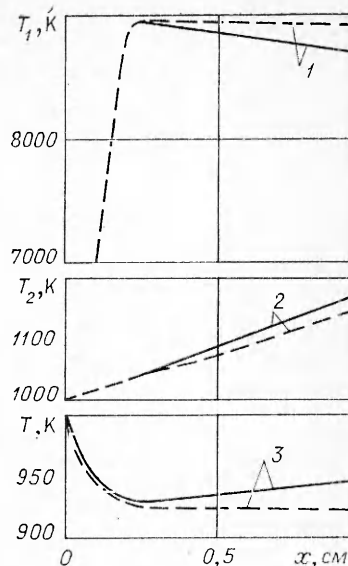


Ф и г. 4

степенями свободы (штриховые линии) и когда $V - T$ -обмен существует. Из представленных распределений видно, что дополнительное охлаждение потока при $I_0 = 0$ вызвано процессом межмолекулярного $V - V'$ -обмена энергией между возбужденными молекулами HCl и невозбужденными молекулами H_2 (T_1 уменьшается, а T_2 растет). Колебательно-поступательная релаксация приводит при этом к сокращению зоны существования области с пониженной температурой и к уменьшению величины ΔT .

В заключение отметим, что изменение макроскопических параметров потока вследствие рассмотренных механизмов при поглощении газом резонансного излучения может оказаться определяющим при исследовании нестационарной самофокусировки лазерных пучков.



Ф и г. 5

ЛИТЕРАТУРА

1. Гордиец Б. Ф., Панченко В. Я. Охлаждение молекулярных газов стимулированным лазерным излучением. — Письма в ЖТФ, 1978, т. 4, вып. 23.
2. Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шеленин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980.
3. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. М.: ИЛ, 1949.
4. Старик А. М. К вопросу об определении времен релаксации при кинетическом охлаждении движущегося газа. — ПМТФ, 1982, № 2.
5. Старик А. М. О кинетическом охлаждении движущегося газа. — Изв. АН СССР. МЖГ, 1982, № 3.
6. Файзулаев В. Н. Тепловые эффекты нерезонансного колебательного обмена. — ПМТФ, 1975, № 2.
7. Кирмусов И. П., Левин В. А., Старик А. М. Теоретическое исследование характеристик газодинамического лазера на смеси $\text{H}_2 - \text{HCl}$. — Квант. электроника, 1981, т. 8, № 5.

Поступила 11/VII 1983 г.

УДК 533.6.011.8

ПРИБЛИЖЕННОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ СЛАБОАНГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

А. П. Васильев, Г. В. Дубровский, В. М. Стрельчя
(Ленинград)

Задача построения аналитических решений релаксационных уравнений в смеси слабоангармонических осцилляторов (САО) вызывает в настоящее время большой интерес в связи с необходимостью качественного и количественного анализа роли ангармонических эффектов в теории лазеров [1], химической кинетике [2], при расчетах кинетических коэффициентов в случае замедленной релаксации [3], в теории поглощения и дисперсии звука и т. д.

Ранее эта задача решалась численными [4—6] и аналитическими [7] методами в одноквантовом или диффузионном приближении с учетом $V-T$ -переходов и использованием модельных выражений для скоростных коэффициентов. При наличии одновременно протекающих $V-T$, $V-V$, $V-V'$ -процессов строились квазистационарные решения для специальных начальных условий на запас квантов [8—9]. Релаксационные процессы в системах с источниками колебательно-возбужденных молекул наиболее полно (в рамках гармонического приближения) рассматривались в [10].

В данной работе в приближении одноквантовых переходов получены новые аналитические решения задачи о колебательной релаксации в системе САО для произвольного вида констант скоростей и небольшого термостата при условии, что отношение двух соседних заселенностей есть функция, плавно зависящая от номера уровня. Анализ показывает, что такое приближение выполняется для газодинамических условий, когда, с одной стороны, неприменимо диффузионное приближение, требующее плавности самой функции распределения при переходе от уровня к уровню, а с другой — роль многоквантовых переходов еще незначительна и может быть учтена интегрально (например, через многоквантовые коэффициенты диффузии). При этом в данной работе, следуя обычной постановке задачи [2, 8], мы пренебрегаем связью колебаний и вращений, которая может быть существенной при наличии колебательно-вращательных резонансов и требует особого рассмотрения.

1. Функция распределения в задаче $V-T$ -релаксации для небольшого термостата. Рассмотрим сначала колебательную релаксацию малой примеси двухатомных молекул — ангармонических осцилляторов в инертном газе. Система релаксационных уравнений в этом случае в приближении одноквантовых переходов имеет вид [8]

$$(1.1) \quad \dot{x}_n = K_{n+1, n} x_{n+1} - K_{n, n+1} x_n - K_{n, n-1} x_n + K_{n-1, n} x_{n-1} = K_n(x),$$

где x_n — заселенность n -го колебательного уровня; K_{mn} — скоростные коэффициенты, между которыми не предполагается выполнение принципа детального баланса (небольцмановский термостат).

Представим отношение заселенностей двух соседних уровней в виде

$$(1.2) \quad x_{n+1}(t)/x_n(t) = a_n \exp(-\varphi_n(t)),$$

где функции $\varphi_n(t)$ подлежат определению. Выберем коэффициенты a_n в виде $a_n = [(n+1)K_{n, n-1}]/[nK_{n+1, n}]$ с тем, чтобы иметь правильные предельные переходы в случае гармонических осцилляторов (ГО) ($K_{n+1, n} = (n+1)K_{10}$, $a_n = 1$) и в случае учета влияния ангармонизма в вероятностях переходов только на величину адиабатического фактора [2] ($K_{n+1, n} = (n+1)K_{10}\gamma^n$, $a_n = \gamma^{-1}$). Коэффициенты a_n и функции φ_n предполагаются плавно зависящими от n . С учетом (1.2) система (1.1) переписывается в виде

$$(1.3) \quad \dot{x}_n/x_n = [K_{n+1, n} a_n \exp(-\varphi_n) - K_{n, n-1}] [1 - R_{n, n+1} a_n^{-1} \exp(\varphi_n)] + \varepsilon_n, \\ \varepsilon_n \equiv K_{n, n-1} [R_{n-1, n} a_{n-1}^{-1} \exp(\varphi_{n-1}) - R_{n, n+1} a_n^{-1} \exp(\varphi_n)], \quad R_{nm} \equiv K_{nm}/K_{mn}.$$

При плавной зависимости a_n и φ_n от n величина $\varepsilon_n(t)$ мала при всех t ($\varepsilon_n(t) \ll 1$). Ищем приближенное решение системы (1.3) в виде

$$(1.4) \quad x_n \simeq z_n = C_n \left(\frac{K_{n, n-1}}{n} - a_n \frac{K_{n+1, n}}{n+1} e^{-\varphi_n} \right) e^{-n\varphi_n},$$

где C_n — произвольные константы. Подставляя (1.4) в (1.3) и пренебрегая величиной ε_n , находим уравнение для φ_n , которое решается в явном виде

$$(1.5) \quad e^{\varphi_n(t)} = \left[e^{-t/\tau_n} \left(1 - a_n R_{n+1, n} e^{-\varphi_n^0} \right) - a_n R_{n+1, n} \left(1 - e^{-\varphi_n^0} \right) \right] \times \\ \times \left[e^{-t/\tau_n} \left(1 - a_n R_{n+1, n} e^{-\varphi_n^0} \right) - \left(1 - e^{-\varphi_n^0} \right) \right]^{-1}, \quad \varphi_n^0 \equiv \varphi_n(0);$$

$$(1.6) \quad \tau_n^{-1} = n^{-1} K_{n, n-1} \left(1 - a_n^{-1} R_{n, n+1} \right).$$

Выражение (1.6) определяет, очевидно, время релаксации уровня n . Постоянные интегрирования φ_n^0 находятся из начальных условий $\varphi_n^0 = = \ln [a_n x_n(0)/x_{n+1}(0)]$, которые должны ставиться таким образом, чтобы обеспечить плавную зависимость a_n и φ_n от n . Легко убедиться, что в слу-

чае слабого ангармонизма этому условию удовлетворяют, например, распределения Больцмана, Тринора, Гордиеца и т. д.

Для нахождения поправки, связанной с учетом ε_n , представим решение системы (1.3) в виде

$$(1.7) \quad x_n(t) = z_n(t)/u_n(t).$$

Подставляя (1.7) в (1.3), получаем уравнение $\dot{u}_n + \varepsilon_n u_n = 0$, откуда

$$(1.8) \quad u_n(t) = \exp \left\{ -n \left[\ln \frac{\exp(\varphi_n) - 1}{a_n R_{n+1,n} - 1} - a_n^{-1} \ln \frac{\exp(\varphi_{n-1}) - 1}{a_{n-1} R_{n,n-1} - 1} \right] \right\}.$$

Рассмотрим свойства построенного решения. Для ГО с больцмановским распределением при $t = 0$ $a_n = 1$, $u_n(t) = 1$, $K_{n+1,n} = (n+1)K_{10}$, $\tau_n^{-1} = \tau_1^{-1} = K_{10} - K_{01}$, $C_n = N_A/K_{10}$, $\varphi_n(t) = \vartheta(t) = \hbar\omega/kT_V(t)$ и (1.4) дает известное решение для ГО $z_n(t) = N_A (1 - \exp(-\vartheta)) \exp(-n\vartheta)$, обладающее свойством канонической инвариантности. При $t \gg \tau_n$

$$e^{\varphi_n} \rightarrow a_n R_{n+1,n}, u_n \rightarrow 1, x_n(t) \rightarrow C_n a_n^{-n} [K_{n,n-1}/n - K_{n,n+1}/(n+1)] R_{n,n+1}^n.$$

Подставляя найденное x_n в условие квазистационарного распределения $x_{n+1}/x_n = R_{n,n+1}$, а также используя соотношение нормировки $\sum_n x_n = N_A$, можно определить все коэффициенты C_n и найти тем самым квазистационарную функцию распределения в случае не больцмановского термостата. В частности, для осциллятора Морзе в больцмановском термостате

$$(1.9) \quad R_{n,n+1} = \exp[-(E_{n+1} - E_n)/kT], E_n = nE_1 - n(n-1)\Delta E, \\ E_{n+1} - E_n = E_1 - 2n\Delta E, E_1 = \hbar(\omega - 2\omega x_e), \Delta E = \hbar\omega x_e$$

получаем распределение Больцмана

$$(1.10) \quad x_n = N_A Q^{-1} \exp(-E_n/kT), \quad Q = \sum_{n=0}^{n_0} \exp(-E_n/kT),$$

если C_n выбрать в виде $C_n = N_A Q^{-1} a_n^n \delta^{-n(n-1)} [K_{n,n-1}/n - K_{n,n+1}/(n+1)]^{-1}$, $\delta \equiv \exp(\Delta E/kT)$.

Приближенное решение (1.4) для САО, очевидно, не обладает свойством канонической инвариантности, характерным для ГО.

2. Уравнение для колебательной энергии. Определим среднюю колебательную энергию единицы объема газа

$$(2.1) \quad E_V(t) = \sum_{n=0}^{n_0} E_n x_n(t).$$

Выделим из величин K_{mn} множители, характерные для скоростных коэффициентов в случае ГО

$$(2.2) \quad K_{n+1,n} = (n+1)K_{10}A_n, K_{n,n+1} = (n+1)K_{01}B_n.$$

Дифференцируя (2.1) по t и используя (1.1), (1.9), (2.2), получаем

$$(2.3) \quad \dot{E}_V = - \sum_{n=0}^{n_0} x_n E_n (K_{10}A_{n-1} - K_{01}B_n) + K_{01}E_1 \sum_{n=0}^{n_0} B_n x_n + \\ + \Delta E \sum_{n=0}^{n_0} [K_{10}A_{n-1} x_n n (n-1) - K_{01}B_n x_n n (n+3)].$$

Вводя обозначения

$$(2.4) \quad \tau^{-1} \equiv \sum_{n=0}^{n_0} x_n E_n (K_{10}A_{n-1} - K_{01}B_n) / \sum_{n=0}^{n_0} x_n E_n,$$

$$E_V^0 \equiv \tau \sum_{n=0}^{n_0} x_n \left\{ E_1 K_{01} B_n + \Delta E \left[(n-1) K_{n,n-1} - \frac{n(n+3)}{n+1} K_{n,n+1} \right] \right\},$$

соотношение (2.3) можно записать в виде уравнения круковского типа

$$(2.5) \quad \dot{E}_V(t) = - \frac{E_V(t) - E_V^0(t)}{\tau(t)}.$$

В случае слабой временной зависимости величин τ и E_V^0 полученное уравнение описывает «быструю» релаксацию мгновенных значений плотности колебательной энергии к некоторому квазиравновесному значению. Для времени релаксации τ и квазиравновесной плотности энергии E_V^0 вместо (2.4) при этом могут быть получены более простые приближенные формулы. Рассмотрим несколько конкретных примеров.

А. Для ГО $\Delta E = 0$, $A_n = B_n = 1$ и (2.5) сводится к уравнению Ландау—Теллера [2,8] $\dot{E}_V = -(E_V - E_V^0)/\tau_\Gamma$, $\tau_\Gamma^{-1} = K_{10} - K_{01}$, $E_V^0 = E_1 \tau_\Gamma K_{01} N_A$.

Б. Учтем влияние ангармонизма в скоростных коэффициентах только на величину адиабатического фактора ($A_n = B_n = \gamma^n$) и будем пренебрегать неэквидистантностью спектра ($E_n \simeq nE_1$), а также отклонением x_n от бoльцмановского распределения (1.10). Для времени релаксации энергии получаем тогда приближенную формулу

$$(2.6) \quad \tau^{-1} = K_{10} (1 - \gamma e^{-\theta}) \left(\frac{1 - e^{-\theta}}{1 - \gamma e^{-\theta}} \right)^2, \quad \theta = \frac{\hbar\omega}{kT_V}, \quad \theta = \frac{\hbar\omega}{kT},$$

которая только множителем γ перед $e^{-\theta}$ отличается от выражения, полученного в [11].

В. Подставляя (2.2) в (1.6), получаем следующую компактную формулу для времени релаксации уровня n :

$$(2.7) \quad \tau_n^{-1} = K_{10} A_{n-1} - K_{01} B_n.$$

показывающую, что только ангармонические поправки определяют отличие времени релаксации уровня n от времени релаксации энергии в модели Ландау — Теллера. В частности, при $A_{n-1} \simeq B_n \simeq \gamma^n$ можно написать $\tau_n = \tau_\Gamma \gamma^{-n}$. Учитывая (2.7), (2.4), имеем

$$(2.8) \quad \tau^{-1} = \frac{\sum_{n=0}^{n_0} \tau_n^{-1} x_n E_n}{\sum_{n=0}^{n_0} x_n E_n},$$

т. е. обратное время релаксации энергии в системе САО есть среднее взвешенное от обратных времен релаксации отдельных уровней. В приближении $A_{n-1} \simeq B_n \simeq \gamma^n$ на основании (2.8) получаем формулу $\tau_a = \tau_\Gamma / \Gamma$, $\Gamma \equiv \sum \gamma^n x_n E_n / \sum x_n E_n$, не связанную в отличие от (2.6) с предположениями о характере спектра. Для функции E_V^0 можно использовать следующее приближенное выражение $E_V^0 \simeq E_V^0 / \bar{\Gamma} + \Delta E L / \Gamma = E_a^0$, $\bar{\Gamma} = \Gamma / \bar{B}$, где величина L подбирается из условия наилучшей аппроксимации рассматриваемой суммы. Таким образом, уравнение (2.5) можно записать в виде

$$(2.9) \quad \dot{E}_V = - \frac{E_V - E_a^0}{\tau_a}.$$

Формула (2.9) показывает, что, например, в условиях импульсной накачки система САО релаксирует быстрее и может накапливать больший запас колебательной энергии, чем система ГО.

3. $V - T$ -релаксация в системе САО при наличии положительного источника колебательно-возбужденных молекул. Рассмотрим теперь систему уравнений, описывающих $V - T$ -релаксацию малой примеси двухатомных молекул — ангармонических осцилляторов в небыльцмановском термостате при наличии положительного источника колебательно-возбужденных молекул с энергией E_m мощностью η :

$$(3.1) \quad \dot{x}_n = K_n(x) + \eta \delta_{nm},$$

где $\bar{K}_n(x)$ имеет тот же вид, что и в (1.4). Приближенное решение системы (3.1) на временах $0 \leq t \leq \tau^*$, где τ^* — время действия источника, для достаточно плавного начального распределения по аналогии с [10] можно записать в виде

$$(3.2) \quad x_n(t) \simeq z_n(t)/u_n(t) + t\eta x_n^0 + g_n(t).$$

Здесь z_n и u_n определяются соотношениями (1.4)—(1.6), (1.8); x_n^0 — нормированное на единицу квазистационарное распределение, определяемое из условия

$$(3.3) \quad K_n(x) = 0,$$

а $g_n(t)$ — функция возмущения, удовлетворяющая соотношению нормировки $\sum_n g_n(t) = 0$. Первое слагаемое в (3.2) описывает релаксацию начального распределения, обусловленную $V - T$ -процессами; второй член показывает, что увеличение заселенностей колебательных уровней, обусловленное действием источника, происходит за счет многократно рассеянных молекул, имеющих квазистационарное распределение; функция возмущения описывает перераспределение молекул по уровням вследствие совместного действия источника и $V - T$ -процессов.

На временах, много больших времени $V - T$ -релаксации (квазистационарный режим), решение (3.2) переходит в

$$(3.4) \quad x_n(t) = [N_A(0) + \eta t] x_n^0 + g_n \equiv \eta t x_n^0 + f_n,$$

где f_n не зависит от времени и нормирована следующим образом:

$$(3.5) \quad \sum_n f_n = N_A(0).$$

Для определения f_n имеем систему алгебраических уравнений, которая получается подстановкой (3.4) в (3.1) при условии (3.3), $K_n(f) = \eta x_n^0 - \eta \delta_{nm}$. Эту систему можно переписать в виде

$$(3.6) \quad f_n = R_{n-1,n} f_{n-1} + \eta(Q_{n-1} - \zeta_{nm})/K_{n,n-1},$$

$$Q_n = \sum_{l=0}^n x_l^0, \quad \zeta_{nm} = \begin{cases} 0, & n \leq m, \\ 1, & n > m. \end{cases}$$

Решение системы (3.6) после некоторых преобразований можно записать следующим образом:

$$(3.7) \quad f_n = f_0 x_n^0/x_0^0 + \sum_{l=1}^n b_{l-1} x_n^0/x_l^0 - \eta \zeta_{nm} \sum_{l=m+1}^n K_{l,l-1}^{-1} x_n^0/x_l^0,$$

где $b_l = \eta Q_l/K_{l+1,l}$, а f_0 определяется из условия нормировки (3.5):

$$(3.8) \quad f_0 = \left[N_A(0) - \sum_{n=1}^{n_0} \sum_{m=1}^n b_{m-1} x_n^0/x_m^0 + \eta \sum_{n=m+1}^{n_0} \sum_{l=m+1}^n K_{l,l-1}^{-1} x_n^0/x_l^0 \right] x_0^0.$$

Отметим, что в случае низких газовых температур $R_{n-1,n} \ll 1$ для всех n и решение (3.7), (3.8) приобретает вид

$$f_n \simeq \eta/K_{n,n-1}, \quad n \leq m; \quad f_n \approx \eta K_{n,m-1}^{-1} x_n^0/x_m^0 \equiv B(m) x_n^0, \quad n > m,$$

т. е., как и в случае системы ГО [12], моноэнергетический источник нарушает квазистационарное колебательное распределение в системе САО таким образом, что функция возмущения f_n имеет квазистационарный вид в области $n > m$ (с фиктивным полным числом частиц $B(m)$) и заметно отличается от квазистационарного распределения при $n \leq m$.

Уравнение для колебательной энергии в системе САО с δ -образным источником имеет вид (2.5), отличаясь от него только слагаемым ηE_m в правой части, где в определениях (2.4) следует использовать функцию распределения (3.2) либо квазистационарное распределение (3.4). Следует

отметить, что однокомпонентная система САО в отличие от малой примеси молекул в инертном газе характеризуется более сильной зависимостью времени релаксации от времени, поскольку в этом случае $\tau^{-1}(t) \sim N_A(t) = N_A(0) + \eta t$.

4. Колебательная релаксация в бинарной смеси САО. Будем обозначать заселенности колебательных уровней осцилляторов A и B буквами x и y соответственно. Тогда в приближении одноквантовых переходов система релаксационных уравнений для осциллятора A имеет вид [8]

$$(4.1) \quad \dot{x}_n = K_{n+1,n}^* x_{n+1} - K_{n,n+1}^* x_n - K_{n,n-1}^* x_n + K_{n-1,n}^* x_{n-1},$$

где

$$(4.2) \quad K_{n+1,n}^* = K_{n+1,n}(A) + \sum_m [K_{n+1,n}^{m,m+i}(A, A) x_m + K_{n+1,n}^{m,n+1}(A, B) y_m],$$

$$K_{n,n+1}^* = K_{n,n+1}(A) + \sum_m [K_{n,n+1}^{n+1,m}(A, A) x_{m+1} + K_{n,n+1}^{m+1,m}(A, B) y_{m+1}].$$

Соответствующие соотношения для осциллятора B получаются из (4.1), (4.2) заменой x на y и A на B .

Запишем скоростные коэффициенты для $V - V$ - и $V - V'$ -процессов в виде, аналогичном (2.2), выделив соответствующие гармонические множители

$$(4.3) \quad K_{n+1,n}^{m,m+i}(A, A) = (n+1)(m+1) K_{10}^{01}(A, A) C_n^m, \quad K_{n,n+1}^{m+1,m}(A, A) =$$

$$= (n+1)(m+1) K_{01}^{10}(A, A) D_n^m,$$

$$K_{n+1,n}^{m,m+i}(A, B) = (n+1)(m+1) K_{10}^{01}(A, B) E_n^m, \quad K_{n,n+1}^{m+1,m}(A, B) =$$

$$= (n+1)(m+1) K_{01}^{10}(A, B) F_n^m.$$

Определим далее следующие моменты функции распределения:

$$(4.4) \quad M_n^{AA} \equiv K_{10}^{01}(A, A) \sum_m (m+1) C_n^m x_m, \quad N_n^{AA} \equiv$$

$$\equiv K_{01}^{10}(A, A) \sum_m (m+1) D_n^m x_{m+1},$$

$$M_n^{AB} \equiv K_{10}^{01}(A, B) \sum_m (m+1) E_n^m y_m, \quad N_n^{AB} \equiv K_{01}^{10}(A, B) \sum_m (m+1) F_n^m y_{m+1}.$$

Напомним, что в гармоническом приближении все коэффициенты $C - F = 1$ и моменты M, N пропорциональны величинам $\alpha_{A,B}$, имеющим смысл средних запасов квантов в молекулах A, B . С учетом (4.2) — (4.4) система (4.1) записывается в виде

$$(4.5) \quad \dot{x}_n = (n+1) x_{n+1} G_n^A - n x_n G_{n-1}^A - (n+1) x_n H_n^A + n x_{n-1} H_{n-1}^A,$$

где

$$(4.6) \quad G_n^A = K_{10}(A) A_n + M_n^{AA} + M_n^{AB}, \quad H_n^A = K_{01}(A) B_n + N_n^{AA} + N_n^{AB}.$$

Аналогично записываются уравнения и для y_n .

Отметим, что для ГО соотношения (4.6) переходят в

$$G_n^A \rightarrow G^A \equiv K_{10}(A) + K_{10}^{01}(A, A) N_A (1 + \alpha_A) + K_{10}^{01}(A, B) N_B (1 + \alpha_B),$$

$$H_n^A \rightarrow H^A \equiv K_{01}(A) + K_{01}^{10}(A, A) N_A \alpha_A + K_{01}^{10}(A, B) N_B \alpha_B$$

(аналогичные выражения пишутся и для G_n^B, H_n^B). Для величин α_A, α_B в гармоническом приближении из (4.5) нетрудно получить нелинейные уравнения

$$(4.7) \quad \dot{\alpha}_A = -G^A \alpha_A + H^A (1 + \alpha_A),$$

$$\dot{\alpha}_B = -G^B \alpha_B + H^B (1 + \alpha_B),$$

которые можно привести к известной форме [2, 8]. Из этих уравнений, в частности, следует, что при $\tau_{VV} \ll \tau_{VV'} \ll \tau_{VT}$ на временах $t \approx \tau_{VV}$ $\dot{\alpha}_A = \dot{\alpha}_B = 0$, т. е. средние числа квантов являются интегралами движения.

Предположим теперь, что в ангармоническом приближении моменты $G_n^{A,B}, H_n^{A,B}$ можно считать медленными переменными. Тогда по аналогии с п. 1 в случае слабого отклонения от равновесия (т. е. в случае плавной зависимости a_n и φ_n от n) находим следующее решение системы (4.5):

$$(4.8) \quad x_n = z_n/u_n, \quad a_n = G_{n-1}^A/G_n^A, \quad z_n = C_n G_{n-1}^A (1 - e^{-\varphi_n^A}) e^{-n\varphi_n^A},$$

$$u_n = \exp \left\{ -n \left[\ln \frac{\exp(\varphi_n^A) - 1}{G_{n-1}^A/H_n^A - 1} - a_{n-1}^{-1} \ln \frac{\exp(\varphi_{n-1}^A) - 1}{G_{n-2}^A/H_{n-1}^A - 1} \right] \right\};$$

$$(4.9) \quad \varphi_n^A = \ln \left\{ \frac{e^{-t/\tau_n^A} (1 - G_{n-1}^A/H_n^A e^{-\varphi_n^{0A}}) - G_{n-1}^A/H_n^A (1 - e^{-\varphi_n^{0A}})}{e^{-t/\tau_n^A} (1 - G_{n-1}^A/H_n^A e^{-\varphi_n^{0A}}) - (1 - e^{-\varphi_n^{0A}})} \right\},$$

$$\tau_n^A = (G_{n-1}^A - H_n^A)^{-1}.$$

Вспоминая введенные выше обозначения, получаем

$$(4.10) \quad (\tau_n^A)^{-1} = [K_{10}(A) A_{n-1} - K_{01}(A) B_n] + [M_{n-1}^{AA} - N_n^{AA}] + \\ + [M_{n-1}^{AB} - N_n^{AB}] \equiv (\tau_{nVT}^A)^{-1} + (\tau_{nVV}^A)^{-1} + (\tau_{nVV'}^A)^{-1},$$

т. е. в рассматриваемом приближении полное обратное время релаксации есть сумма обратных времен $V - T$, $V - V$, $V - V'$ -релаксаций, что представляется правдоподобным. Учитывая теперь, что моменты G_n^A, G_n^B зависят от «медленного» времени, получаем полную систему уравнений для расчета функции распределения

$$(4.11) \quad x_n = \Phi(G_n^A, G_{n-1}^A, H_n^A, H_{n-1}^A), \quad y_n = \Phi(G_n^B, G_{n-1}^B; H_n^B, H_{n-1}^B), \\ \dot{G}_n^A = \varphi(G^A), \quad \dot{G}_n^B = \varphi(G^B),$$

где вид функции Φ дается соотношениями (4.8), (4.9), а функция $\varphi(G)$ определяется из (4.4)–(4.6). Отметим, что предложенное решение (4.8), (4.9) справедливо только в том случае, когда моменты $G_n^{A,B}$ являются медленно изменяющимися функциями по сравнению с самими заселенностями. Вид этих функций находится из уравнений (4.11).

При $t \ll \tau_n$ имеем из (4.8), (4.9) уравнение

$$(4.12) \quad e^{y_n^A} \rightarrow G_{n-1}^A/H_n^A, \quad \frac{x_{n+1}}{x_n} \rightarrow \frac{H_n^A}{G_n^A} = \frac{K_{01}(A) B_n + N_n^{AA} + N_n^{AB}}{K_{10}(A) A_n + M_n^{AA} + M_n^{AB}} \equiv \\ \equiv \frac{K_{n,n+1}^{*(A)}}{K_{n+1,n}^{*(A)}} \equiv \frac{x_{n+1}^0}{x_n^0},$$

определяющее общий вид квазистационарной функции распределения x_n^0 , которая реализуется при $t \gg \tau_n$ [8, 9]. Если при этом основную роль играют $V - T$ -процессы, т. е. $G_n^A \simeq K_{n+1,n}(A)$, $H_n(A) \simeq K_{n,n+1}(A)$, то из (4.12) получаем больцмановское распределение

$$(4.13) \quad x_n^0 = x_n^B = x_0^0 \exp(-E_n/kT),$$

справедливое при $n > n^{**}(T)$ [2]. Если $G_n^A \simeq M_n^{AA}$, $H_n^A \simeq N_n^{AA}$, т. е. основную роль играют $V - V$ -процессы, то из (4.12) получаем распределение Тринора [2]

$$(4.14) \quad x_n^0 = x_0^0 \exp(-\chi n - E_n/kT),$$

в котором величины x и x_0^0 определяются условиями нормировки и полным запасом колебательных квантов в начальный момент времени. Для ГО получаем в этом случае соотношение, определяющее колебательную температуру газа T_V^A [8]:

$$(4.15) \quad \exp\left(-\frac{\hbar\omega_A}{kT_V^A}\right) = \frac{\alpha_A}{1 + \alpha_A}.$$

Соотношения, аналогичные (4.13)–(4.15), пишутся и для осциллятора B . При одновременном учете $V - V$, $V - V'$, $V - T$ -процессов из (4.12) для системы САО получаются более сложные распределения типа Гордиеца [2], а для системы ГО — соотношения, определяющие релаксацию колебательных температур отдельных подсистем, которые мы здесь не будем приводить.

Отметим, что согласно (4.10) время релаксации уровня n определяется теперь наименьшим из времен τ_{nVT} , τ_{nVV} , $\tau_{nVV'}$, по истечении которого реализуется квазистационарное распределение, определяемое соотношением (4.12). Наше рассмотрение будет законным, очевидно, тогда, когда моменты $G_n^{A,B}$, $H_n^{A,B}$ мало изменяются на этом временном промежутке. Последнее будет справедливо, например, для малого начального запаса квантов; в этом случае изменение запаса квантов можно приближенно описать системой (4.7). В случае, когда моменты $G_n^{A,B}$, $H_n^{A,B}$ нельзя считать медленными переменными, получение нестационарных решений представляет собой более сложную задачу.

Таким образом, в приближении одноквантовых переходов удается проследить временную эволюцию плавных начальных распределений для произвольного вида скоростных коэффициентов. Найденные решения могут быть непосредственно использованы при построении уравнений динамики молекулярных газов в режиме замедленной релаксации. Исползованные здесь идеи применимы, по-видимому, и при рассмотрении вращательной релаксации, однако для изучения этого вопроса необходимы сведения о характере зависимости констант скоростей вращательного возбуждения от квантовых чисел.

Проведенный анализ является одним из альтернативных способов рассмотрения поуровневой кинетики по отношению к диффузионному приближению, сформулированному в достаточно общей форме в [3]. Сочетание этих двух подходов позволит расширить возможности аналитических методов исследования релаксационных явлений в молекулярных газах.

Дополнение. За время подготовки рукописи к печати в рамках изложенного в п. 1 метода авторами было получено более точное решение системы (1.1). А именно, если записать отношение двух соседних уровней в виде

$$(Д.1) \quad x_{n+1}(t)/x_n(t) = (K_{n,n+1}/K_{n+1,n})f_n(t) = b_n f_n(t),$$

где функции f_n подлежат определению, и подставить (Д.1) в (1.1), то получим

$$b_{n-1}(f_{n-1}\dot{x}_{n-1} + x_{n-1}\dot{f}_{n-1}) = [K_{n+1,n}b_n b_{n-1}f_n f_{n-1} - (K_{n,n+1} + K_{n,n-1})b_{n-1}f_{n-1} + K_{n-1,n}]x_{n-1}.$$

В силу системы (1.1) $\dot{x}_{n-1} = K_{n-1}(x)$. Таким образом, вновь используя (1.1) и (Д.1), после некоторых преобразований находим систему уравнений для функций f_n :

$$(Д.2) \quad \begin{aligned} \dot{f}_n &= (K_{n+1,n+2} - K_{n,n+1})(f_n - 1)(f_n - \beta_n) + \varepsilon_n, \\ \varepsilon_n(t) &= K_{n,n-1}(1 - f_n/f_{n-1}) - K_{n+1,n+2}f_n^2(1 - f_{n+1}/f_n), \\ \beta_n &= (K_{n+1,n} - K_{n,n-1})/(K_{n+1,n+2} - K_{n,n+1}). \end{aligned}$$

При плавной зависимости f_n от n величина $\varepsilon_n(t)$ мала при всех t . Пренебрегая этой величиной, находим решение системы (Д.2) в явном виде

$$(Д.3) \quad f_n(t) = \frac{e^{-t/\tau_n}(1-f_n^0)\beta_n + f_n^0 - \beta_n}{e^{-t/\tau_n}(1-f_n^0) + f_n^0 - \beta_n},$$

$$\tau_n^{-1} = K_{n+1,n} - K_{n+1,n+2} + K_{n,n+1} - K_{n,n-1}.$$

Постоянные интегрирования f_n^0 определяются по начальным данным с помощью (Д.4) $b_n f_n^0 = x_{n+1}(0)/x_n(0)$.

Заселенности x_n выражаются через найденные функции f_n с помощью n -кратного применения (Д.4):

$$(Д.4) \quad x_n(t) = x_0(t) \prod_{k=0}^{n-1} b_k f_k(t), \quad x_0(t) = N \left[1 + \sum_{n=1}^{n_0} \prod_{k=0}^{n-1} b_k f_k(t) \right]^{-1}.$$

Петрудно убедиться, что решение (Д.4) обладает всеми свойствами решения (1.5)–(1.8), применимо в отличие от последнего для менее плавных распределений и может быть использовано в п. 2–4.

ЛИТЕРАТУРА

1. Смит К., Томсон Р. Численное моделирование газовых лазеров. М.: Мир, 1981.
2. Горднеев Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980.
3. Дубровский Г. В. Упрощенные кинетические подходы к динамике структурного релаксирующего газа. — ЖТФ, 1982, т. 52, № 10.
4. Генералов Н. А., Куксенко Б. В. и др. Одновременное рассмотрение процессов колебательной релаксации и термической диссоциации двухатомных молекул. — Теор. и эксперим. химия, 1968, т. 4, № 3.
5. Hsu C. T., Maillie F. H. Vibrational relaxation of anharmonic oscillators with vibration-vibration and vibration-translation energy exchanges. — J. Chem. Phys., 1970, vol. 52, N 4.
6. Сафарян Н. М., Скребков О. В. О классическом (диффузионном) и квантово-механическом методах расчета кинетики VT-обмена и радиационной дезактивации двухатомных молекул. Препринт № 56. М.: Ин-т проблем механики АН СССР, 1975.
7. Найдис Г. В. Колебательно-поступательная релаксация ангармонических осцилляторов при низких температурах. — ПМТФ, 1976, № 2.
8. Никитин Е. Е., Осипов А. И. Колебательная релаксация в газах. — В кн.: Итоги науки и техники. Сер. Кинетика и катализ. Т. 4. М.: ВИНИТИ, 1977.
9. Железняк М. Б., Найдис Г. В. Распределение по колебательным уровням, скорости колебательной релаксации и диссоциации двухатомных молекул в неравновесных условиях. — ПМТФ, 1976, № 1.
10. Каланов Т. З., Осипов А. И., Панченко В. Я., Хабибуллаев П. К. Колебательная релаксация в газовых системах с источниками колебательно-возбужденных молекул. Ташкент: ФАН, 1981.
11. Лосев С. А., Шаталов О. П., Ялович М. С. О влиянии ангармонизма на время релаксации при адиабатическом возбуждении и дезактивации колебаний молекул. — ДАН СССР, 1970, т. 195, № 3.
12. Осипов А. И. О вероятности превращения колебательной энергии кислорода при столкновении с молекулой двуокиси азота. — ДАН СССР, 1961, т. 139, № 2.

Поступила 28/VI 1983 г.

УДК 536.71 : 532.529

ЗАТУХАНИЕ СИЛЬНЫХ УДАРНЫХ ВОЛН В ДВУХФАЗНЫХ И ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ

Л. В. Альтшулер, Б. С. Кругликов

(Москва)

1. Общие закономерности затухания ударных волн. Для многих направлений использования взрывных процессов существенны характеристики расходящихся ударных волн на разных расстояниях от очага энер-