с компонентами  $U_j \sigma'_{jk}$ ;  $\sigma'_{jk}$  — тензор вязких напряжений;  $\mathbf{X}_i$  — внешние силы, действующие

на одну частицу  $i$ -го сорта (в рассматриваемой задаче  $\mathbf{X}_i = \{m_i \mathbf{g}, \mathbf{f}_{NL}^i\}$ ,  $\mathbf{g}$  — ускорение силы тяжести,  $\mathbf{f}_{NL}^i$  — нелинейная сила, действующая на частицу  $i$ -го сорта в электромагнитном поле);  $\bar{W}_{i,0}^i$  — константа скорости колебательно-поступательного  $VT$ -обмена при столкновении молекул  $i$ -го сорта с  $j$ -м партнером ( $j = 1, 2$ );  $W_{1,2}$  — константа скорости междумолекул колебательно-колебательного  $VV'$ -обмена;  $I$  — интенсивность воздействующего излучения;  $k_\nu$  — коэффициент поглощения излучения на колебательно-вращательном переходе  $m \rightarrow n$ ;  $r_i$  — количество колебательных квантов, теряемых  $i$ -м партнером при  $VV'$ -обмене. При записи выражений для  $\mathbf{q}_{RT}$  и  $\mathbf{q}_V^i$  учитывается, что для гармонического осциллятора коэффициенты колебательно-поступательной проводимости  $\lambda_i^{VT} = 0$  [18], а также имеем

$$\lambda_i^V = D_{ij}^V C_{Vi}, C_V^i = \left( \frac{h\nu_i}{kT_i} \right)^2 \frac{N_i k \exp(h\nu_i/kT_i)}{[\exp(h\nu_i/kT_i) - 1]^2}.$$

Поскольку  $N_1, N_2$  и  $\rho$  связаны соотношением

$$(6) \quad \rho = m_1 N_1 + m_2 N_2,$$

то уравнение (1) и два уравнения вида (2) являются линейно зависимыми. Отсюда нетрудно получить, что наряду с обычными соотношениями между коэффициентами многокомпонентной и термодиффузии  $D_{ij} = D_{ji}$  и  $\bar{D}_1^T = -\bar{D}_2^T$  [19] должно также выполняться равенство

$$(7) \quad D_1^V \nabla \ln T_1 = -D_2^V \nabla \ln T_2.$$

Исследуем осесимметричные пучки с гауссовым распределением интенсивности по радиусу  $I(r, t) = I_0(t) \exp(-r^2/R_a^2)$  с  $R_a \ll k_\nu^{-1}$  ( $R_a$  — характерный радиус пучка), а  $I_0(t) = I_0$  при  $0 < t \leq \tau_n$  и  $I_0(t) = 0$  при  $t > \tau_n$  ( $\tau_n$  — длительность импульса воздействующего излучения). При этом изменением параметров в продольном направлении по сравнению с их изменением в поперечном сечении пучка можно пренебрегать и рассматривать оптически тонкий слой газа, в котором действие процессов макропереноса происходит только по радиусу пучка. Вводя безразмерные координаты  $r' = r/R_a$ ,  $t' = t/\tau_n$  и переходя к новым переменным  $\tilde{N}_i = N_i/N_{i0}$ ,  $\tilde{\mathbf{U}} = \mathbf{U}\tau_n/R_a$ ,  $\tilde{\rho} = \rho/\rho_0$ ,  $\tilde{p} = p/N_0 k T_0$ ,  $\tilde{T} = T/T_0$ ,  $\tilde{\mathbf{V}}_i = \mathbf{V}_i \tau_n/R_a$ ,  $\tilde{T}_i = T_i/T_0$ ,  $\tilde{k}_\nu = k_\nu/k_\nu^0$ ,  $\tilde{I} = I/I_0$  (индекс нуль относится к моменту времени  $t = 0$ ), приведем систему (1)–(5) к безразмерному виду, выделяя при этом характерные времена различных процессов переноса (штрихи и тильды далее, где возможно, опускаем):

$$(8) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho \mathbf{U});$$

$$(9) \quad \frac{\partial N_i}{\partial t} = -\nabla \left\{ N_i \left[ \mathbf{U} - \frac{\tau_n}{\tau_{Ti}} \frac{\nabla \ln T}{N_i} - \frac{\tau_n \nabla \ln T_i}{\tau_{Di}^V N_i} + \frac{\tau_n}{\tau_D} \sum_k \mathbf{d}_k \frac{N_0^2 m_k}{\rho_0 N_{i0}} \frac{N^2}{N_i \rho} \right] \right\};$$

$$(10) \quad \rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho(\mathbf{U}\mathbf{V})\mathbf{U} = -\frac{\nabla p}{\kappa} \left( \frac{\tau_n}{\tau_a} \right)^2 + \frac{\tau_n}{\tau_k} \left[ \Delta \mathbf{U} + \left( \frac{\xi}{\eta} + \frac{1}{3} \right) \nabla(\nabla \mathbf{U}) \right] + \left( \frac{\tau_n}{\tau_F} \right)^2 \sum_k N_k \mathbf{X}_k \gamma_{k0};$$

$$(11) \quad \rho \frac{\partial E_{RT}}{\partial t} + \rho(\mathbf{U}\mathbf{V})E_{RT} = -p \nabla \mathbf{U} (\kappa - 1) + \kappa(\kappa - 1) \left[ \sum_i \mathbf{X}_i \mathbf{V}_i N_i \left( \frac{\tau_a}{\tau_F} \right)^2 \gamma_{i0} + \frac{\tau_a^2}{\tau_n \tau_R} \nabla \mathbf{U}' \sigma' \right] + k_\nu I \delta \frac{\xi}{\theta_1 + \xi} + (\kappa - 1) \sum_i \left[ \frac{\tau_n}{\tau_{iV}^V} \theta_i N_i \gamma_{i0} (\varepsilon_i - \varepsilon_{i0}) - \frac{\tau_n}{\tau_{VV'}} L_{1,2} \frac{(-1)^i \theta_i r_i N_1 N_2}{g_i} \right] - \nabla \left[ \frac{\rho T}{C_{RT}^0} \sum_i C_{RT}^i \mathbf{V}_i - \frac{\tau_n}{\tau_\lambda} \nabla T + \frac{T}{N} \sum_{i \neq j} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) (\kappa - 1) \frac{N_j \gamma_{j0} \gamma_{j0} \tau_D}{\tau_{Ti}} \right];$$

$$(12) \quad \rho \frac{\partial e_i^V}{\partial t} + \rho (\mathbf{UV}) e_i^V = \left[ \delta_{1,i} k_{\nu} I \frac{\tau_{II}}{\tau_i} - \frac{\tau_{II} N_i}{\tau_i^{VT}} (\varepsilon_i - \varepsilon_{ie}) + (-1)^i \times \right. \\ \left. \times \frac{L_{1,2} r_i \tau_{II} N_1 N_2}{\gamma_{i0} g_i \tau_{VV'}} \right] \frac{\theta_i}{C_{i,0}^V} - \nabla \left\{ \rho e_i^V \mathbf{V}_i - \frac{\tau_{II}}{\tau_i^V} \nabla T_i + \frac{NT}{C_{i,0}^V \gamma_{i0}} \sum_k \frac{\tau_{II}}{\tau_{ik}^V} \mathbf{d}_k \right\}, \\ \mathbf{V}_i = - \frac{\tau_{II}}{\tau_{Ti}} \frac{\nabla \ln T}{N_i} - \frac{\tau_{II}}{\tau_{Di}^V} \frac{\nabla \ln T_i}{N_i} + \frac{\tau_{II}}{\tau_D} \sum_k \mathbf{d}_k \frac{N_0 m_k N}{\rho_0 \gamma_{i0} \gamma_i \rho}, \\ \mathbf{d}_k = \gamma_{k0} \nabla (\gamma_k) + \gamma_{k0} \left( \gamma_k - \frac{N_k}{\rho} \frac{m_k N_0}{\rho_0} \right) \nabla \ln p + \\ + \left( \frac{N_k}{\rho} \frac{m_k N_0}{\rho_0} \sum_j \gamma_{j0} N_j \mathbf{X}_j - N_k \mathbf{X}_k \right) \frac{\kappa \tau_a^2 \gamma_{k0}}{\tau_{FP}^2}, \\ C_{i,0}^V = \theta_i^2 \frac{\exp(\theta_i)}{[\exp(\theta_i) - 1]^2}, \quad \theta_i = \frac{h\nu_i}{kT_c},$$

$$\kappa = 1 + \left( C_{RT}^0 \frac{h\nu_0}{R} \right)^{-1}, \quad \zeta = \frac{E_{j''} - E_{j'}}{kT_c}, \quad \delta = \frac{h\nu_0 I_0 \tau_{II}}{\rho_0 C_{RT}^0 T_0} = (\theta_1 + \zeta) \frac{\tau_{II}}{\tau_I} (\kappa - 1) \gamma_{10}.$$

Здесь  $\tau_a = R_a / \sqrt{\kappa \rho_0 / \rho_0}$  — время распространения звуковых колебаний поперек пучка;  $\tau_D = R_a^2 / D_{ij}$ ,  $\tau_{Ti} = R_a^2 m_i N_{i0} / D_i^T$ ,  $\tau_{Di}^V = R_a^2 m_i N_{i0} / D_i^V$ ,  $\tau_{ij}^V = R_a^2 / D_{ij}^V$  — соответственно времена многокомпонентной диффузии, термодиффузии  $i$ -го компонента, диффузии колебательной энергии  $i$ -го осциллятора и колебательной диффузии между  $i$ -м и  $j$ -м осцилляторами;  $\tau_{\lambda} = \rho R_a^2 C_{RT}^0 / \lambda$  — время теплопроводности;  $\tau_i^V = R_a^2 C_{V0}^i / \lambda_i^V$  — время колебательной теплопроводности для  $i$ -го осциллятора;  $\tau_i^{VT} = \left( \sum_j W_{i,0}^j N_{j,0} \right)^{-1}$  — время  $VT$ -релаксации для  $i$ -го осциллятора;  $\tau_{VV'} = (W_{12} \gamma_{10} \gamma_{20} N_0)^{-1}$  — время  $VV'$ -обмена;  $\tau_I = N_{10} h\nu_I / k\nu_0 I_0$ ;  $\tau_{\kappa} = \frac{R_a^2 \rho_0}{\eta}$  — время конвекции вследствие вязкости;  $\tau_F = \sqrt{\frac{\rho_0 R_a}{X_0 N_0}}$  — время изменения

состояния среды под действием внешних сил  $\mathbf{X}_0$ . При этом для  $\rho$  в соответствии с (6) имеем

$$(13) \quad \rho = \frac{N_1 P_m + N_2 P_N}{P_m + P_N}, \quad P_m = \frac{m_1}{m_2}, \quad P_N = \frac{\gamma_{20}}{\gamma_{10}}.$$

Рассмотрим случаи, когда коэффициент поглощения можно представить в виде [20]

$$(14) \quad h_{\nu} = h_{\nu}^0 \frac{1 - \exp(-\zeta) \varepsilon_1}{1 - \exp(-\zeta) \varepsilon_{10}},$$

$$\varepsilon_{10} = [\exp(\theta_1) - 1]^{-1} g_1, \quad \varepsilon_1 = \left[ \exp\left(\frac{\theta_1 T_0}{T_1}\right) - 1 \right]^{-1} g_1.$$

Из (8)—(14) видно, что характер изменения гидродинамических параметров определяется, во-первых, иерархией времен  $\tau_{II}$ ,  $\tau_a$ ,  $\tau_D$ ,  $\tau_{Ti}$ ,  $\tau_{Di}^V$ ,  $\tau_{ij}^V$ ,  $\tau_{\lambda}$ ,  $\tau_i^V$ ,  $\tau_i^{VT}$ ,  $\tau_{VV'}$ ,  $\tau_I$ ,  $\tau_{\kappa}$ ,  $\tau_F$  и, во-вторых, набором безразмерных параметров  $\theta_i$ ,  $\zeta$ ,  $P_m$ ,  $P_N$ ,  $\kappa$ . Ограничимся изучением случаев, когда  $\tau_2^{VT}$ ,  $\tau_{VV'}$ ,  $\tau_{\kappa}$ ,  $\tau_F \gg \max\{\tau_a, \tau_D, \tau_i^V, \tau_{Ti}, \tau_1^{VT}, \tau_I, \tau_{II}\}$ . Кроме того, учтем, что коэффициент  $D_{ij}^V$  связан с  $D_{ij}$ , а  $\bar{D}_i^V$  с  $\bar{D}_i^T$ . Согласно [12, 13, 16], можно положить  $D_{ij}^V = k_V D_{ij}$  и  $\bar{D}_i^V = k_V \bar{D}_i^T$ , где  $k_V$  может в зависимости от сорта молекул изменяться от 0,4 до 1. Далее будем полагать  $k_V = 1$ , что характерно для полярных молекул (CO, HCl) [13]. Отметим, что  $k_V = 0$  формально соответствует случаю, когда процессами диффузии колебательной

энергии, колебательной термодиффузии и колебательной теплопроводности можно пренебречь (при этом  $\tau_{D1}^V, \tau_{ij}^V, \tau_i^V \cong \infty$ ). Времена  $\tau_D, \tau_{D1}^V, \tau_{Ti}, \tau_{ij}^V, \tau_i^V, \tau_\lambda$  являются зависимыми, поскольку имеют место соотношения

$$\begin{aligned} \tau_{ij}^V &= k_V^{-1} \tau_D, \quad \tau_i^V = \tau_{ij}^V, \quad \tau_\lambda = \kappa \tau_D, \quad \tau_{D1}^V = k_V^{-1} \tau_{T1}, \quad \tau_{Ti} = \\ &= \tau_D \frac{\gamma_{10}^2 (P_m + P_N)}{k_{Ti}} \left( \frac{P_N}{P_m} \right)^{i-1}, \end{aligned}$$

кроме того, из (7) следует

$$\tau_{D2} = - \tau_{D1}^V \frac{P_N}{P_m} \frac{\nabla \ln T_2}{\nabla \ln T_1}.$$

Здесь  $k_{Ti}$  — термодиффузионные отношения ( $k_{T1} = -k_{T2}$ , их величина зависит от  $P_m$  и  $P_N$  и параметров потенциала межмолекулярного взаимодействия [21]). Таким образом, независимыми в рассматриваемой задаче являются только следующие характерные времена:  $\tau_a, \tau_D, \tau_i^{VT}, \tau_{VV'}, \tau_I, \tau_H$ . При этом имеем набор независимых безразмерных параметров, определяющих характер изменения гидродинамического движения среды при неоднородном возбуждении молекулярных колебаний одного компонента смеси резонансным излучением:  $P_a = \tau_H / \tau_a, P_D = \tau_H / \tau_D, P_V = \tau_H / \tau_1^{VT}, P_m, P_N, \zeta, \theta_1, \kappa, P_I = \tau_H / \tau_I$ .

Пусть величина поглощенной энергии за время воздействия излучения существенно меньше энергии вращательных и поступательных степеней свободы молекул, т. е.  $\delta \ll 1$ . Тогда можно провести линеаризацию уравнений (8)–(12), представляя  $\rho, N, T, U, V_i, d_i$  в виде

$$(15) \quad Z = 1 + \delta Z', \quad Z = \rho, N, T, N_i, U = \delta U', \quad V_i = \delta V'_i, \quad d_i = \delta d'_i.$$

Заметим, что уравнение (12) не линеаризуется. Подставляя (15) в (8)–(12) и пренебрегая членами с порядком малости выше  $\delta$ , после исключения из (8), (9)  $U'$  получаем систему уравнений для безразмерных возмущений  $N'_i, \rho', T'$  и безразмерной колебательной температуры  $T_i = T_i / T_0$ , описывающую изменение состояния среды при  $t \leq \tau_H$ :

$$(16) \quad \begin{aligned} \frac{\partial N'_i}{\partial t} &= \frac{\tau_H}{\tau_D} \Delta \left( N'_i - \rho' - \frac{m_j N_{j0} N_{i0} (m_i - m_j)}{m_2^2 N_{10}^2 (P_m + P_N)^2} \rho' \right) + \frac{\partial \rho'}{\partial t} + \\ &+ \frac{m_1 m_2 \gamma_{10}^2 N_{i0} \tau_H}{m_i \gamma_{i0} \rho_0 \tau_D} \left\{ \Delta T' + \left( \frac{\nabla T_1}{T_1} \nabla \right) N'_i + \frac{1}{\delta} \left[ \frac{\Delta T_1}{T_1} - \left( \frac{\nabla T_1}{T_1} \right)^2 \right] \right\}; \end{aligned}$$

$$(17) \quad \kappa \frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} = \left( \frac{\tau_H}{\tau_a} \right)^2 \Delta (\rho' + T');$$

$$(18) \quad \begin{aligned} \frac{\partial T'}{\partial t} &= \frac{\zeta [1 - \exp(-\zeta) \varepsilon_1]}{(\theta_1 + \zeta) [1 - \exp(-\zeta) \varepsilon_{10}]} I + \frac{\tau_H}{\kappa \tau_D} \Delta T' + \left\{ - (\nabla V'_1 - \nabla V'_2) k_{T1} + \right. \\ &+ \left. \frac{\tau_H}{\delta} \gamma_{10} \theta_1 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{10}}{\tau_1^{VT}} + \frac{\partial \rho'}{\partial t} \right\} (\kappa - i) + \frac{\tau_H}{\tau_D} \left( \frac{\nabla T_1}{T_1} \nabla \right) T' - \frac{m_2 k_{T1} N_{i0}}{\rho_0} (1 - P_m); \end{aligned}$$

$$(19) \quad \begin{aligned} C'_{V1} \frac{\partial T_1}{\partial t} &= \frac{\tau_H}{\tau_D} \Delta T_1 + C'_{V1} \left( \frac{\nabla T_1}{T_1} \nabla \right) T_1 - \frac{\tau_H m_2 N_{i0} k_{T1}}{\tau_D \gamma_{10} \rho_0} + \\ &+ \frac{\theta_1}{C'_{1,0}} \left\{ \frac{\tau_H}{\tau_I} \frac{[1 - \exp(-\zeta) \varepsilon_1]}{[1 - \exp(-\zeta) \varepsilon_{10}]} I - \frac{\tau_H}{\tau_1^{VT}} (\varepsilon_1 - \varepsilon_{10}) \right\} - \delta \nabla d'_2 \frac{\tau_H}{\tau_D C'_{1,0}}, \quad T_2 = 1, \end{aligned}$$

$$V'_i = \frac{\tau_H}{\tau_D} \left\{ \frac{d'_j m_1}{\gamma_{10} (P_N + P_m) m_i \gamma_{i0}} - \frac{m_1 m_2 N_{i0} k_{Ti}}{m_i \rho_0 \gamma_{i0}} \nabla T' - \frac{m_1 m_2 N_{i0} k_{Ti}}{\delta m_i \rho_0 \gamma_{i0}} \frac{\nabla T_1}{T_1} \right\},$$

$$d'_j = (P_N + P_m) \gamma_{10}^2 (-1)^j \nabla (\rho' - N'_1) + \gamma_{j0} \left[ 1 - \frac{m_j}{m_2 \gamma_{10}} (P_N + P_m)^{-1} \right] \nabla \rho',$$

$$C'_{Vi} = C'_{Vi} / N_{i0} k C'_{i,0}.$$

Для рассматриваемой задачи справедливы следующие начальные и граничные условия:

$$\begin{aligned}
 t = 0: \quad \rho' = N'_1 = N'_2 = T' = 0, \quad T_1 = 1, \\
 \frac{\partial \rho'}{\partial t} = (P_m + P_N)^{-1} \left( \frac{\partial N'_1}{\partial t} P_m + \frac{\partial N'_2}{\partial t} P_N \right), \\
 r = 0: \quad \frac{\partial \rho'}{\partial r} = \frac{\partial N'_1}{\partial r} = \frac{\partial N'_2}{\partial r} = \frac{\partial T'}{\partial r} = \frac{\partial T_1}{\partial r} = 0, \\
 r = \infty: \quad \rho' = N'_1 = N'_2 = T' = 0, \quad T_1 = 1.
 \end{aligned}$$

Заметим, что начальное условие для  $\partial \rho' / \partial t$  вытекает из (13). Два уравнения вида (16), а также (17)–(19) полностью определяют при известных значениях  $P_a, P_D, P_V, P_I, P_m, P_N, \zeta, \theta_1$ , и изменение всех гидродинамических параметров. Численное интегрирование этой системы уравнений проводилось с использованием неявных разностных схем второго порядка точности по пространству и первого по времени [22]. 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. При моделировании влияния процессов макропереноса на изменение гидродинамических параметров будем считать  $\tau_{II} = \tau_1^{VT}$  ( $P_V = 1$ ) и  $\kappa = 1,4$ . Полагалось, что характер взаимодействия молекул определяется потенциалом Ленарда — Джонса [21] с типичными для двухатомных молекул параметрами  $\sigma = 2,8 \cdot 10^{-8}$  см,  $\epsilon = 3 \cdot 10^{18}$  эрг.

Рассмотрим сначала влияние процессов, связанных с возбуждением молекулярных колебаний. На рис. 1 для  $P_a = 10, P_I = P_D = 1$  представлено изменение  $N'_1, N'_2, N', T'$  и  $T_1$  (линии 1–5) во времени  $t' = t/\tau_D$  на оси пучка при  $P_m = 0,5, P_N = 4, \zeta = -1$  и  $\theta_1 = 7$  (сплошные линии соответствуют полной модели, а штриховые — модели, в которой процессы макропереноса, связанные с возбуждением колебательных степеней свободы, не учитываются ( $k_V = 0$ )). При принятых значениях параметров имеем следующие соотношения времен:  $\tau_I = \tau_D = \tau_{ij}^V = \tau_i^V = \tau_i^{VT}$ ;  $\tau_a = 0,1\tau_1^{VT}$ ,  $|\tau_{T1}| = 16\tau_1^{VT}$ ,  $\tau_{T2} = 130\tau_1^{VT}$ ,  $\tau_{D1}^V = 16\tau_1^{VT}$  (для дипольных молекул в зависимости от параметров среды  $\tau_1^{VT} = 10^{-7} \div 10^{-3}$  с). Видно, что даже при  $t < \tau_D$  эти процессы существенно влияют на изменение  $N'$  и  $N'_1, N'_2$ . Анализ показывает, что влияние определяется колебательной термодиффузией и вызвано неоднородным распределением колебательной температуры  $T_1$  по радиусу пучка, которая при  $t' = 1$  в

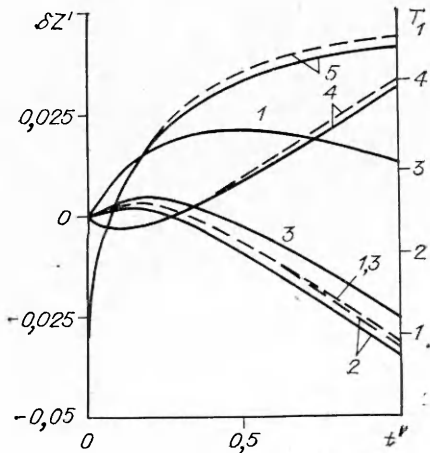


Рис. 1

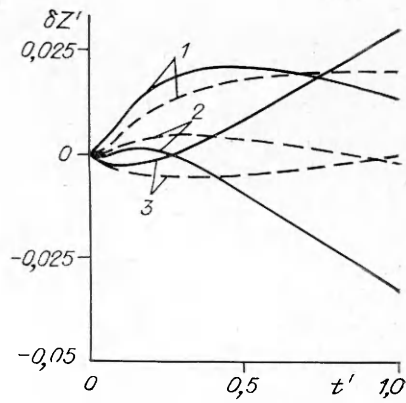


Рис. 2

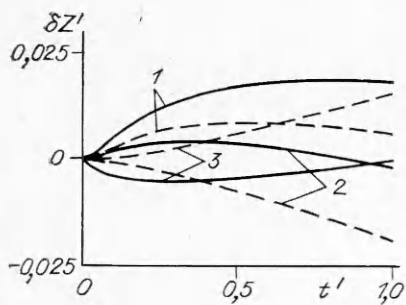


Рис. 3

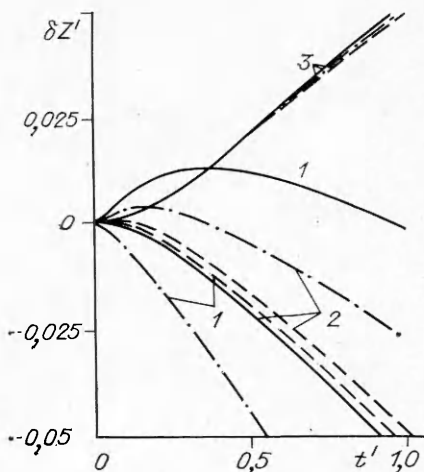


Рис. 4

$\sim 4,5$  раза больше  $T_0$ , изменение поступательной температуры при этом не превышает  $\sim 0,025 T_0$ , параметр взаимодействия  $\delta = 0,46$ . Так, если в модели с  $k_V = 0$   $N'(t) = N'_1(t) = N'_2(t)$  (лишь при  $t \sim \tau_D$  значения  $N'_1 \neq N'_2$  вследствие действия обычной диффузии), то при  $k_V = 1$  вид зависимостей  $N'(t)$ ,  $N'_1(t)$  и  $N'_2(t)$  существенно различается. Поскольку при небольших  $t$  нагрев среды еще невелик, то уменьшение  $\rho'$ , которое ведет к уменьшению  $N'_1$ , незначительно и поведение  $N'_1$  определяется в основном диффузионным потоком, возникающим из-за неоднородного распределения  $T_1$ . При  $P_m = 0,5$  и  $P_N = 4$   $D_1^V < 0$  и диффузионный поток для молекул более легкого газа А направлен от периферии к центру пучка, что и приводит к росту  $N'_1$  на оси. Для молекул сорта В диффузионный поток направлен от центра к периферии ( $D_2^V > 0$ ), поэтому  $N'_2$  на оси уменьшается. При больших  $t$  ( $t > 0,4\tau_D$ ) изменение  $N'_i$  определяется уже изменением плотности на оси пучка. Поэтому, достигая максимума при некотором  $t$ , значение  $N'_1$  начинает уменьшаться. Влияние процессов макропереноса, связанных с возбуждением молекулярных колебаний, на  $T'$  и  $T_1$  существенно слабее. При этом на поведение  $T_1$  помимо колебательной термодиффузии влияет колебательная теплопроводность, приводящая к уменьшению  $T_1$  на оси пучка по сравнению с моделью, не учитывающей эти процессы ( $k_V = 0$ ). Отметим, что при  $\zeta < 0$  (в рассматриваемом случае  $\zeta = -1$ ) имеет место кинетическое охлаждение, а при  $\zeta > 0$  — кинетический нагрев среды [23].

Влияние параметров  $\zeta$  и  $\theta_1$ , которые определяются через спектроскопические характеристики поглощающего перехода при  $P_a = 10$ ,  $P_I = P_D = 1$ ,  $P_m = 0,5$ ,  $P_N = 4$ , на изменение  $N'_1$ ,  $N'_2$ ,  $T'_3$  (линии 1—3) во времени на оси пучка иллюстрируют рис. 2 и 3 (на рис. 2 сплошные линии соответствуют  $\theta_1 = 7$ , штриховые  $\theta_1 = 3$ ,  $\zeta = -1$ , а на рис. 3 сплошные линии отвечают  $\zeta = -1$ , штриховые  $\zeta = -0,1$ ,  $\theta_1 = 3$ ). Из представленных распределений видно, что уменьшение  $\theta_1$  ведет к более плавному изменению всех параметров и росту времени кинетического охлаждения. При этом также увеличивается и отличие значений  $T'$  и  $T_1$ , рассчитанных по полной модели и по модели с  $k_V = 0$ . Уменьшение  $|\zeta|$ , наоборот, приводит к более резкому изменению  $N'_1$ ,  $N'_2$  и  $T'$  и уменьшению времени кинетического охлаждения. Интересным здесь является тот факт, что при изменении  $\theta_1$  и  $\zeta$  существенным образом меняется поведение зависимостей  $N'_i(t)$ , хотя параметры  $\theta_1$  и  $\zeta$  в уравнения для  $N'_i$  в явном виде не входят. Их влияние на  $N'_i$  происходит опосредованно через изменение  $T'$  и  $T_1$  (при уменьшении  $\theta_1$   $T'$  и  $T_1$  меняются слабее, а при увеличении  $\zeta$  ( $-1 \leq \zeta \leq 1$ ) — сильнее).



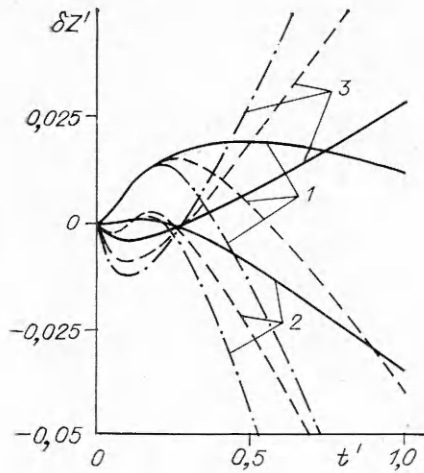


Рис. 5

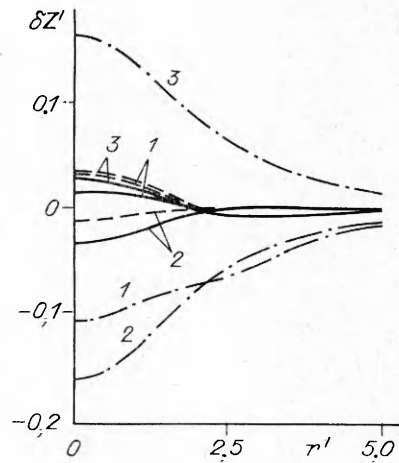


Рис. 6

Параметры  $P_m$  и  $P_N$  явно входят в уравнения для  $N_1'$ ,  $N_2'$ , кроме того, они определяют знак  $k_{Ti}$ , а следовательно, и направление потока, обусловленного как обычной, так и колебательной термодиффузией. Поэтому их влияние на изменение гидродинамических параметров должно быть весьма существенным. На рис. 4 представлены зависимости  $N_1'(t')$ ,  $N_2'(t')$  и  $T'(t')$  (линии 1–3) при  $P_a = 10$ ,  $P_I = P_D = 1$ ,  $\theta_1 = 7$ ,  $\zeta = -0,1$ ,  $P_N = 4$  для  $P_m = 0,5$ ; 1; 2 (сплошные, штриховые и штрихпунктирные линии). Видно, что изменение  $P_m$  от 0,5 до 2 приводит к качественно иному поведению зависимостей  $N_1'(t')$ ,  $N_2'(t')$ . Так, если при  $P_m = 0,5$  функция  $N_1'(t')$  имеет максимум, а  $N_2'(t')$  плавно уменьшается, то при  $P_m = 2$  ситуация меняется на противоположную. Это объясняется сменой знака  $k_{Ti}$ . Поведение зависимости  $T'(t')$  при разных  $P_m$  практически не меняется. Влияние параметра  $P_N$  иллюстрирует рис. 5, где линии 1–3 приведены для  $N_1'(t')$ ,  $N_2'(t')$  и  $T'(t')$ , а сплошные, штриховые и штрихпунктирные линии отвечают  $P_N = 4$ ; 1; 0,25 ( $P_m = 0,5$ ,  $P_a = 10$ ,  $P_I = P_D = 1$ ,  $\theta_1 = 7$ ,  $\zeta = -0,1$ ). Видно, что уменьшение  $P_N$  приводит, во-первых, к более глубокому охлаждению среды и к более сильному последующему ее нагреву и, во-вторых, к более резкому изменению  $N_1'(t')$  и  $N_2'(t')$ . Интересным здесь является тот факт, что при  $P_N = 0,25$  при малых  $t'$  поведение зависимостей  $N_1'(t')$  и  $N_2'(t')$  в точности определяется поведением  $T'(t')$ . Изменение соотношения между характерными временами процессов, как следует из (16)–(19), также должно влиять на распределение гидродинамических параметров как по радиусу пучка, так и во времени. На рис. 6 линиями 1–3 показано изменение  $N_1'(r')$ ,  $N_2'(r')$ ,  $T'(r')$  при  $t = \tau_D$  для трех характерных случаев, отличающихся соотношением  $P_a, P_D, P_I, P_V$ : 1)  $P_a = 10$ ,  $P_V = P_I = P_D = 1$ ; 2)  $P_a = P_I = P_D = P_V = 1$ ; 3)  $P_a = P_I = P_V = 1$ ,  $P_D = 0,1$  (сплошные, штриховые и штрихпунктирные линии). Параметры  $\zeta, \theta_1, P_m, P_N$  одинаковы ( $\zeta = -1$ ,  $\theta_1 = 7$ ,  $P_m = 0,5$ ,  $P_N = 4$ ). Из представленных распределений видно, что сильнее всего на изменение  $N_1'$ ,  $N_2'$  и  $T'$  влияет соотношение между временем  $VT$ -релаксации и временем диффузии. Уменьшение отношения  $\tau_1^{VT}/\tau_D$  от 1 до 0,1 (уменьшение  $P_D$  от 1 до 0,1) приводит к более резкому нагреву среды, что влечет за собой существенное уменьшение  $N_1'$  (здесь  $N_1' < 0$ ) по сравнению со случаем  $P_V = P_D = 1$ , когда  $N_1' > 0$ . Изменение соотношения между  $P_a$  и остальными параметрами, характеризующими скорости различных процессов переноса, влияет на поведение  $N_1'(r')$ ,  $N_2'(r')$  и  $T'(r')$  в меньшей степени.



Таким образом, проведенный анализ показал, что возбуждение молекулярных колебаний резонансным излучением с неоднородным профилем интенсивности по радиусу пучка приводит к значительному усилению влияния процессов макропереноса на изменение гидродинамических параметров среды. Закономерности изменения этих параметров определяются соотношением характерных времен соответствующих процессов, составом и массой молекул смеси, а также спектроскопическими характеристиками поглощающего перехода.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Гордин М. П., Соколов А. В., Стрелков Г. М. Распространение мощного лазерного излучения в атмосфере // Итоги науки и техники. Сер. Радиофизика.— М., 1980.— Т. 20.
2. Стробен Д. Распространение лазерного пучка в атмосфере.— М.: Мир, 1981.
3. Fleck J. A., Morris J. R., Feit M. D. Time dependent propagation of high energy laser beams through the atmosphere // Appl. Phys.— 1976.— V. 10, N 2.
4. Выслоух В. А., Огнев Л. Н. Резонансная самофокусировка в смеси  $\text{CO}_2\text{—N}_2$  // ПМТФ.— 1980.— № 4.
5. 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.
6. Gebhardt F. C. High power laser propagation // Appl. Optics.— 1976.— V. 15, N 6.
7. Веденов А. А., Маркин О. А. Распространение лазерного излучения в среде с поглощением // ЖЭТФ.— 1979.— Т. 76, № 4.
8. Герасимов Б. П., Гордиенко В. М., Сухоруков А. П. О свободной конвекции при фотоабсорбции // ЖТФ.— 1975.— Т. 45, вып. 12.
9. Soloukhin R. I., Martynenko O. G., Galich N. E. Thermal interaction of high-power laser radiation with gases // J. Heat and Mass. Transfer.— 1980.— V. 23, N 12.
10. 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.
11. Бункин Ф. В., Кириченко Н. А., Курдюмов С. П. и др. Термодиффузионные колебания в газовых смесях в поле лазерного излучения // ДАН СССР.— 1989.— Т. 303, № 6.
12. Егоров Б. В., Жигулев В. П., Кузнецов В. М. Об уравнениях аэродинамики при наличии бинарных молекулярных процессов // ДАН СССР.— 1965.— Т. 164, № 6.
13. Athye W. F. Thermal conductivity in vibrationally excited gases // J. Chem. Phys.— 1972.— V. 57, N 12(11).
14. Кириллов И. А., Потапкин Б. В., Русанов В. Д. и др. О влиянии исходных пространственно-неоднородных возмущений температуры на динамику колебательной релаксации // ПМТФ.— 1984.— № 6.
15. Ритынь Е. Н., Рубиков Ю. А., Слободская П. В., Соснов Е. Н. Коэффициенты диффузии колебательно-возбужденных молекул  $\text{CO}_2$  // Хим. физика.— 1988.— Т. 7, № 5.
16. Смит К., Томсон Р. Численное моделирование газовых лазеров.— М.: Мир, 1981.
17. Жданов В. М., Алиевский М. Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах.— М.: Наука, 1989.
18. Добкин С. В., Сон Э. В. Процессы переноса в колебательно-возбужденном молекулярном газе // ПМТФ.— 1987.— № 2.
19. Ферцигер Г., Капер Дж. Математическая теория переноса в газах.— М.: Мир, 1976.
20. Сорокин А. А., Старик А. М. О влиянии интенсивности излучения и параметров среды на глубину охлаждения и изменение показателя преломления при поглощении излучения с  $\lambda = 9,2\text{—}10,6$  мкм парамаи воды // ПМТФ.— 1986.— № 6.
21. Гиршфельдер Дж., Кертинс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей.— М.: ИЛ, 1961.
22. Самарский А. А. Теория разностных схем.— М.: Наука, 1977.
23. Старик А. М. Охлаждение потока газа из двухатомных молекул резонансным излучением // ПМТФ.— 1984.— № 5.

г. Москва

Поступила 19/VIII 1991 г.,  
в окончательном варианте — 27/XII 1991 г.