ВЕСТНИК
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 4 — 1972

УДК 535.338.334

Э. А. АСМАРЯН, Г. Н. ХЛЫБОВ

ВЛИЯНИЕ СТОЛКНОВЕНИЙ НА ФОРМУ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ В ГАЗЕ

Исследуется влияние упругих столкновений на уширение спектральных линий в газе на основе моделей «слабых» и «сильных» столкновений. Интенсивность излучения вычисляется с помощью спектральной функции поляризации с учетом внутренних степеней свободы атомов. В классическом и квантовом случаях получены выражения для интенсивности излучения в центре и на крыльях линии.

В работе [1] проведено детальное исследование влияния столкновений осцилляторов с окружающими частицами на уширение спектральных линий на основании двух моделей столкновений: моделей «слабых» и «сильных» столкновений и показано, что обе модели приводят к близким результатам, а именно к сужению линии, т. е. увеличению интенсивности в центре и более медленному спаданию интенсивности в крыльях линии ($\sim\omega^{-4}$) по сравнению с экспоненциальным законом, имеющим место в случае отсутствия столкновений.

В настоящей работе интенсивность излучения рассчитывается с помощью спектральной функции вектора поляризации [2], что позволяет вычислить абсолютную интенсивность излучения, т. е. ее выражение через параметры газа. Кроме того, учитываются внутренние степени свободы осцилляторов, что приводит к дисперсионной форме линии на крыльях. Полученные результаты содержат нерезонансные члены, которые существенны в крыльях линии. Рассмотрена также квантовая теория, причем опять на основании указанных моделей упругих столкновений и с учетом столкновений, меняющих только фазы осцилляторов. Результаты работы согласуются с результатами работы [1].

Рассмотрим сначала систему классических осцилляторов (атомов) в отсутствие внешнего электромагнитного поля. Следуя работе [2], состояние осцилляторов описываем заданием координат и скоростей центров тяжести $\vec{R}$, $\vec{V}$ и координат и скоростей внутреннего движения $\vec{r}$, $\vec{v}$, а эволюцию системы — кинетическим уравнением для функции распределения осцилляторов $f(\vec{R}, \vec{V}, \vec{r}, \vec{v}, t)$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial\vec{R}}+\vec{v}\frac{\partial}{\partial\vec{r}}-\omega_0^2\vec{r}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\right)f=I, \qquad (1)$$

где ω_0 — собственная частота осциллятора, I — интеграл столкновений, форма которого зависит от конкретной модели столкновений.

Рассмотрим случай броуновского движения осцилляторов, соответствующий модели «слабых» столкновений.

В этом случае интеграл столкновений можно записать в форме Фоккера—Планка и (1) принимает вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}}+\vec{v}\frac{\partial}{\partial \vec{r}}-\omega_0^2\vec{r}\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\right)f=D\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}+\frac{\partial}{\partial \vec{v}}(\gamma\vec{v}f)+q\frac{\partial^2 f}{\partial V^2}+\frac{\partial}{\partial \vec{V}}(\nu_d\vec{V}f). \tag{2}$$

Здесь $D=\gamma MkT$ — коэффициент диффузии, $\gamma=\frac{2e^2\omega_0^2}{3mc^3}$ — коэффициент радиационного затухания, $q=\frac{\overline{V^2}}{2}\nu_d$, где $\overline{V}=\left(\frac{2kT}{M}\right)^{1/2}$ — тепловая скорость атомов, ν_d — эффективная частота упругих столкновений.

Введем вектор поляризации $\vec{P}(\vec{R},\vec{V},t)=en\int\vec{r}f\,d\vec{r}d\vec{v}$ и тока $I(\vec{R},\vec{V},t)=en\int\vec{v}f\,d\vec{r}\,d\vec{v}$, где n — плотность атомов.

Тогда из (2) легко получить уравнения для компонентов этих векторов:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}}\right)P_i-I_i=q\frac{\partial^2 P_i}{\partial V^2}+\nu_d\frac{\partial}{\partial \vec{V}}(\vec{V}P_i),$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}}\right)I_i+\gamma I_i+\omega_0^2P_i=q\frac{\partial^2 I_i}{\partial V^2}+\nu_d\frac{\partial}{\partial \vec{V}}\left(\vec{V}I_i\right). \tag{3}$$

$$(i=x,\ y,\ z)$$

Обозначим через $\delta\vec{P}=\vec{P}-\overline{\vec{P}}$, $\delta\vec{I}=\vec{I}-\overline{\vec{I}}$ — отклонения векторов $\vec{P}$ и $\vec{I}$ от средних значений.

Тогда, усредняя систему (3) и вычитая из нее полученную систему уравнений, находим:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}}\right)\delta P_i-\delta I_i=q\frac{\partial^2\delta P_i}{\partial V^2}+\nu_d\frac{\partial}{\partial \vec{V}}(\vec{V}\delta P_i),$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}}\right)\delta I_i+\gamma\delta I_i+\omega_0^2\delta P_i=q\frac{\partial^2\delta I_i}{\partial V^2}+\nu_d\frac{\partial}{\partial \vec{V}}(\vec{V}\delta I_i). \tag{4}$$

Умножим систему (4) на $\delta P_i(\vec{R}',\vec{V}',t')$ и просуммируем по всем компонентам. Тогда получим систему уравнений для корреляционных функций $(\delta\vec{I}\delta\vec{P})_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},\vec{V}',t,t'}$ и $(\delta\vec{P}\delta\vec{P})_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},\vec{V}',t,t'}$, т. е. для произведений отклонений в разные моменты времени и в разных точках пространства.

Проинтегрировав полученную систему по $\vec{V}'$ и усреднив по ансамблю осцилляторов, получим

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}}\right)\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}-\overline{(\delta\vec{I}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}=$$

$$=q\frac{\partial^2}{\partial V^2}\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}+\nu_d\frac{\partial}{\partial \vec{V}}[\vec{V}\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}], \tag{5}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial\vec{R}}+\gamma\right)\overline{(\delta\vec{I}\,\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}+\omega_0^2\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}=$$

$$=q\frac{\partial^2}{\partial V^2}\overline{(\delta\vec{I}\,\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}+\nu_d\frac{\partial}{\partial\vec{V}}[\vec{V}\overline{(\delta\vec{I}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}]. \quad (6)$$

Функции $\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}$ и $\overline{(\delta\vec{I}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}$ зависят от $\tau=t-t'$ и $\vec{\rho}=\vec{R}-\vec{R}'$, удовлетворяют следующим начальным условиям:

$$\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau=0}=\frac{3kT}{2m\omega_0^2}\delta(\vec{\rho})\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi}\,\bar{V}}e^{-\frac{V^2}{\bar{V}^2}},$$

$$\overline{(\delta\vec{I}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau=0}=0. \quad (7)$$

Эти начальные условия легко получить из определений

$$\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}=e^2n\int r^2f_2(\vec{R},\ \vec{R}',\ \vec{V},\ \vec{V}'\ \vec{r},\ \vec{r}',\ \vec{v},\ \vec{v}',\ t,\ t')\,d\vec{r}\,d\vec{r}'\,d\vec{v}\,d\vec{v}'\,d\vec{N}',$$

$$\overline{(\delta\vec{I}\,\delta\vec{P})}_{\vec{R},\vec{R}',\vec{V},t,t'}=e^2n\int\vec{r}\vec{v}f_2(\vec{R},\ \vec{R}',\ \vec{V},\ \vec{V}',\ \vec{r},\ \vec{r}',\ \vec{v},\ \vec{v}',\ \vec{t},\ \vec{t}')\,d\vec{r}\,d\vec{r}'\,d\vec{v}\,d\vec{v}'\,d\vec{V}'$$

с учетом того, что функция f_2 удовлетворяет начальным условиям [2]:

$$f_2(\vec{R},\ \vec{R}',\vec{V},\ \vec{V}',\ \vec{r},\ \vec{r}',\ \vec{v},\ \vec{v}',\ t,\ t)=A\delta(\vec{V}-\vec{V}')\,\delta(\vec{R}-\vec{R}')\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')\,\delta\times$$

$$\times(\vec{v}-\vec{v}')\,e^{-\frac{mv^2+MV^2+m\omega_0^2r^2}{2kT}},$$

где A — нормировочная постоянная.

Перейдем в (5), (6) и (7) к фурье-компонентам по $\vec{\rho}$, $\vec{V}$. Тогда для функций

$$X(\tau,\ \vec{k},\ \vec{\varkappa})=\frac{1}{(2\pi)^6}\int\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau}e^{-i(\vec{k}\vec{\rho}+\vec{\varkappa}\vec{V})}\,d\vec{\rho}\,d\vec{V},$$

$$Y(\tau,\ \vec{k},\ \vec{\varkappa})=\frac{1}{(2\pi)^6}\int\overline{(\delta\vec{I}\,\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau}e^{-i(\vec{k}\vec{\rho}+\vec{\varkappa}\vec{V})}\,d\vec{\rho}\,d\vec{V} \quad (8)$$

получим систему уравнений

$$\frac{\partial X}{\partial\tau}+(\nu_d\vec{\varkappa}-\vec{k})\frac{\partial X}{\partial\vec{\varkappa}}=Y-q\varkappa^2X,$$

$$\frac{\partial Y}{\partial\tau}+(\nu_d\vec{\varkappa}-\vec{k})\frac{\partial Y}{\partial\vec{\varkappa}}=-(\gamma+q\varkappa^2)Y-\omega_0^2X \quad (9)$$

и начальные условия:

$$X(\tau=0,\quad\vec{k},\ \vec{\varkappa}_0)=\frac{3kT}{2m\omega_0^2}e^{-\frac{\bar{V}^2\varkappa_0^2}{4}},$$

$$Y(\tau=0,\quad\vec{k},\ \vec{\varkappa}_0)=0, \quad (10)$$

где $\vec{\varkappa}_0=\vec{\varkappa}(\tau=0)$.

Решая систему (9) с начальными условиями (10), получаем:

$$X(\tau,\ \vec{k},\ \vec{\varkappa}) = \frac{3kTne^2}{m\omega_0^2}\left[\frac{\omega_0+\frac{i\gamma}{2}}{2\omega_0}\, e^{-i\omega_0\tau} + \frac{\omega_0-\frac{i\gamma}{2}}{2\omega_0}\, e^{i\omega_0\tau}\right]\times$$

$$\times \exp\left\{-\left[\frac{\gamma}{2}\tau + \frac{\overline{V}^2\varkappa^2}{4} + \frac{\overline{V}^2}{4\nu_d}\left(1-e^{-\nu_d\tau}\right)\vec{k}\vec{\varkappa} + \frac{\overline{V}^2}{2\nu_d^2}\right.\right.$$

$$\left.\left.\left(\nu_d\tau+1-e^{-\nu_d\tau}\right)k^2\right]\right\}. \qquad (11)$$

Если в (8), (11) положить $\varkappa = 0$ и произвести разложение в интеграл Фурье по τ, то получим спектральную плотность вектора поляризации $(\delta\vec{P}\delta\vec{P})_{\omega,\vec{k}}$ [3]:

$$\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\omega,\vec{k}} = \frac{3kTne^2}{2\pi m\omega_0^2}\left[\frac{1+\frac{i\gamma}{2\omega_0}}{\frac{\gamma}{2}+\gamma_d-i(\omega-\omega_0)}\,\Phi\left(1,1+\frac{\gamma/2+\gamma_d-i(\omega-\omega_0)}{\nu_d};\right.\right.$$

$$\left.\left.\frac{\gamma_d}{\nu_d}\right) + \frac{1-\frac{i\gamma}{2\omega_0}}{\gamma/2+\gamma_d-i(\omega+\omega_0)}\,\Phi\left(1,1+\frac{\frac{\gamma}{2}+\gamma_d-i(\omega+\omega_0)}{\nu_d};\ \frac{\gamma_d}{\nu_d}\right)\right], \qquad (12)$$

где

$$\Phi(\alpha,\ \beta;\ z) = 1+\frac{\alpha}{\beta}\frac{z}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\frac{z^2}{2!}+\ldots$$

вырожденная гипергеометрическая функция,

$\gamma_d = \dfrac{\Delta\omega_D^2}{2\nu_d}$, $\Delta\omega_D = k\overline{V}$ — допплеровская ширина линии.

В дипольном приближении спектральная плотность вектора поляризации связана с интенсивностью излучения соотношением

$$I(\omega) = \frac{m\omega_0^2}{e^2}\gamma\cdot 2Re\,(\delta\vec{P}\delta\vec{P})_\omega.$$

Таким образом, пренебрегая членами порядка $\dfrac{\gamma}{\omega_0} \ll 1$, получаем

$$I(\omega) = \frac{3kTne^2}{\pi}\gamma\,Re\left[\frac{1}{\frac{\gamma}{2}+\gamma_d-i(\omega-\omega_0)}\,\Phi\left(1,1+\right.\right.$$

$$\left.+\frac{\frac{\gamma}{2}+\gamma_d-i(\omega-\omega_0)}{\nu_d};\ \frac{\gamma_d}{\nu_d}\right)+\frac{1}{\frac{\gamma}{2}+\gamma_d-i(\omega+\omega_0)}\times$$

$$\times\Phi\left(1,1+\frac{\frac{\gamma}{2}+\gamma_d+i(\omega+\omega_0)}{\nu_d};\ \frac{\gamma_d}{\nu_d}\right)\Bigg]. \tag{13}$$

В случае $\nu_d \ll \Delta\omega_D$ для центра линии, пренебрегая нерезонансным членом, получим

$$I(\omega_0)=\frac{3kTn\gamma}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_D}\left[1+\frac{2}{3\sqrt{\pi}}\frac{\nu_d}{\Delta\omega_D}-\frac{\gamma}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_D}\right]. \tag{14}$$

Следовательно, наличие столкновений приводит к увеличению интенсивности в центре (сужению линии). Для далекого крыла линии получим

$$I(\omega)=\frac{6kTn\gamma}{\pi}\left\{\frac{\gamma}{2}\left[\frac{1}{(\omega-\omega_0)^2+\frac{\gamma^2}{4}}+\frac{1}{(\omega+\omega_0)^2+\frac{\gamma^2}{4}}\right]+\right.$$

$$\left.+\frac{\nu_d\Delta\omega_D^2}{4}\cdot\left[\frac{1}{(\omega-\omega_0)^4}+\frac{1}{(\omega+\omega_0)^4}\right]\right\},\quad \omega-\omega_0\gg\Delta\omega_D\gg\nu_d. \tag{15}$$

В случае $\nu_d\gg\Delta\omega_D$ в разложении (12) достаточно ограничиться первыми двумя членами.

Учитывая, что $\gamma_d\ll\Delta\omega_D\ll\nu_d$, находим

$$I(\omega)=\frac{6kTn\gamma}{\pi}\left\{\frac{\gamma\omega_0^2}{(\omega^2-\omega_0^2)^2+4\omega^2\left(\gamma_d+\frac{\gamma}{2}\right)^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{4\gamma_d\nu_d(2\gamma_d+\nu_d+\gamma)\omega_0^2(\omega^2+\omega_0^2)}{\left[(\omega^2-\omega_0^2)^2+4\omega^2\left(\gamma_d+\frac{\gamma}{2}\right)^2\right][(\omega^2-\omega_0^2)^2+4\nu_d^2\omega^2]}\right\}.$$

Для центральной части линии:

$$I(\omega)=\frac{3kTn\gamma}{\pi}\cdot\frac{\gamma_d+\frac{\gamma}{2}}{(\omega-\omega_0)^2+\left(\gamma_d+\frac{\gamma}{2}\right)^2}. \tag{15a}$$

Таким образом, линия имеет дисперсионную форму с шириной $\gamma+2\gamma_d$.

При больших частотах $\omega-\omega_0\gg\nu_d\gg\gamma_d$ интенсивность дается формулой (15), которая верна при любых ν_d.

Рассмотрим теперь модель сильных столкновений. В этом случае кинетическое уравнение имеет вид [4]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec V\frac{\partial}{\partial\vec R}+\vec v\frac{\partial}{\partial\vec r}-\omega_0^2\vec r\frac{\partial}{\partial\vec v}\right)f=D\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}+\frac{\partial}{\partial\vec v}(\gamma\vec v f)-$$

$$-\nu f+\nu f_0(\vec V)\int f(\vec R,\vec V',\vec r,\vec v,t)\,d\vec V',$$

где f_0 — равновесная (максвелловская) функция распределения.

Так же, как в предыдущем случае, отсюда получим систему уравнений для корреляционных функций $\overline{(\delta\vec I\delta\vec P)}_{\vec\rho,\vec V,\tau}$, $\overline{(\delta\vec P\delta\vec P)}_{\vec\rho,\vec V,\tau}$ с начальными условиями (7):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}}+\nu\right)\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau}-\overline{(\delta\vec{I}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau}=\nu f_0(\vec{V})\int\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V}',\tau}\,d\vec{V}',$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}}+\gamma+\nu\right)\overline{(\delta\vec{I}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau}+\omega_0^2\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau}=$$

$$=\nu f_0(\vec{V})\int\overline{(\delta\vec{I}\delta\vec{P})}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau}\,d\vec{V}'.$$

Переходя к фурье-компонентам по τ и $\vec{\rho}$ и решая полученную систему интегральных уравнений, получим

$$\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\omega,k}=\int\overline{(\delta\vec{P}\delta\vec{P})}_{\omega,\vec{k},\vec{V}}\,d\vec{V}=\frac{3kTne^2}{2m\omega_0^2\sqrt{\pi}\,\Delta\omega_D}\times$$

$$\times\frac{w\left(\frac{\omega-\omega_0}{\Delta\omega_D},\ \frac{\nu+\frac{\gamma}{2}}{\Delta\omega_D}\right)+w\left(\frac{\omega+\omega_0}{\Delta\omega_D},\ \frac{\gamma+\frac{\gamma}{2}}{\Delta\omega_D}\right)}{1-\frac{\nu\sqrt{\pi}}{\Delta\omega_D}\left[w\left(\frac{\omega-\omega_0}{\Delta\omega_D},\ \frac{\nu+\frac{\gamma}{2}}{\Delta\omega_D}\right)+w\left(\frac{\omega+\omega_0}{\Delta\omega_D},\ \frac{\nu+\frac{\gamma}{2}}{\Delta\omega_D}\right)\right]},$$

где

$$w(x,\ y)=\frac{i}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-t^2}}{x+iy-t}\,dt.$$

В случае ν, $\gamma\ll\Delta\omega_D$ для центральной части линии получим пренебрегая нерезонансным членом:

$$I(\omega)=\frac{3kT_n\gamma}{\sqrt{\pi}\,\Delta\omega_D}\,Re\,\frac{w\left(\frac{\omega-\omega_0}{\Delta\omega_D},\ \frac{\gamma+\frac{\gamma}{2}}{\Delta\omega_D}\right)}{1-\frac{\nu\sqrt{\pi}}{\Delta\omega_D}w\left(\frac{\omega-\omega_0}{\Delta\omega_D},\ \frac{\nu+\frac{\gamma}{2}}{\Delta\omega_D}\right)}.$$

В центре линии интенсивность равна

$$I(\omega)=\frac{3kT_n\gamma}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_D}\left\{1+\frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_D}[(\pi-2)\nu-\gamma]\right\}.$$

Таким образом, столкновения приводят к увеличению интенсивности в центре (т. е. сужению линии). Физическая интерпретация этого состоит в следующем. Как показано в [1], ширина допплеровского контура определяется величиной τ_k, где τ_k — характерное время, необходимое для смещения осциллятора на расстояние порядка $\frac{1}{k}=\frac{\lambda}{2\pi}$ (λ — длина волны излучения). Если имеется некоторая причина, ограничивающая или замедляющая перемещение осцилляторов (в данном случае упругие столкновения с частотой ν), то это время увеличивается и, следовательно, ширина линии уменьшается по сравнению с чисто допплеровской шириной.

В случае $\nu + \frac{\gamma}{2} \gg \Delta\omega_D$ вблизи центра имеем

$$I(\omega) = \frac{3kTn\gamma}{2\pi} \cdot \frac{\gamma + \dfrac{\Delta\omega_D^2}{\nu + \gamma/2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \dfrac{1}{4}\left(\gamma + \dfrac{\Delta\omega_D^2}{\nu + \gamma/2}\right)^2},$$

т. е. линия имеет дисперсионную форму с шириной

$$\gamma + \frac{\Delta\omega_D^2}{\nu + \gamma/2}.$$

Рассмотрим теперь квантовую теорию.

Движение центров атомов будем описывать классически, а внутренние состояния их — квантовым образом [2].

В отсутствие внешнего поля уравнения для диагональных и недиагональных элементов матрицы плотности не зацепляются. Запишем уравнение для недиагональных элементов матрицы плотности двухуровневой системы, учитывающее столкновения.

Рассмотрим сначала модель слабых столкновений.

Тогда это уравнение примет вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} + \gamma_{ab} + i\omega_{ab}\right) f_{ab}(\vec{R}, \vec{p}, \psi) = q\frac{\partial^2 f_{ab}}{\partial V^2} + \frac{\partial}{\partial \vec{V}}(\nu_d \vec{V} f_{ab}), \tag{16}$$

где γ_{ab} — ширина линии перехода $a \to b$, ω_{ab} — частота этого перехода, q и ν_d имеют тот же смысл, что и в классическом случае.

В γ_{ab} можно включить также ширину, обусловленную столкновениями, меняющими лишь внутреннее состояние излучающего атома, т. е. вызывающими изменения фазы осциллятора, причем будем считать, что γ_{ab} и ν_d не зависят от скорости атома и уширения из-за фазовых изменений и упругих столкновений независимы.

Из (16) легко получить уравнение для произведения отклонений $\delta f_{ab}(\vec{R}, \vec{p}, t)\,\delta f_{ab}^*(\vec{R}', \vec{p}', t')$ в разных точках пространства $(\vec{R}, \vec{P})$ и в разные моменты времени. Оно имеет такой же вид, как и (16).

Аналогично классическому случаю получаем уравнения для фурье-компонентов $(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)_{\tau, \vec{k}, \vec{\varkappa}}$ по координатам и скоростям:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + (\nu_d \vec{\varkappa} - \vec{k})\frac{\partial}{\partial \vec{\varkappa}} + \gamma_{ab} + i\omega_{ab} + q\varkappa^2\right)\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\tau, \vec{k}, \vec{\varkappa}} = 0, \tag{17}$$

где

$$\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\tau, \vec{k}, \vec{\varkappa}} = \frac{1}{(2\pi)^6}\int (\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)_{\rho, \vec{V}, \tau}\, e^{i(\vec{k}\vec{\rho} + \vec{\varkappa}\vec{V})}\, d\vec{\rho}\, d\vec{V},$$

$$\tau = t - t', \quad \rho = \vec{R} - \vec{R}'.$$

Уравнение (17) имеет решение вида

$$\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\tau, \vec{k}, \vec{\varkappa}} = C_1 \exp\left\{-\left[\frac{qC_2^2}{2\nu_d^3}\, e^{2\nu_d \tau} + \frac{2q\vec{C}\vec{k}}{\nu_d^3}\, e^{\nu_d \tau} + \right.\right.$$

$$+\left(\frac{qk^2}{\nu_d^2}+\gamma_{ab}+i\omega_{ab}\right)\tau\Bigg]\Bigg\}, \quad \vec{\varkappa}(\tau)=\frac{1}{\nu_d}(\vec{C}e^{\nu_d\tau}+\vec{k}).$$

Функции $\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\vec{\rho},\vec{V},\vec{V}',\tau}$ удовлетворяют следующим начальным условиям [2]:

$$\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\vec{\rho},\vec{V},\vec{V}',\tau=0}=\frac{(2\pi\hbar)^3}{2N}\delta(\vec{\rho})\,\delta(\vec{V}-\vec{V}')\,[\bar{f}_a(\vec{P})+\bar{f}_b(\vec{P})],$$

$$\overline{(\delta f_{ba}\,\delta f_{ab}^*)}_{\vec{\rho},\vec{V},\vec{V}',\tau=0}=0.$$

Соответственно имеем

$$\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{0,\vec{k},\vec{\varkappa}_0}=\frac{M^3}{2N}\int(\rho_a+\rho_b)\,\delta(\vec{\rho})\,f(\vec{P})\,e^{-i(\vec{k}\vec{\rho}+\vec{\varkappa}_0\vec{V})}\,\frac{d\vec{\rho}\,d\vec{V}}{(2\pi\hbar)^3}, \tag{18}$$

$$\overline{(\delta f_{ba}\,\delta f_{ab}^*)}_{0,\vec{k},\vec{\varkappa}_0}=0,$$

где

$$f_a(\vec{P})=\frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{MkT}\right)^{3/2}e^{-\frac{E_a}{kT}}f(\vec{P}),\quad \rho_a=\frac{\vec{V}}{(2\pi\hbar)^3}\int f_a(\vec{P})\,d\vec{P}\,—$$

заселенность уровня, E_a — энергия уровня a, V — объем газа, N — число атомов

$$f(\vec{P})=e^{-\frac{P^2}{2MkT}}.$$

Используя эти условия, получим

$$C_1=\frac{\rho_a+\rho_b}{2}\exp\left[-\left(\frac{\bar{V}^2\,\vec{c}\vec{k}}{\nu_d^2}+\frac{k^2\,\bar{V}^2}{4\nu_d^2}\right)\right], \tag{19}$$

где $\bar{V}=\left(\frac{2kT}{M}\right)^{1/2}$ — тепловая скорость атомов.

В (19) учтено, что $q=\frac{\bar{V}^2}{2}\nu_d$. Решение уравнения (17) примет вид

$$\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\tau,\vec{k},\vec{\varkappa}}=\frac{\rho_a+\rho_b}{2}\exp\left\{-\frac{\bar{V}^2\varkappa^2}{4}-\frac{\bar{V}^2}{2\nu_d}(1-e^{-\nu_d\tau})_{\vec{k}\vec{\varkappa}}+\right.$$
$$\left.+\frac{\bar{V}^2}{2\nu_d^2}(1-e^{-\nu_d\tau}-\nu_d\tau)\,k^2-(\gamma_{ab}+i\omega_{ab})\,\tau\right\}. \tag{20}$$

Вектор поляризации системы определяется соотношением [2]:

$$\vec{P}_{ab}(\vec{R},\vec{P},t)=eN(\vec{r}_{ba}f_{ab}+\vec{r}_{ab}f_{ba}),$$

где $e\vec{r}_{ab}$ — матричный элемент дипольного момента атома.

Тогда

$$\overline{(\delta\vec{P}_{ab}\,\delta\vec{P}_{ab}^*)}_{\vec{\rho},\vec{V},\vec{V}',\tau}=e^2N^2[\vec{r}_{ba}\delta f_{ab}+\vec{r}_{ab}\delta f_{ba}]\,[\vec{r}^*_{ba}\,\delta f_{ab}^*+\vec{r}^*_{ab}\,\delta f_{ba}^*]. \tag{21}$$

Используя (18) и (20), получим

$$\overline{(\delta P_{ab}\, \delta P_{ab}^{*})}_{\tau, \vec{k}, \vec{\varkappa}} = \frac{e^2 n\, |r_{ab}|^2 (\rho_a + \rho_b)}{6} \left(e^{i\omega_{ab}\tau} + e^{-i\omega_{ab}\tau}\right) \times$$

$$\times \exp\left[-\gamma_{ab}\tau - \frac{\overline{V}^2 \varkappa^2}{4} - \frac{\overline{V}^2}{2\nu_d}\left(1 - e^{-\nu_d\tau}\right)_{\vec{k}\vec{\varkappa}} + \right.$$

$$\left. + \frac{\overline{V}^2}{2\nu_d^2}\left(1 - e^{-\nu_d\tau} - \nu_d\tau\right) k^2\right].$$

Таким образом, интенсивность излучения на частоте ω будет равна

$$I(\omega) = \frac{m\, |\vec{r}_{ab}|^2 n\gamma_{ab} (\rho_a + \rho_b)\, \omega_{ab}^2}{3} \cdot Re\left\{\frac{1}{\gamma_{ab} + \gamma_d - i(\omega - \omega_{ab})} \times\right.$$

$$\times \Phi\left[1, 1 + \frac{\gamma_{ab} + \gamma_d - i(\omega - \omega_{ab})}{\nu_d};\ \frac{\gamma_d}{\nu_d}\right] + \frac{1}{\gamma_{ab} + \gamma_d - i(\omega + \omega_{ab})} \times$$

$$\left. \times \Phi\left[1, 1 + \frac{\gamma_{ab} + \gamma_d - i(\omega + \omega_{ab})}{\nu_d};\ \frac{\gamma_d}{\nu_d}\right]\right\}.$$

Рассмотрим предельные случаи.

1. $\nu_d \ll \Delta\omega_D$. В центре линии имеем

$$I(\omega_{ab}) = \frac{m\, |\vec{r}_{ab}|^2 n\, \omega_{ab}^2 (\rho_a + \rho_b)\, \gamma_{ab}}{3\sqrt{\pi}\, \Delta\omega_D}\left[1 + \frac{2\nu_d}{3\sqrt{\pi}\, \Delta\omega_D} - \frac{2\gamma_{ab}}{\sqrt{\pi}\, \Delta\omega_D}\right]. \tag{22}$$

Таким образом, при $\gamma_{ab} < \frac{1}{3}\nu_d$ линия сужается, а при $\gamma_{ab} > \frac{1}{3}\nu_d$ — расширяется.

Для далеких крыльев, оставляя основные члены, получаем

$$I(\omega) = \frac{m\, |\vec{r}_{ab}|^2 n\gamma_{ab} (\rho_a + \rho_b)\, \omega_{ab}^2}{3\pi}\left\{\frac{\gamma_{ab}}{(\omega - \omega_{ab})^2 + \gamma_{ab}^2} + \frac{\gamma_{ab}}{(\omega + \omega_{ab})^2 + \gamma_{ab}^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\nu_d\, \Delta\omega_D^2\left[\frac{1}{(\omega - \omega_{ab})^4} + \frac{1}{(\omega + \omega_{ab})^4}\right]\right\}. \tag{23}$$

2. $\nu_d \gg \Delta\omega_D$. В этом случае имеем

$$I(\omega) - \frac{m\, |\vec{r}_{ab}|^2 n\gamma_{ab} (\rho_a + \rho_b)\, \omega_{ab}^2}{3\pi} \times$$

$$\times \left\{\frac{\nu_d^2 (\gamma_{ab} + \gamma_d) + \gamma_{ab}(\omega - \omega_{ab})^2}{[(\omega - \omega_{ab})^2 + (\gamma_{ab} + \gamma_d)^2]\, [(\omega - \omega_{ab})^2 + (\nu_d + \gamma_{ab})^2]} + \right.$$

$$\left. + \frac{\nu_d^2 (\gamma_{ab} + \gamma_d) + \gamma_{ab}(\omega + \omega_{ab})^2}{[(\omega + \omega_{ab})^2 + (\gamma_{ab} + \gamma_d)^2]\, [(\omega + \omega_{ab})^2 + (\nu_d + \gamma_{ab})^2]}\right\}.$$

Вблизи центра линии, при $\omega - \omega_{ab} \ll \nu_d + \gamma_{ab}$

$$I(\omega) = \frac{m\, |\vec{r}_{ab}|^2 n\gamma_{ab} (\rho_a + \rho_b)\, \omega_{ab}^2}{3\pi} \cdot \frac{\nu_d^2 (\gamma_{ab} + \gamma_d)}{(\gamma_{ab} + \nu_d)^2\, [(\omega - \omega_{ab})^2 + (\gamma_{ab} + \gamma_d)^2]}.$$

При $\gamma_{ab} \ll \nu_d$, получаем, что

$$I(\omega) = \frac{m|\vec{r}_{ab}|^2 n\gamma_{ab}(\rho_a + \rho_b)\omega_{ab}^2}{3\pi} \cdot \frac{\gamma_{ab} + \gamma_d}{(\omega - \omega_{ab})^2 + (\gamma_{ab} + \gamma_d)^2}. \qquad (24)$$

Для далекого крыла линии в случаи $\nu_d \gg \Delta\omega_D$ получим

$$I(\omega) = \frac{m|\vec{r}_{ab}|^2 n\gamma_{ab}(\rho_a + \rho_b)\omega_{ab}^2}{3\pi}\left\{\nu_d^2(\gamma_{ab} + \gamma_d)\left[\frac{1}{(\omega - \omega_{ab})^4} + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{1}{(\omega + \omega_{ab})^4}\right] + \frac{2\gamma_{ab}(\omega^2 + \omega_{ab}^2)}{(\omega^2 - \omega_{ab}^2)^2}\right\}.$$

Рассмотрим модель сильных столкновений. В этом случае уравнение для флуктуаций матрицы плотности запишется в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} + \gamma_{ab} + i\omega_{ab}\right)\delta f_{ab}(\vec{R}, \vec{V}, t) =$$

$$= -\nu\delta f_{ab} + \nu f_0(\vec{V})\int \delta f_{ab}(\vec{R}, \vec{V}', t)\,d\vec{V}'.$$

Аналогично предыдущему случаю получим

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} + \gamma_{ab} + i\omega_{ab} + \nu\right)\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\vec{\rho},\vec{V},\tau} =$$

$$= \nu f_0(\vec{V})\int \overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\vec{\rho},\vec{V}',\tau}\,d\vec{V}'.$$

Переходя к фурье-образам по $\tau = t - t'$ и $\vec{\rho} = \vec{R} - \vec{R}'$, получим

$$(\nu - i\omega + i\vec{k}\vec{V} + \gamma_{ab} + i\omega_{ab})\,\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\omega,\vec{k},\vec{V}} =$$

$$= \nu f_0(\vec{V})\int \overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\omega,\vec{k},\vec{V}'}\,d\vec{V}' + \frac{1}{2\pi}\overline{(\delta f_{ab}\,\delta f_{ab}^*)}_{\vec{k},\vec{V},\tau=0}. \qquad (25)$$

Проинтегрировав (25) по $\vec{V}$ и имея в виду (21) и (18), получаем

$$I(\omega) = \frac{m|\vec{r}_{ab}|^2 n\gamma_{ab}(\rho_a + \rho_b)\omega_{ab}^2}{3\sqrt{\pi}\,\Delta\omega_D} \times$$

$$\times Re\left[\frac{w\left(\frac{\omega - \omega_{ab}}{\Delta\omega_D}, \frac{\nu + \gamma_{ab}}{\Delta\omega_D}\right)}{1 - \frac{\nu\sqrt{\pi}}{\Delta\omega_D}w\left(\frac{\omega - \omega_{ab}}{\Delta\omega_D}, \frac{\nu + \gamma_{ab}}{\Delta\omega_D}\right)} + \right.$$

$$\left. + \frac{w\left(\frac{\omega + \omega_{ab}}{\Delta\omega_D}, \frac{\nu + \gamma_{ab}}{\Delta\omega_0}\right)}{1 - \frac{\nu\sqrt{\pi}}{\Delta\omega_D}w\left(\frac{\omega + \omega_{ab}}{\Delta\omega_D}, \frac{\nu + \gamma_{ab}}{\Delta\omega_D}\right)}\right].$$

В случае ν, $\gamma_{ab} \ll \Delta\omega_D$ получим для центра линии.

$$I(\omega_{ab}) = \frac{m\,|\vec{r}_{ab}|^2\, n\gamma_{ab}\,(\rho_a+\rho_b)\,\omega_{ab}^2}{3\sqrt{\pi}\,\Delta\omega_D}\left\{1+\frac{(\pi-2)\,\nu-2\gamma_{ab}}{\sqrt{\pi}\,\Delta\omega_D}\right\}.$$

При $(\gamma_{ab}+\nu)^2+(\omega-\omega_{ab})^2 \gg \Delta\omega_D^2$ получаем

$$I(\omega) = \frac{m\,|\vec{r}_{ab}|^2\, n\gamma_{ab}\,(\rho_a+\rho_b)\,\omega_{ab}^2}{3\pi}\times$$

$$\times\left\{\frac{\dfrac{1}{2}\dfrac{\Delta\omega_D^2(\nu+\gamma_{ab})}{(\omega-\omega_{ab})^2+(\nu+\gamma_{ab})^2}+\gamma_{ab}}{\left[\dfrac{1}{2}\dfrac{\Delta\omega_D^2(\nu+\gamma_{ab})}{(\omega-\omega_{ab})^2+(\nu+\gamma_{ab})^2}+\gamma_{ab}\right]^2+(\omega-\omega_{ab})^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{\dfrac{1}{2}\dfrac{\Delta\omega_D^2(\nu+\gamma_{ab})}{(\omega+\omega_{ab})^2+(\nu+\gamma_{ab})^2}+\gamma_{ab}}{\left[\dfrac{1}{2}\dfrac{\Delta\omega_D^2(\nu+\gamma_{ab})}{(\omega+\omega_{ab})^2+(\nu+\gamma_{ab})^2}+\gamma_{ab}\right]^2+(\omega+\omega_{ab})^2}\right\}. \qquad (26)$$

Вблизи центра (26) дает дисперсионное распределение

$$I(\omega) = \frac{m\,|\vec{r}_{ab}|^2\,\gamma_{ab}\, n\,(\rho_a+\rho_b)}{3\pi}\cdot\frac{\dfrac{1}{2}\dfrac{\Delta\omega_D^2}{\nu+\gamma_{ab}}+\gamma_{ab}}{(\omega-\omega_{ab})^2+\left[\dfrac{1}{2}\dfrac{\Delta\omega_D^2}{\nu+\gamma_{ab}}+\gamma_{ab}\right]^2}.$$

с шириной

$$\frac{\Delta\omega_D^2}{\nu+\gamma_{ab}}+\gamma_{ab}.$$

Сравнение соответствующих результатов классического и квантового расчетов (формулы (14) и (22); (15) и (23); (15а) и (24)) показывает, что в обоих случаях получаются одинаковые формы линии. Отличия же в выражениях для интенсивности возникают естественно из-за различного определения вектора поляризации в квантовом и классическом случаях.

Выражаем благодарность проф. Ю. Л. Климонтовичу за внимательное отношение к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Раутиан С. Г., Собельман И. И. «Успехи физических наук», **90**, вып. 2, 1966.
2. Климонтович Ю. Л. «Успехи физических наук», **101**, вып. 4, 1970.
3. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Физматгиз, 1962.
4. Фадеева В. Н., Терентьев Н. М. Таблицы значений интеграла вероятностей от комплексного аргумента. М., Гостехиздат, 1954.

Поступила в редакцию
22.3 1971 г.

Кафедра
общей физики для мехмата