ЖЭТФ, 2007, том 132, вып. 3 (9), стр. 579–588

СВЕТОИНДУЦИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ОДНОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА В КАПИЛЛЯРЕ

И. В. Чермянинов, В. Г. Черняк, Е. А. Вилисова*

Уральский государственный университет им. А. М. Горького
620083, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 14 февраля 2007 г.

Теоретически исследуется светоиндуцированный тепло- и массоперенос однокомпонентного атомарного газа в капилляре при произвольных числах Кнудсена. Анализируются поверхностный и столкновительный механизмы переноса, обусловленные соответственно различием коэффициентов аккомодации и сечений столкновений возбужденных и невозбужденных частиц. Для кинетических коэффициентов, характеризующих дрейф газа в капилляре и поток тепла, получены аналитические выражения при малых и больших числах Кнудсена. При промежуточных числах Кнудсена проведены численные расчеты. Получены частотные профили скорости дрейфа газа и теплового потока. Для случая неоднородного уширения линии поглощения обнаружена зависимость направления светоиндуцированных потоков однокомпонентного газа не только от знака, но и от величины отстройки частоты излучения от центра линии поглощения.

PACS: 51.10.+y

1. ВВЕДЕНИЕ

Явление светоиндуцированного дрейфа газа (СИД) было предсказано в работах [1, 2]. Частицы, поглощающие монохроматическое излучение селективно по скоростям и находящиеся в смеси с буферным газом, приобретают направленное движение — дрейф. Роль буферного газа может играть поверхность канала, с которой возбужденные и невозбужденные частицы взаимодействуют по-разному — поверхностный СИД. Явление поверхностного светоиндуцированного дрейфа газа изучалось экспериментально и теоретически в работах [3–11].

В работах [12, 13] предсказан так называемый столкновительный СИД однокомпонентного газа вблизи граничной поверхности. Этот механизм СИД в безграничном газе невозможен в соответствии с законом сохранения импульса. Природа столкновительного механизма СИД состоит в том, что вследствие различия сечений столкновений эффективные толщины кнудсеновских слоев (пристеночный слой толщиной порядка средней длины свободного пробега молекул) для потоков возбужденных и невозбужденных частиц различны. Пусть, например, сечение столкновений частиц, поглотивших излучение, увеличивается, т. е. средняя длина свободного пробега возбужденных частиц меньше, чем у невозбужденных частиц. При этом эффективная толщина кнудсеновского слоя для макроскопического потока возбужденных частиц будет меньше, чем для противонаправленного потока невозбужденных частиц газа. В результате эти потоки не компенсируют друг друга, и газ как целое смещается вдоль граничной поверхности в сторону макроскопического движения невозбужденных частиц.

СИД однокомпонентного газа в капилляре изучался в работах [4, 5, 14, 15]. Поверхностный СИД исследовался в режиме со скольжением [4] и в свободномолекулярном режиме [5]. В работах [14, 15] рассматривался поверхностный и столкновительный СИД однокомпонентного газа в капилляре при произвольных числах Кнудсена (Kn — отношение средней длины свободного пробега молекул к радиусу капилляра). Расчет основан на решении системы кинетических уравнений с аппроксимирующими интегралами столкновений второго порядка [16]. Особенно-

*E-mail: vladimir.chernyak@usu.ru

стью этих уравнений является то, что они удовлетворительно описывают либо движение газа, либо тепловой поток. Для описания совместного тепломассопереноса необходимо использовать кинетические модели более высокого порядка.

В данной работе рассматривается не только дрейф газа в капилляре, но и светоиндуцированный теплоперенос (СИТ). В отличие от работ [14, 15], здесь используются кинетические уравнения с аппроксимирующими интегралами столкновений третьего порядка, которые включают в качестве макропараметров скорость газа, тензор напряжений и поток тепла [16]. Такой подход позволит рассчитать СИТ в капилляре при произвольных числах Kn и количественно уточнить полученные ранее результаты [14, 15] для скорости СИД. При использовании кинетической модели третьего порядка можно прогнозировать новые результаты для частотных профилей дрейфа газа и теплового потока.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим стационарное движение однокомпонентного газа в капилляре радиуса r_0, обусловленное резонансным взаимодействием газа с излучением, направленным вдоль оси капилляра z. Частицы газа предполагаются двухуровневыми, т. е. они могут находиться либо в основном состоянии n, либо в возбужденном m. Частота ω монохроматического излучения отстроена от центра линии поглощения ω_{mn} на величину $\Omega = \omega - \omega_{mn} \ll \omega$. Вследствие эффекта Доплера с излучением взаимодействуют лишь те частицы, проекции скорости $\mathbf{v}$ которых на направление волнового вектора $\mathbf{k}$ близки к резонансному значению v_0, удовлетворяющему условию $kv_0 = \Omega$. Поглотившие излучение частицы изменяют свои транспортные свойства, в частности, сечение столкновений. Тогда газ можно рассматривать как бинарную смесь, в которой частицы имеют одинаковые массы, но различные сечения взаимодействия. При этом обмен частицами между компонентами возможен в результате радиационного распада возбужденного уровня, столкновительных и индуцированных переходов.

В распределениях возбужденных f_m и невозбужденных f_n частиц по скоростям вблизи резонансных значений $v_0 = \Omega/k$ возникают соответственно пик и провал Беннета [17]. При $\Omega \neq 0$ эти распределения асимметричны относительно $v_z = 0$. Таким образом, коллинеарно оси z существуют противоположно направленные макроскопические потоки возбужденных I_m и невозбужденных I_n частиц, а также соответствующие потоки тепла Q_m и Q_n. Вследствие различия в характере взаимодействия возбужденных и невозбужденных частиц с поверхностью капилляра и между собой потоки возбужденных и невозбужденных частиц оказываются нескомпенсированными: возникают дрейф газа вдоль капилляра (СИД): $I = I_m + I_n$ и поток тепла (СИТ): $Q = Q_m + Q_n$.

При стационарных условиях в двухуровневом приближении функции распределения f_n и f_m удовлетворяют следующей системе кинетических уравнений [17]:

$$\begin{gathered}
\mathbf{v}\nabla f_n = -\frac{1}{2}\chi(\mathbf{v})\Gamma_m(f_n - f_m) + \Gamma_m f_m + S_n, \\
\mathbf{v}\nabla f_m = \frac{1}{2}\chi(\mathbf{v})\Gamma_m(f_n - f_m) - \Gamma_m f_m + S_m, \\
\chi(\mathbf{v}) = \frac{4|G_{mn}|^2\Gamma}{\Gamma_m\left[\Gamma^2 + (\Omega - \mathbf{k}\cdot\mathbf{v})^2\right]}, \quad G_{mn} = \frac{Ed_{mn}}{2\hbar}.
\end{gathered} \tag{1}$$

Здесь Γ_m — постоянная радиационного распада возбужденного уровня, Γ — однородная полуширина линии поглощения на переходе m–n, S_n, S_m — интегралы столкновений, E — амплитуда электрического поля, d_{mn} — дипольный момент перехода m–n, $\hbar$ — постоянная Планка, $\mathbf{k}$ — волновой вектор, G_{mn} — частота Раби.

Параметр насыщения $\chi(\mathbf{v})$, характеризующий вероятность индуцированных переходов, пропорционален интенсивности излучения и, следовательно, в общем случае зависит от продольной координаты z вследствие поглощения излучения газом. Однако в случае оптически тонкой среды или на сравнительно небольших расстояниях величину $\chi(\mathbf{v})$ в первом приближении можно считать не зависящей от координаты z. Интенсивность излучения по сечению капилляра предполагается однородной. Длина капилляра L много больше его радиуса r_0, так что концевыми искажениями профилей газовых потоков можно пренебречь. При этих условиях функции распределения f_n и f_m не зависят от продольной координаты z.

Примем приближение упругих столкновений частиц газа со стенкой капилляра. При этом в качестве граничных условий для уравнений (1) выберем модель зеркально-диффузного отражения, согласно которой доля $1 - \varepsilon_i$ частиц i-го сорта отражается зеркально, а доля ε_i — диффузно с максвелловским распределением по скоростям:

$$\begin{gathered}
f_i^+(\mathbf{v}) = \varepsilon_i f_i^s(\mathbf{v}) + (1 - \varepsilon_i) f_i^-(\mathbf{v} - 2(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\mathbf{n}), \\
\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} > 0,
\end{gathered} \tag{2}$$

$$f_i^s = \frac{n_i^s}{\pi^{3/2}\bar{v}^3}\exp\left(-\frac{v}{\bar{v}}\right)^2, \quad \bar{v} = \left(\frac{2k_BT}{m_0}\right)^{1/2}, \quad i = m, n. \tag{3}$$

Здесь $\mathbf{n}$ — внутренняя нормаль к поверхности капилляра; верхние индексы «$+$», «s» и «$-$» относятся соответственно к отраженным, испущенным диффузно и налетающим на поверхность частицам; n_i^s — числовая плотность диффузно рассеянных частиц в i-м состоянии, m_0 — масса частицы, k_B — постоянная Больцмана, T — средняя температура системы, $\bar{v}$ — средняя скорость теплового движения частиц.

Если параметр насыщения в среднем мал ($\chi \ll 1$), что ограничивает возможные значения интенсивности излучения, то состояние каждого компонента газа является слабонеравновесным. В этом случае функции распределения скоростей могут быть представлены в виде возмущенных максвелловских распределений:

$$f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_{i0}\left[1 + h_i(\mathbf{r}, \mathbf{v})\right], \quad |h_i(\mathbf{r}, \mathbf{v})| \ll 1, \tag{4}$$

где

$$f_{i0} = \frac{n_{i0}}{\pi^{3/2}\bar{v}^3}\exp\left(-\frac{v}{\bar{v}}\right)^2, \quad i = n, m,$$

n_{i0} — равновесная числовая плотность частиц в i-м состоянии, h_i — неизвестные функции возмущения, $\mathbf{r}$ — радиус-вектор в плоскости, перпендикулярной оси z.

Предположим, что межчастичные столкновения являются упругими, а каждая из частот γ_{ii} и γ_{ij} (γ_{ii}, γ_{ij} — частоты столкновений частиц i-го сорта соответственно между собой и с частицами j-го сорта) много больше постоянной радиационного распада возбужденного уровня Γ_m. При этом в теории появляется малый параметр

$$\Gamma_m^{(i)} = \frac{\Gamma_m}{\gamma_{ii} + \gamma_{ij}} \ll 1, \quad i, j = n, m \quad (i \neq j). \tag{5}$$

Неравенство (5) накладывает некоторое ограничение на минимальное давление газа в капилляре.

С учетом принятых предположений кинетические уравнения (1), линеаризованные относительно функций возмущения h_i (4) и параметров $\Gamma_m^{(i)}$ (5), с использованием аппроксимирующих интегралов столкновений третьего порядка в форме Маккормака [16] после приведения к безразмерному виду записываются как

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_\perp \cdot \frac{\partial h_i}{\partial \mathbf{R}} + \delta_i h_i = c_z\delta_i\Bigg\{&\frac{\Gamma_m^{(i)}\chi(\mathbf{v})}{2}\left(\frac{n_{j0}}{n_{i0}} - 1\right)\frac{1}{c_z} + \\
&+ 2\left[u_i - \varphi_{ij}^{(1)}(u_i - u_j) - \varphi_{ij}^{(2)}(H_i - H_j)\right] + \\
&+ 4c_r\left[(1 - \varphi_{ii}^{(3)} + \varphi_{ii}^{(4)} - \varphi_{ij}^{(3)})\pi_{irz} + \varphi_{ij}^{(4)}\pi_{jrz}\right] + \\
&+ \frac{4}{5}\left(c^2 - \frac{5}{2}\right)\left[\left(1 - \varphi_{ii}^{(5)} + \varphi_{ii}^{(6)} - \varphi_{ij}^{(5)}\right)H_i + \right. \\
&\left. + \varphi_{ij}^{(6)}H_j - \frac{5}{2}(u_i - u_j)\varphi_{ij}^{(2)}\right]\Bigg\},
\end{aligned} \tag{6}$$

где

$$\begin{aligned}
&\mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{\bar{v}}, \quad c_\perp^2 = c_r^2 + c_\theta^2, \quad c^2 = c_\perp^2 + c_z^2, \\
&\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}}{r_0}, \quad \delta_i = \frac{r_0}{\bar{v}}(\gamma_{ii} + \gamma_{ij}), \\
&\varphi_{ij}^{(n)} = \frac{\nu_{ij}^{(n)}}{\gamma_{ii} + \gamma_{ij}}, \quad \varphi_{ii}^{(n)} = \frac{\nu_{ii}^{(n)}}{\gamma_{ii} + \gamma_{ij}}, \\
&u_i = \frac{U_i}{\bar{v}} = \pi^{-3/2}\int \exp(-c^2)c_z h_i d\mathbf{c}, \\
&\pi_{irz} = \frac{P_{irz}}{2p_i} = \pi^{-3/2}\int \exp(-c^2)c_r c_z h_i d\mathbf{c}, \\
&H_i = \frac{q_i}{p_i\bar{v}} = \pi^{-3/2}\int \exp(-c^2)c_z\left(c^2 - \frac{5}{2}\right)h_i\, d\mathbf{c}, \\
&i, j = n, m, \quad i \neq j.
\end{aligned} \tag{7}$$

Здесь $\mathbf{R}$, $\mathbf{c}_\perp$ — двумерные безразмерные векторы, лежащие в плоскости, перпендикулярной оси z; δ_i — параметр разреженности газа, обратно пропорциональный числу Kn; U_i, P_{irz}, q_i, p_i — соответственно макроскопическая скорость, касательное напряжение, тепловой поток и давление газа для i-го компонента смеси. Выражения для частот $\varphi_{ij}^{(n)}$, зависящие от вида потенциала межмолекулярных взаимодействий, приведены в работе [16].

Граничные условия (2) для функций возмущения h_i с учетом линеаризации (4) принимают вид:

$$h_i^+(\mathbf{R}_0, \mathbf{c}) = (1 - \varepsilon_i)h_i^-(\mathbf{R}_0, \mathbf{c}) + \varepsilon_i\left(\frac{n_i^s - n_{i0}}{n_{i0}}\right), \tag{8}$$

$$\mathbf{R}_0 = \frac{\mathbf{r}_0}{r_0}, \quad |\mathbf{R}_0| = 1, \quad i = m, n.$$

Второе слагаемое в правой части выражения (8) не зависит от молекулярных скоростей и, следовательно, не дает вклада в макроскопическую скорость, тензор напряжений и поток тепла (7). Поэтому в дальнейшем его можно опустить.

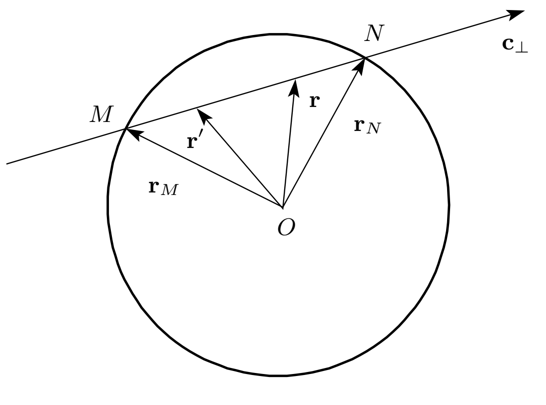

Рис. 1. Схема интегрирования вдоль направления скорости частиц $\mathbf{c}_\perp$

3. ИНТЕГРАЛЬНО-МОМЕНТНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Получим систему интегральных уравнений для макроскопических скоростей, напряжений и потоков тепла, связанных с частицами газа в основном и возбужденном состояниях. Воспользуемся для этого формализмом, который использовался ранее в работе [14]. Кинетические уравнения (6) с учетом граничного условия (8) проинтегрируем вдоль некоторого направления вектора скорости $\mathbf{c}_\perp$ (рис. 1), полагая макроскопические величины в модельном интеграле столкновений известными. Полученные выражения для функций возмущения h_i подставим в соотношения (7). В результате получим систему интегрально-моментных уравнений для макроскопической скорости, касательного напряжения и потока тепла для возбужденных ($i = m$) и невозбужденных ($i = n$) частиц:

$$u_i = \frac{\delta_i}{\pi}\iint\limits_\Sigma \{(\psi_1 + A_i\chi_1)J_0(t) + \psi_2 w_{R'} J_1(t) + \psi_3\,[J_2(t) - J_0(t)]\}\,\frac{d\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|} + \frac{\delta_i}{\pi}\iint\limits_\Sigma \{(\psi_1 + A_i\chi_1)K_0 + \psi_2 w_{R_N} K_1 + \psi_3\,[K_2 - K_0]\}\left(-\frac{\mathbf{R}_M\mathbf{R}}{R^2}\right)\frac{d\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}'-\mathbf{R}_N|}, \quad (9)$$

$$\pi_{irz} = \frac{\delta_i}{\pi}\iint\limits_\Sigma \{(\psi_1 + A_i\chi_1)w_R J_1(t) + \psi_2 w_{R'} w_R J_2(t) + \psi_3 w_R\,[J_3(t) - J_1(t)]\}\,\frac{d\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|} + \frac{\delta_i}{\pi}\iint\limits_\Sigma \{(\psi_1 + A_i\chi_1)w_R K_1 + \psi_2 w_{R_N} w_R K_2 + \psi_3 w_R\,[K_3 - K_1]\}\left(-\frac{\mathbf{R}_M\mathbf{R}}{R^2}\right)\frac{d\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}'-\mathbf{R}_N|}, \quad (10)$$

$$H_i = \frac{\delta_i}{\pi}\iint\limits_\Sigma \left\{A_i\left[\left(J_2(t) - \frac{5}{2}J_0(t)\right)\chi_1 + \chi_3 J_0(t)\right] + \psi_1\,[J_2(t) - J_0(t)] + \psi_2 w_{R'}\,[J_3(t) - J_1(t)] + \psi_3\left[J_4(t) - 2J_2(t) + \frac{5}{2}J_0(t)\right]\right\}\frac{d\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|} + \frac{\delta_i}{\pi}\iint\limits_\Sigma \left\{A_i\left[\left(K_2 - \frac{5}{2}K_0\right)\chi_1 + \chi_3 K_0\right] + \psi_1(K_2 - K_0) + \psi_2 w_{R_N}(K_3 - K_1) + \psi_3\left(K_4 - 2K_2 + \frac{5}{2}K_0\right)\right\} \times \left(-\frac{\mathbf{R}_M\mathbf{R}}{R^2}\right)\frac{d\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}'-\mathbf{R}_N|}. \quad (11)$$

Здесь

$$\chi_k = \int\limits_{-\infty}^{\infty} c_z^k \chi(c_z)\exp(-c_z^2)\,dc_z, \quad (12)$$

$$\psi_1 = u_i - \varphi_{ij}^{(1)}(u_i - u_j) - \varphi_{ij}^{(2)}(H_i - H_j),$$

$$\psi_2 = 2\left[\left(1 - \varphi_{ii}^{(3)} + \varphi_{ii}^{(4)} - \varphi_{ij}^{(3)}\right)\pi_{irz} + \varphi_{ij}^{(4)}\pi_{jrz}\right],$$

$$\psi_3 = \frac{2}{5}\left[\left(1 + \varphi_{ii}^{(5)} - \varphi_{ii}^{(6)} - \varphi_{ij}^{(5)}\right)H_i + \varphi_{ij}^{(6)}H_j - \frac{5}{2}(u_i - u_j)\varphi_{ij}^{(2)}\right],$$

$$A_i = \frac{\Gamma_m^{(i)}}{2\sqrt{\pi}}\left(\frac{n_{j0}}{n_{i0}} - 1\right),$$

$$J_n(t) = \int\limits_0^\infty x^n \exp\left(-x^2 - \frac{t}{x}\right)dx,$$

$$\mathbf{w} = \frac{\mathbf{R}-\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|}, \quad w_R = \mathbf{w}\cdot\frac{\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|}, \quad w_{R'} = \mathbf{w}\cdot\frac{\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}'|},$$

$$\mathbf{w}_N = \frac{\mathbf{R}_N-\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}_N-\mathbf{R}'|}, \quad w_{R_N} = \mathbf{w}_N\cdot\frac{\mathbf{R}'}{|\mathbf{R}'|},$$

$$K_n(\mathbf{R},\mathbf{R}',\varepsilon_i) = \\ = \int_0^\infty \frac{(1-\varepsilon_i)\exp\left[-\dfrac{\delta_i}{c}|\mathbf{R}_M-\mathbf{R}|\right]}{1-(1-\varepsilon_i)\exp\left[-\dfrac{\delta_i}{c}|\mathbf{R}_M-\mathbf{R}_N|\right]} c^n \times \\ \times \exp\left(-c^2-\frac{\delta_i}{c}|\mathbf{R}'-\mathbf{R}_N|\right) dc.$$

Аргументом трансцендентных функций $J_n(t)$ [18] в уравнениях (9)–(11) является $t = \delta_i|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|$, интегрирование проводится по площади поперечного сечения капилляра Σ.

Для вычисления величин χ_1 и χ_3 удобно воспользоваться плазменной функцией, численные значения которой табулированы в работе [19]. В типичном для газов случае неоднородного уширения ($\Gamma \ll k\bar{v}$) выражения для χ_k могут быть представлены в виде

$$\chi_k = \frac{4\pi}{k\bar{v}}\left(\frac{\Omega}{k\bar{v}}\right)^k \frac{|G_{mn}|^2}{\Gamma_m}\exp\left[-\left(\frac{\Omega}{k\bar{v}}\right)^2\right]. \tag{13}$$

Для случая однородного уширения ($|\Omega|$, $\Gamma \gg k\bar{v}$) имеем $\chi_3 = 1.5\chi_1$, причем

$$\chi_1 = \frac{4\sqrt{\pi}\,\Omega k\bar{v}\Gamma}{\Gamma_m}\left(\frac{|G_{mn}|}{\Omega^2+\Gamma^2}\right)^2. \tag{14}$$

Уравнения (9)–(11) определяют локальные значения макроскопических величин. Практический интерес представляют числовой поток (СИД) и поток тепла (СИТ), усредненные по сечению капилляра:

$$I = n\langle U\rangle = I_n + I_m = 2\bar{v}\int_0^1 (n_n u_n + n_m u_m) R\,dR, \tag{15}$$

$$Q = \langle q_n\rangle + \langle q_m\rangle = \\ = 2k_B T\bar{v}\int_0^1 (n_n H_n + n_m H_m) R\,dR. \tag{16}$$

Для численных расчетов удобно ввести безразмерные величины G, $\tilde{G}$ и S, $\tilde{S}$, связанные с размерными потоками следующими соотношениями:

$$I = \frac{n r_0 \Gamma_m}{2\sqrt{\pi}}\left(G\chi_1 + \tilde{G}\chi_3\right), \\ Q = \frac{p r_0 \Gamma_m}{2\sqrt{\pi}}\left(S\chi_1 + \tilde{S}\chi_3\right). \tag{17}$$

Кинетические коэффициенты G, $\tilde{G}$, S, $\tilde{S}$ в общем случае зависят от параметра разреженности δ_n, коэффициентов зеркально-диффузного отражения ε_i, кинетических сечений столкновений, а также от параметров модельного потенциала молекулярных взаимодействий.

4. РЕШЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНО-МОМЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ

Для определения потоков (15), (16) необходимо решить систему интегрально-моментных уравнений (9)–(11), которые являются уравнениями фредгольмовского типа второго рода. Воспользуемся методом Бубнова–Галеркина [20], основное достоинство которого состоит в том, что он позволяет получать достаточно точные значения усредненных по сечению капилляра потоков (15), (16), не определяя при этом точную зависимость макроскопических величин от радиальной координаты R.

Выберем последовательность координатных функций $(1, R, R^2, \ldots, R^k, \ldots)$ и представим неизвестные макроскопические величины в уравнениях (9)–(11) в виде разложений в степенные ряды по этим функциям. В L-приближении с учетом симметрии задачи примем:

$$u_i^L = \sum_{k=0}^{L-1} a_k^{(i)} R^{2k}, \quad \pi_{irz}^L = \sum_{k=1}^{L-1} b_k^{(i)} R^{2k-1}, \\ H_i^L = \sum_{k=1}^{L-1} c_k^{(i)} R^{2(k-1)}. \tag{18}$$

Для определения коэффициентов разложений $a_k^{(i)}$, $b_k^{(i)}$, $c_k^{(i)}$ аппроксимации (18) необходимо подставить в систему уравнений (9)–(11) и потребовать ортогональность полученных соотношений к выбранным базовым функциям. Условие ортогональности двух любых функций f и g имеет вид

$$(f,g) = 2\pi\int_0^1 f(R)g(R)R\,dR = 0. \tag{19}$$

В работе [15] показано, что уже второе приближение ($L = 2$) обеспечивает удовлетворительную точность результатов во всем диапазоне чисел Kn. Поэтому проведем расчеты во втором приближении ($L = 2$).

С целью сокращения количества варьируемых параметров и упрощения численных расчетов ограничимся приближением малого различия эффективных диаметров возбужденных σ_m и невозбужденных σ_n частиц [21, 22], а также предположением, подтвержденным экспериментально [23], о почти диффузном рассеянии частиц на поверхности капилляра. Введем два малых параметра:

$$\left|\frac{\Delta\sigma}{\sigma_n}\right| = \left|\frac{\sigma_m - \sigma_n}{\sigma_n}\right| \ll 1, \qquad 1 - \varepsilon_i \ll 1, \quad i = m, n. \tag{20}$$

В линейном приближении по этим параметрам безразмерные коэффициенты уравнений (17) запишутся в виде

$$\begin{gathered} G = G_1\Delta\varepsilon + G_2\frac{\Delta\sigma}{\sigma_n}, \quad \tilde{G} = G_3\Delta\varepsilon + G_4\frac{\Delta\sigma}{\sigma_n}, \\ S = S_1\Delta\varepsilon + S_2\frac{\Delta\sigma}{\sigma_n}, \quad \tilde{S} = S_3\Delta\varepsilon + S_4\frac{\Delta\sigma}{\sigma_n}, \\ \Delta\varepsilon = \varepsilon_n - \varepsilon_m. \end{gathered} \tag{21}$$

Тогда безразмерные кинетические коэффициенты G_1, G_3, S_1, S_3 и G_2, G_4, S_2, S_4, характеризующие вклады в величины СИД и СИТ соответственно поверхностного и столкновительного механизмов, зависят только от параметра разреженности $\delta = \delta_n$.

Если эффективную частоту столкновений γ_{nn} выбрать по аналогии с моделью БГК (Бхатнагара–Гросса–Крука) в виде $\gamma_{nn} = p/\eta$, а коэффициент динамической вязкости газа положить равным $\eta = \rho\bar{v}l/\sqrt{\pi}$ (l — средняя длина свободного пробега молекул, ρ — плотность газа), то параметр разреженности δ будет связан с числом Kn соотношением

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2\mathrm{Kn}}, \quad \mathrm{Kn} = \frac{l}{r_0}. \tag{22}$$

При промежуточных числах Kn был проведен расчет кинетических коэффициентов для молекулярной модели твердых сфер. Результаты показаны на рис. 2–6. В почти свободномолекулярном режиме ($\delta \ll 1$) и режиме со скольжением ($\delta \gg 1$) получены аналитические выражения для этих коэффициентов. В случае почти свободномолекулярного режима ($\delta \ll 1$) они равны:

$$\begin{gathered} G_1 = \frac{16}{3\sqrt{\pi}} + 6\delta\ln\delta + 3.24\delta + \ldots, \\ G_2 = \delta\ln\delta + 0.6158\delta + \ldots, \\ G_3 = -0.438\delta + \ldots, \\ G_4 = -0.139\delta + \ldots, \\ S_1 = -\frac{32}{3\sqrt{\pi}} - 15\delta\ln\delta - 11.1\delta + \ldots, \\ S_2 = -\frac{5}{2}\delta\ln\delta - 2.039\delta + \ldots, \\ S_3 = G_1, \quad S_4 = G_2. \end{gathered} \tag{23}$$

В случае режима со скольжением ($\delta \gg 1$) коэффициенты равны:

$$\begin{gathered} G_1 = \frac{1}{\varphi_{nn}^{(1)}}\,\frac{1 + \frac{3}{4}\alpha_1}{1 - \frac{5}{2}\alpha_1\alpha_2}\,\frac{1}{\delta} + \ldots, \\ G_2 = \frac{1}{2\varphi_{nn}^{(1)}}\,\frac{\left(1 + \frac{1}{2}\alpha_1\right)(1 - \alpha_3)}{1 - \frac{5}{2}\alpha_1\alpha_2}\,\frac{1}{\delta} + \ldots, \end{gathered} \tag{24}$$

$$\begin{gathered} G_3 = -\frac{13}{8\varphi_{nn}^{(1)}}\,\frac{\alpha_1}{1 - \frac{5}{2}\alpha_1\alpha_2}\,\frac{1}{\delta} + \ldots, \\ G_4 = -\frac{7}{4\varphi_{nn}^{(1)}}\,\frac{\alpha_1(1 - \alpha_3)}{1 - \frac{5}{2}\alpha_1\alpha_2}\,\frac{1}{\delta} + \ldots, \end{gathered} \tag{25}$$

$$\begin{gathered} S_2 = \frac{1}{2\varphi_{nn}^{(1)}}\,\frac{5\alpha_1 + 3\alpha_4}{1 - \frac{5}{2}\alpha_1\alpha_2}\,\frac{1}{\delta} + \ldots, \\ S_4 = -\frac{1}{\varphi_{nn}^{(1)}}\,\frac{\alpha_4}{1 - \frac{5}{2}\alpha_1\alpha_2}\,\frac{1}{\delta} + \ldots, \end{gathered} \tag{26}$$

$$S_1 = O(\delta^{-2}), \quad S_3 = O(\delta^{-2}), \tag{27}$$

$$\alpha_1 = \frac{\nu_{nn}^{(2)}}{\nu_{nn}^{(5)}}, \quad \alpha_2 = \frac{\nu_{nn}^{(2)}}{\nu_{nn}^{(1)}}, \quad \alpha_3 = \frac{\nu_{nn}^{(4)}}{\nu_{nn}^{(3)}}, \quad \alpha_4 = \frac{\nu_{nn}^{(1)}}{\nu_{nn}^{(5)}}.$$

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Решение кинетических уравнений (6) подтверждает качественный вывод о том, что СИД однокомпонентного газа возможен только в ограниченных системах, в то время как СИТ имеет место и в безграничном газе. С учетом выражений (26) в гидродинамическом режиме ($\delta \to \infty$) получаем следующую формулу для плотности теплового потока:

$$Q = \frac{p\bar{v}\Gamma_m}{2\sqrt{\pi}}\,\frac{\nu_{nn}^{(1)}\left(\chi_3 - \frac{3}{2}\chi_1\right) - \frac{5}{2}\nu_{nn}^{(2)}\chi_1}{\nu_{nn}^{(1)}\nu_{nn}^{(5)} - \frac{5}{2}\nu_{nn}^{(2)}\nu_{nn}^{(2)}}\,\frac{\Delta\sigma}{\sigma_n}. \tag{28}$$

Заметим, что точно такое же выражение получается для плотности теплового потока из решения кинетического уравнения для безграничного пространственно-однородного газа.

Если пренебречь членами, пропорциональными частоте $\nu_{nn}^{(2)}$ (для модели твердых сфер $\alpha_1 \approx 0.07$ и $\alpha_2 \approx 0.1$), то в случае типичного для разреженных

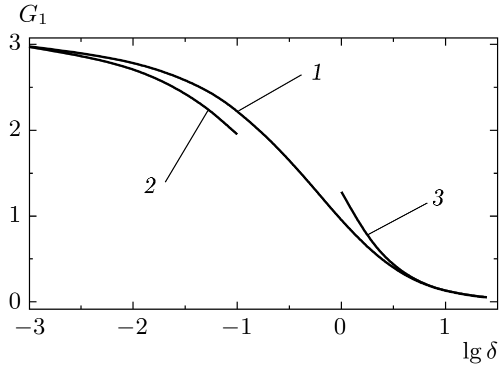

Рис. 2. Зависимости кинетического коэффициента G_1 от параметра разреженности δ: *1* — численный расчет, *2* — расчет по формулам (23), *3* — по формулам (24)

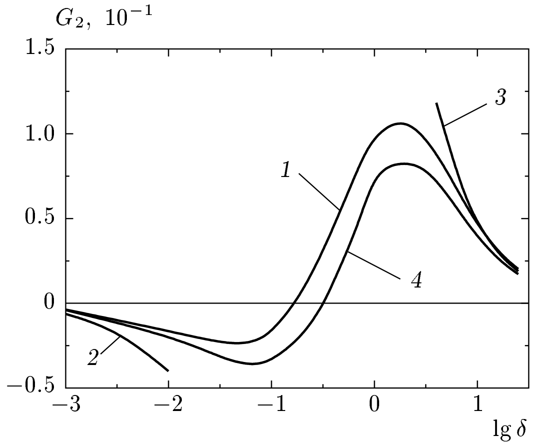

Рис. 3. Зависимости кинетического коэффициента G_2 от параметра разреженности δ: *1* — численный расчет, *2* — расчет по формулам (23), *3* — по формулам (24), *4* — результат работы [14]

газов неоднородного уширения ($\Gamma \ll k\bar{v}$) выражение (28) упрощается:

$$Q = \frac{2\sqrt{\pi}\, p\bar{v}\Omega}{\nu_{nn}^{(5)}} \left(\frac{|G_{mn}|}{k\bar{v}}\right)^2 \times \\ \times \left[\frac{3}{2} - \left(\frac{\Omega}{k\bar{v}}\right)^2\right] \frac{\Delta\sigma}{\sigma_n} \exp\left[-\left(\frac{\Omega}{k\bar{v}}\right)^2\right]. \quad (29)$$

В случае однородного уширения ($\Gamma \gg k\bar{v}$) имеем $\chi_3 = 1.5\chi_1$ и, следовательно, СИТ является эффектом второго порядка, величина которого пропорциональна частоте $\nu_{ij}^{(2)}$ (порядка эффекта Дюфура). Отсюда следует, что аппроксимирующий интеграл столкновений второго порядка [16], который не содержит члены, пропорциональные $\nu_{ij}^{(2)}$, не дает корректного описания явления СИТ. Более того, из решения кинетической модели второго порядка следует, что при однородном уширении явления СИТ в безграничном газе не существует.

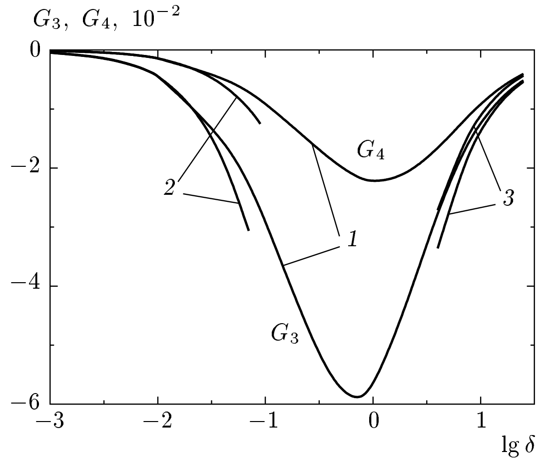

Рис. 4. Зависимости кинетических коэффициентов G_3 и G_4 от параметра разреженности δ: *1* — численный расчет, *2* — расчет по формулам (23), *3* — по формулам (25)

Кинетические коэффициенты G_1, G_3 и S_1, S_3, характеризующие соответственно поверхностные механизмы дрейфа и теплопереноса, являются знакопостоянными функциями параметра разреженности δ (рис. 2, 4, 5). Поэтому направления поверхностных составляющих СИД и СИТ определяются знаками разности $\Delta\varepsilon$ коэффициентов аккомодации возбужденных и невозбужденных частиц и отстройки Ω частоты излучения от центра линии поглощения, а также величиной параметра отстройки $x = \Omega/k\bar{v}$. Если $\varepsilon_n > \varepsilon_m$, то в случае однородного уширения направление поверхностной составляющей СИД при $\Omega > 0$ совпадает с направлением излучения, а при $\Omega < 0$ противоположно ему. В случае неоднородного уширения выражения (17) для потоков газа и тепла запишутся в следующем виде:

$$I = nBx\left\{\left(G_1 - |G_3|x^2\right)\Delta\varepsilon + \\ + \left(G_2 - |G_4|x^2\right)\frac{\Delta\sigma}{\sigma_n}\right\}\exp(-x^2), \quad (30)$$

$$Q = pBx\left\{\left(-|S_1| + S_3x^2\right)\Delta\varepsilon + \\ + \left(S_2 - |S_4|x^2\right)\frac{\Delta\sigma}{\sigma_n}\right\}\exp(-x^2), \quad (31)$$

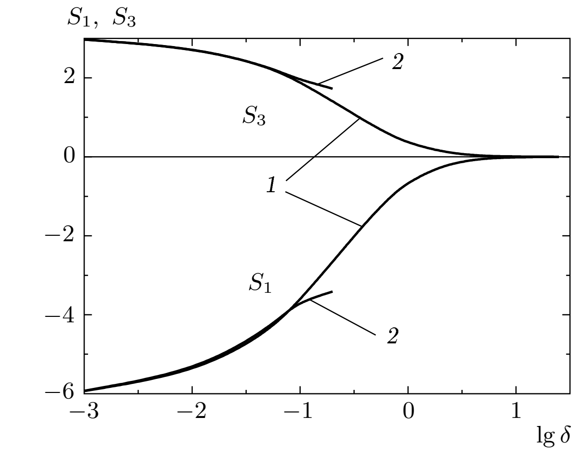

Рис. 5. Зависимости кинетических коэффициентов S_1 и S_3 от параметра разреженности δ: *1* — численный расчет, *2* — расчет по формулам (23)

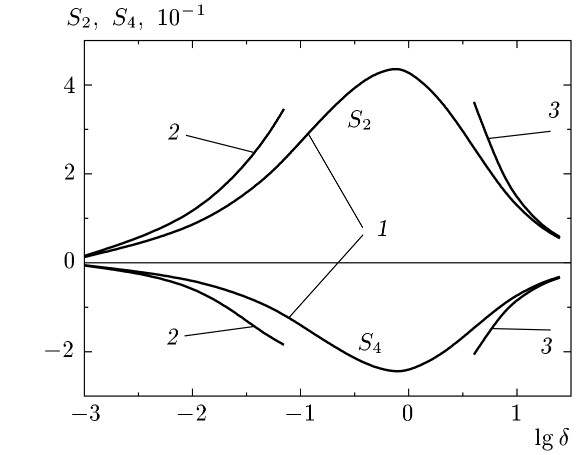

Рис. 6. Зависимости кинетических коэффициентов S_2 и S_4 от параметра разреженности δ: *1* — численный расчет, *2* — расчет по формулам (23), *3* — по формулам (26)

где

$$B = 2\sqrt{\pi}\, r_0 \frac{|G_{mn}|^2}{k\bar{v}}.$$

Из выражения (30) следует, что существуют такие значения параметра отстройки x, при которых поверхностный СИД отсутствует. Расчет показывает, что при $x \approx 3.2$ скорость поверхностного дрейфа изменяет свое направление на противоположное для любых значений параметра разреженности δ. Но при такой отстройке величина скорости СИД неизмеримо мала.

Зависимости коэффициентов G_2 и G_4, характеризующих столкновительный механизм СИД, от параметра разреженности δ представлены на рис. 3, 4. Величина $G_4 < 0$ при всех значениях δ, а G_2 изменяет свой знак в промежуточном режиме при $\delta = \delta_{inv} \approx 0.18$. Коэффициент G_2 отрицателен при $\delta < \delta_{inv}$ и положителен при $\delta > \delta_{inv}$. Это означает, что скорость столкновительной составляющей СИД изменяет свое направление при изменении давления газа в капилляре.

В свободномолекулярном и вязком со скольжением режимах результаты численных расчетов хорошо согласуются с расчетами по асимптотическим формулам (23) и (24), что иллюстрируют кривые *2* и *3* на рис. 3. На рис. 3 также представлено решение (кривая *4*) для кинетической модели второго порядка [14]. Наибольшее различие между результатами данной работы и работы [14] составляет около 37 % при $\delta \approx 2$ (Kn ≈ 0.5). Зависимость скорости СИД от частоты излучения определяется двумя усредненными по скоростям параметрами поглощения χ_1 и χ_3, а не одним χ_1, как это следует из элементарного рассмотрения [1, 2], а также из решения модельного кинетического уравнения второго порядка [14].

В случае неоднородного уширения при $\delta > \delta_{inv}$ частотная зависимость столкновительного СИД имеет дополнительные нули, кроме очевидного $\Omega = 0$, когда функции распределения скоростей возбужденных и невозбужденных частиц симметричны относительно нулевой проекции вектора скорости частиц на направление излучения. В зависимости от величины параметра разреженности δ столкновительная составляющая скорости СИД изменяет свое направление при значениях параметра отстройки в интервале $0.1 < x < 2.3$. При $\Delta\sigma > 0$ и $\Omega > 0$ в случае, когда $x > 2.3$, столкновительный СИД направлен против распространения излучения при любом давлении газа.

Частотная зависимость полного потока СИД определяется значениями параметров разреженности δ и $\xi = \Delta\varepsilon/(\Delta\sigma/\sigma_n)$. На рис. 7 показаны возможные зависимости безразмерного потока СИД $I^* = I/nB$ от параметра отстройки x в случае неоднородного уширения. При $\delta \geq 1$ и $|\xi| \leq 0.1$ (рис. 7, кривые *1, 2*) частотный профиль скорости СИД имеет три нуля. В свободномолекулярном режиме дрейфа газа, а также при $|\xi| \geq 1$ зависимость потока СИД от частоты имеет единственный нуль в точке $x = 0$, соответствующей точному резонансу. В промежуточном режиме при $|\xi| \leq 0.1$ возможны оба варианта в зависимости от величины и знака параметра ξ.

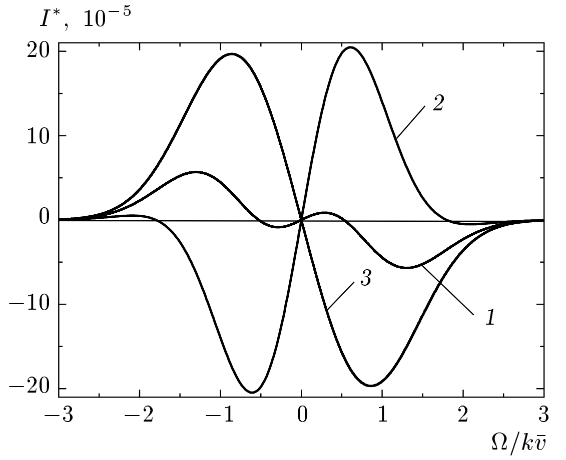

Рис. 7. Частотные профили СИД при $\xi = -0.1$, $\Delta\varepsilon = -0.001$, $\Delta\sigma/\sigma_n = 0.01$, $\delta = 1$ (*1*), 2 (*2*), 0.7 (*3*)

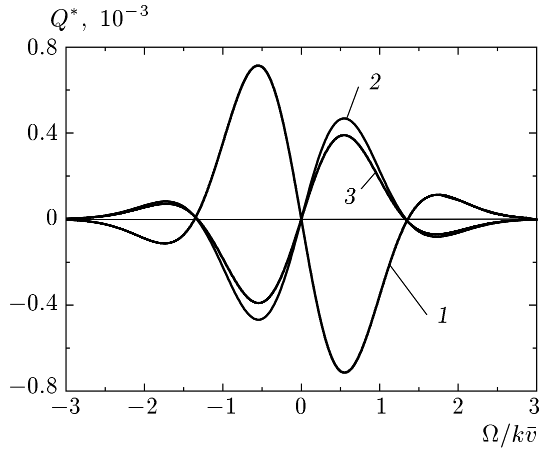

Рис. 8. Частотные профили СИТ при $\xi = 1$, $\Delta\varepsilon = 0.01$, $\Delta\sigma/\sigma_n = 0.01$, $\delta = 1$ (*1*), 2 (*2*), 10 (*3*)

Заметим, что наличие нескольких нулей в спектральном профиле потока СИД (так называемый аномальный СИД) наблюдался для молекул C_2H_4 в буферном газе Kr [24] и для атомов калия в смеси с двумя буферными газами, одним из которых был Ne [25]. В качестве причины аномального СИД указывалась знакопеременная зависимость от скорости поглощающих свет атомов разности транспортных частот столкновений для возбужденных и невозбужденных атомов с буферными частицами разного сорта [26, 27]. В нашем случае аномальный СИД однокомпонентного атомарного газа связан с тем, что спектральный профиль скорости СИД определяется двумя факторами поглощения $\chi_1(\Omega)$ и $\chi_3(\Omega)$, а не одним χ_1, как предсказывали другие теории.

Направление СИТ также зависит не только от давления газа, знаков отстройки, разности коэффициентов аккомодации и разности эффективных диаметров частиц газа, но также и от величины параметра отстройки. Инверсные значения отстройки для поверхностной и столкновительной составляющих теплового потока, слабо зависящие от параметра разреженности δ, имеют значения в интервале $1.32 \le x \le 1.52$.

В режиме со скольжением ($\delta \gg 1$) величина поверхностного СИТ имеет порядок δ^{-2} (27), т. е. в рамках теории Чепмена–Энскога он может быть определен только в барнетовском приближении. Для однородного и неоднородного (в случае $x \le 1.3$) уширений поверхностный СИТ всегда направлен противоположно поверхностному дрейфу газа. В случае неоднородного уширения при $x > 1.4$ поверхностный СИТ меняет свое направление и оказывается сонаправленным поверхностной составляющей скорости СИД.

Столкновительный СИТ при однородном и неоднородном (в случае $x \le 1.3$) уширениях при $\Omega > 0$, $\Delta\sigma/\sigma_n > 0$ направлен в сторону распространения излучения во всем диапазоне давления газа, а при $\Delta\sigma/\sigma_n < 0$ — против излучения. Для неоднородного уширения, когда $x > 1.5$, направление столкновительного СИТ меняется на противоположное.

На рис. 8 представлены частотные зависимости безразмерного полного потока тепла $Q^* = Q/pB$ при различных значениях параметра разреженности δ для неоднородного уширения. Частотный профиль СИТ всегда имеет несколько нулей, положения которых практически не зависят от давления газа. На рис. 8 также можно видеть изменение величины и направления теплового потока при изменении давления газа. При фиксированных значениях параметров x и ξ изменение давления газа приводит к изменению направления СИТ (кривые *1* и *2*).

В заключение отметим, что, подбирая соответствующие значения частотного параметра x, можно исключить либо поверхностный, либо столкновительный механизмы СИД или СИТ. Это позволит с хорошей точностью определить параметры взаимодействия частиц с поверхностью и между собой, т. е. коэффициенты аккомодации и сечения взаимодействия возбужденных и невозбужденных частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 06-01-00594).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ф. Х. Гельмуханов, А. М. Шалагин, Письма в ЖЭТФ **29**, 773 (1979).
2. Ф. Х. Гельмуханов, А. М. Шалагин, ЖЭТФ **78**, 1672 (1980).
3. А. М. Дыхне, А. Н. Старостин, ЖЭТФ **79**, 1211 (1980).
4. М. А. Ваксман, А. В. Гайнер, ЖЭТФ **89**, 41 (1985).
5. A. V. Ghiner, M. I. Stockman, and M. A. Vaksman, Phys. Lett. A **96**, 79 (1983).
6. П. Л. Чаповский, А. М. Шалагин, КЭ **13**, 2497 (1986).
7. R. W. M. Hoogeveen, R. J. C. Sprew, and L. J. F. Hermans, Phys. Rev. Lett. **59**, 447 (1987).
8. R. W. M. Hoogeveen, G. J. Van der Meer, and L. J. F. Hermans, Phys. Rev. A **42**, 6471 (1990).
9. M. A. Vaksman, Phys. Rev. A **44**, 4102 (1991).
10. G. J. Van der Meer, B. Broers, R. W. M. Hoogeveen et al., Physica A **182**, 47 (1992).
11. A. D. Streater and M. A. Vaksman, Canad. J. Phys. **78**, 285 (2000).
12. И. В. Чермянинов, В. Г. Черняк, Инж.-физ. журн. **55**, 906 (1988).
13. В. И. Ролдугин, Коллоид. ж. **50**, 506 (1988).
14. В. Г. Черняк, Е. А. Винтовкина, И. В. Чермянинов, ЖЭТФ **103**, 1571 (1993).
15. В. Г. Черняк, Е. А. Субботин, ЖЭТФ **108**, 227 (1995).
16. F. J. McCormack, Phys. Fluids **16**, 2095 (1973).
17. С. Г. Раутиан, Г. И. Смирнов, А. М. Шалагин, *Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул*, Наука, Новосибирск (1979).
18. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовиц, Наука, Москва (1979).
19. B. D. Fried and S. D. Conte, *The Plasma Dispersion Function*, Acad. Press, New York (1961).
20. С. Г. Михлин, *Вариационные методы в математической физике*, Наука, Москва (1970).
21. G. J. Van der Meer, R. W. M. Hoogeveen, L. J. F. Hermans et al., Phys. Rev. A **39**, 5237 (1989).
22. P. L. Chapovsky, G. J. Van der Meer, J. Smeets et al., Phys. Rev. A **45**, 8011 (1992).
23. И. В. Чермянинов, В. Г. Черняк, Г. А. Фомягин, ТВТ **23**, 1158 (1985).
24. G. J. Van der Meer, J. Smeets, S. P. Pod'yachev et al., Phys. Rev. A **45**, 1303 (1992).
25. F. Yahyaei-Moayyed and A. D. Streater, Phys. Rev. A **53**, 4331 (1996).
26. А. И. Пархоменко, ЖЭТФ **115**, 1664 (1999).
27. А. И. Пархоменко, ЖЭТФ **116**, 1587 (1999).