

## СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 535.14; 535.342 : 539.196

# Проблема центров масс в задаче о контуре спектральных линий. II. Волновая функция и матрица плотности поглощающей свет молекулы после оптически активного столкновения

**С.Д. Творогов, О.Б. Родимова\***

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

Поступила в редакцию 24.12.2009 г.

Получена волновая функция «приготовленного» состояния активной (поглощающей квант) молекулы, возникающего после столкновения с поглощением кванта с частотой, далекой от резонанса, и не совпадающего с каким-либо из ее собственных состояний, построена соответствующая неравновесная матрица плотности. Показано возникновение зависимости матрицы плотности подсистемы центров масс от флуктуаций координат и импульсов центров масс.

**Ключевые слова:** длинноволновое приближение, поглощение света, крылья спектральных линий, нарушение ЛТР, неравновесная матрица плотности; longwave approximation, light absorption, spectralline wings, nonLTE, nonequilibrium density matrix.

## Введение

При отказе от длинноволнового приближения для центров масс молекул в выражении для коэффициента поглощения появляются дополнительные операторы, связанные с волновым вектором поля и с координатами центров масс [1]. Их наличие приводит к возникновению соотношений между коэффициентами поглощения и смещенными частотами, называемых правилами сумм. В выражения для правил сумм входят коммутаторы дополнительных операторов с гамильтонианом активной (поглощающей свет) молекулы. На основе правил сумм в [1] было сделано заключение о необходимости траекторий, выходящих за пределы элементарного объема при нерезонансном поглощении света, так как при отсутствии таковых возникает несовместность математических следствий из закона сохранения энергии, принципа причинности и стационарности динамических процессов при термодинамическом равновесии.

Физическая гипотеза «дрейфа», объясняющая появление «длинных» (сопоставимых с длиной световой волны) траекторий, выходящих за пределы элементарного объема, заключается в предположении, что активная молекула из состояния  $|n\rangle$  переходит в возбужденное, «приготовленное» нерезонансным поглощением кванта, состояние  $|nm\rangle$ , не являющееся собственным для ее гамильтониана. Дальнейшая

эволюция молекулы состоит в постепенном переходе, в процессе ряда столкновений (дрейфа), из «приготовленного» в собственное состояние  $|m\rangle$ , регламентируемое правилами отбора, чем и завершится начатый поглощением света квантовый переход  $n \rightarrow m$ .

Длинные траектории свидетельствуют о некотором упорядочении молекулярного хаоса в элементарном объеме  $\Delta V$ , иначе и длинная траектория может не вывести молекулу из элементарного объема. Несовпадение  $|nm\rangle$  с собственной функцией гамильтониана активной молекулы является тем нарушением локального статистического равновесия, которое приводит к появлению негиббсовской матрицы плотности в объеме  $\Delta V$ . При обращении к методу полуклассического представления оказывается, что возможность увидеть направленное перемещение активной молекулы во время распада приготовленного состояния связана с учетом квантовых флуктуаций.

Ниже получена волновая функция приготовленного состояния активной (поглощающей квант) молекулы, возникающего после столкновения с поглощением кванта с частотой, далекой от резонанса, и не совпадающего с каким-либо из ее собственных состояний, построена соответствующая неравновесная матрица плотности. Факторизация полной матрицы плотности приводит к неравновесности подсистемы центров масс.

Отметим, что в обсуждении известной задачи о столкновении двух молекул в присутствии поля мы выделим лишь те аспекты, которые существенны

\* **Станислав Дмитриевич Творогов**; Ольга Борисовна Родимова (rod@iao.ru).