

Проблема центров масс в задаче о контуре спектральных линий. I. Существование длинных траекторий*

С.Д. Творогов

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 4.12.2008 г.

Обсуждается отказ от длинноволнового приближения для центров масс молекул при выводе выражения для коэффициента поглощения. В выражении для коэффициента поглощения появляются при этом дополнительные операторы, связанные с волновым вектором поля и с координатами центра масс. Их наличие приводит к возникновению соотношений между коэффициентами поглощения и смещенными частотами, называемых правилами сумм. Для них получены выражения через коммутаторы дополнительных операторов с гамильтонианом поглощающей свет молекулы. Изложена гипотеза «дрейфа», объясняющая появление «длинных» траекторий, выходящих за пределы элементарного объема.

Ключевые слова: длинноволновое приближение, коэффициент поглощения, правила сумм.

Введение

В данной статье речь пойдет о молекулярном газе при давлениях, когда в уширении спектральных линий преобладают столкновения молекул.

Прежде всего, надо напомнить о принципиальной многочастичности проблемы, и связано это с самим определением спектрального (для частоты ω) коэффициента поглощения κ . Действительно, по правилам электродинамики $\kappa \approx \text{Im} \epsilon$, где диэлектрическая проницаемость ϵ соотношением $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ связывает спектральные компоненты напряженности поля \mathbf{E} и индукции $\mathbf{D} = \mathbf{E} \times 4\pi \mathbf{P}$ с \mathbf{P} — дипольным моментом единицы объема. Последнее означает, что \mathbf{P} надобно вычислять для элементарного объема ΔV , который, уже в силу его определения в макроскопической электродинамике (точка в макроскопической электродинамике) и статистической физике, содержит «достаточно большое число молекул» (число последних должно гарантировать применение статистических закономерностей, что, собственно, и составляет фактическое содержание молекулярной оптики).

В проблеме контура спектральных линий господствует мнение, что все события, ведущие к уширению линии, происходят в одном элементарном объеме ΔV . Формальным олицетворением этого убеждения будет, конечно же, длинноволновое приближение для центров масс — ведь размеры ΔV существенно меньше длины световой волны λ .

Поэтому в операторе H_{0R} взаимодействия молекул и поля последнее полагается пространственно

однородным — то, что именуется длинноволновым приближением для всех степеней свободы, включая и координаты центров масс. Тогда, после перехода к бинарному приближению, статистическая проблема упрощается до усреднения по начальным условиям одного соударения, а многочастичный аспект сводится лишь к элементарному подсчету числа столкновений в единицу времени

Однако вполне логично предположить, что столь принципиальный элемент задачи, как многочастичность, может (а скорее всего, должен) иметь нетривиальные последствия, не сводящиеся к поправкам «в каком-то знаке после запятой». Тем более что длинноволновое приближение для центров масс отнюдь не обязательно — отказ от него не привносит в общую часть задачи никаких дополнительных технических проблем. (Разумеется, для внутримолекулярных степеней свободы длинноволновое приближение абсолютно бесспорно.)

Конечно же, надобно некое предварительное разъяснение тому, почему прежде не возникало сомнений в эффективности простейшего учета многочастичности. Дело, наверное, в том, что предмет многочисленных работ по линейной и нелинейной спектроскопии часто оказывалось резонансное поглощение кванта — процесс, когда динамика центров масс не столь существенна. При описании же периферии контура начинает играть видную роль потенциал, управляющий движением центров масс. Поэтому необходимые свидетельства надо, скорее всего, искать в спектральных интервалах, соответствующих крыльям линий и полос.

По существу, уже обозначилась принципиальная часть программы, и прием ее реализации можно классифицировать как «апостериорное доказательство от противного». Нужно снова провести

* Статья подготовлена к печати Ольгой Борисовной Родимовой (rod@iao.ru).