«Оптика атмосферы и океана», **5**, № 9 (1992)

УДК 551.521.31

С.Д. Творогов

ОБ ИЗЛУЧЕНИИ И ПОГЛОЩЕНИИ СВЕТА В ВЕРХНИХ СЛОЯХ АТМОСФЕРЫ

С позиций современной полуклассической статистической электродинамики обсуждаются процессы молекулярного излучения и поглощения света в верхних слоях атмосферы.

1. Предисловие

В уравнение переноса излучения через молекулярную среду

$$\mathbf{k}_0 \mathrm{grad}\, J = -\varkappa J + \eta \tag{1}$$

для спектральной (частоты ω) интенсивности J луча, распространяющегося вдоль орта $\mathbf{k}_0$, входят $\varkappa(\omega)$ и $\eta(\omega)$ — коэффициенты поглощения и излучения. Когда

$$\eta = B(\omega, \mathrm{H})\varkappa , \tag{2}$$

с функцией Планка B(Θ — температура), говорят о локальном термодинамическом равновесии.

В данной статье обсуждается проблема $\varkappa$, η и (2) для условий верхней атмосферы. Этот анализ останется неизменным, если появится надобность учесть в (1) и рассеяние света.

В п. 2 напоминается вывод (1) из полуклассической статистической электродинамики. Критика весьма распространенного мнения о причине нарушения (2) в верхних слоях атмосферы представлена в п. 3. Особенности $\varkappa$ и η при малых давлениях перечислены в пп. 4 и 5, некоторые итоги подведены в п. 6.

Статья написана в стиле методического (и несколько авторизованного) обзора. Цель ее — обратить внимание на те элементы, которые отличают трактовку вопроса на языке уравнений Максвелла и феноменологическом, апеллирующем к «фотонным аналогиям». Как выясняется, вопрос не тривиален, когда рассматриваются радиационные процессы в верхних слоях атмосферы.

2. Полуклассическая статистическая электродинамика и коэффициент излучения

В «оптическом варианте» (немагнитный диэлектрик) уравнение Максвелла (для $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ — напряженности поля в точке $\mathbf{r}$ и в момент времени t; c — скорость света)

$$\mathrm{rot\,rot}\, \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} = 0 \tag{3}$$

содержит $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ — дипольный момент единицы объема. По причинам, которые станут ясными в п. 4, имеет смысл рассмотреть среду с пространственной дисперсией, когда спектральная компонента

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)\, e^{i\omega t}\, dt = \int f(\omega, \mathbf{r}')\, \mathbf{E}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \omega)\, d\mathbf{r}' \tag{4}$$

с некоторой $f(\omega, \mathbf{r}')$; $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ — спектральная компонента $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. Соотношения

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\varepsilon(\omega) - 1}{4\pi}\, \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) , \; f(\omega, \mathbf{r}') \sim \delta(\mathbf{r}') \tag{5}$$

демонстрируют переход от (4) к «обычному» варианту с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\omega)$.

В феноменологической электродинамике функция f (или величина ε) объявляется эмпирической [1, 2]. Термин «полуклассическая электродинамика» появляется тогда, когда для вычисления f привлекается квантовая механика (см., например, [3—9]):

$$\mathbf{P}(\boldsymbol{r}, t) = \mathrm{Sp}\, \hat\rho(t)\, \hat{\mathbf{P}}(\boldsymbol{r}) , \;\; i\hbar \frac{\partial\hat\rho}{\partial t} = \hat H \hat\rho - \hat\rho \hat H ,$$

$$\hat H = \hat H_0 + \hat H_{0R} , \;\; \hat H_{0R} = -\sum_\alpha e_\alpha \boldsymbol{r}_\alpha \mathbf{E}(\boldsymbol{r}_\alpha, t) , \tag{6}$$

$$\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha e_\alpha \boldsymbol{r}_\alpha \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_\alpha) .$$

Здесь $\hat{\rho}$ — матрица плотности системы, которую до включения поля описывает гамильтониан $\hat{H}_0$; $\hat{\mathbf{P}}$ — оператор дипольного момента единицы объема и в $\hat{H}_{0R}$ — энергию взаимодействия поля и системы (в дипольном приближении) входят e_α — заряд частицы с индексом α и ее координата $\mathbf{r}_\alpha$ (понимаемая, естественно, как аргумент волновой функции). Первое и второе выражения из (6) — обычное определение квантового среднего и эквивалентная уравнению Шредингера задача об эволюции квантовой системы в электромагнитном поле.

Прилагательное «статистическая» означает здесь трактовку спонтанного излучения как флуктуаций равновесного дипольного момента. Детальное обсуждение подобного утверждения есть в [1, 7–14], и, конечно же, сама проблема квантовых флуктуаций входит в философию квантовой теории (см., например, [15]). Соответствующий коррелятор имеет (в терминах (6)) вид

$$\Pi_x = \mathrm{Sp}\,\hat{\rho}\,\frac{1}{2}\left(\hat{x}\hat{x}'(t) + \hat{x}'(t)\,\hat{x}\right). \tag{7}$$

Через $\hat{x}$ обозначен оператор некоторой физической величины, и $\hat{x}'(t) = \exp(-t\,/\,i\hbar)\,\hat{H}_0\,\hat{x}\exp(t\,/\,i\hbar)\,\hat{H}_0)$. О равновесной ситуации говорят, когда в (7)

$$\hat{\rho} \to \hat{\rho}^{(0)} \tag{8}$$

и $\hat{\rho}^{(0)}$ — матрица плотности квантовой системы до включения поля. В сущности, (8) есть начальное условие для (6), вполне достаточное при вычислении (7), — ведь параметр разложения по степеням поля (D — матричный элемент дипольного момента) [5, 6]

$$\xi = DE/(\hbar\beta) \ll 1. \tag{9}$$

Действительно, для условий верхней атмосферы β либо доплеровская ширина линии γ_d, либо $\sqrt{\gamma_d\gamma_l}$ с γ_l — дисперсионной шириной; для солнечного излучения E едва достигает 10 В/см.

Простые качественные соображения легко позволяют представить спонтанное излучение как итог беспорядочного движения дипольного момента около своего нулевого (в отсутствие поля — см. (8)) среднего.

Все очевидно и с формальной стороны: флуктуации $\delta\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ надобно добавить к $\mathbf{P}$, и подстановка $\mathbf{P}+\delta\mathbf{P}$ вместо $\mathbf{P}$ в (3) превращает его в неоднородное уравнение; частное решение последнего ($\sim \delta\mathbf{P}$) и будет описывать собственное излучение среды. Чтобы получить (1), достаточно использовать следующий из (3) закон сохранения энергии в электродинамике, полагать J величиной вектора Пойнтинга и ввести лучи геометрической оптики. (Последнее бесспорно для среды без рассеяния света). При связи (4) итогом окажутся выражения [14]

$$\eta = \frac{4\hbar\omega^5}{\pi^2 c^4}\int\limits_0^\infty \frac{d\lambda\lambda^2\,\mathrm{Im}\,\Gamma(\omega,\lambda)\,\Lambda(\omega,\lambda)}{\left|\lambda^2 - \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{4\pi\omega^2}{c^2}\,\Gamma(\omega,\lambda)\right|^2}, \tag{10}$$

$$\varkappa(\omega) = \frac{4\pi\omega}{c}\,\mathrm{Im}\,\Gamma(\omega,\lambda)\Big|_{\lambda=\omega/c}. \tag{11}$$

Функция $\Gamma(\omega, \lambda)$ — преобразование Фурье по $\mathbf{r}$ от f из (4), $\Lambda(\omega, \lambda)$ — пространственно-временной спектр коррелятора (7) для $\delta\mathbf{P}$; у изотропной среды Γ и Λ зависят от $\lambda = |\boldsymbol{\lambda}|$.

Проблему Λ решает флуктуационно-диссипационная теорема, и очень схематично напомним ее вывод [10–12, 16, 17].

Положим, что «системой» в (6) объявлен объем с достаточно большим числом молекул. Решение (6) в первом порядке теории возмущений (в отличие от (7) и (8) в нулевом порядке $\mathbf{P} = 0$) по параметру (9) хорошо известно по учебникам квантовой механики (например, [18]), и для Γ получается выражение вида $\Gamma(\omega) \sim \sum\limits_{a,b}|\alpha_{ab}|^2\,\delta(\omega-\omega_{ba})(\rho_a^{(0)}-\rho_b^{(0)}) \equiv \sum\limits_{a,b}\Gamma_{ab}(\omega)$. Здесь a, $|a\rangle$, $\mathbf{E}_a$ — квантовые индексы, собственные функции и собственные значения $\hat{H}_0$; $\omega_{ba} = (\mathbf{E}_b - \mathbf{E}_a)\,/\,\hbar$, $\rho_a^{(0)} = \langle a|\hat{\rho}^{(0)}|a\rangle$ — вероятность равновесного (до включения поля) состояния a, $x_b = \langle a|\hat{x}|b\rangle$ и $\hat{x}$ — векторная компонента $\hat{\mathbf{P}}$; δ-функция — математическое отражение «золотого» правила Ферми, и сингулярность снимается тем, что $\sum_{a,b}$ — фактически интеграл, если число молекул велико. Те же технические приемы дают для спектра (7) величину $\Gamma(\omega) \sim \sum_{a,b} |\alpha_{ab}|^2 \delta(\omega - \omega_{ba}) (\rho_a^{(0)} - \rho_b^{(0)}) \equiv \sum_{a,b} \Gamma_{ab}(\omega)$. Теперь нетрудно представить соотношение

$$\Lambda = \sum_{a,b} \frac{\rho_a + \rho_b}{\rho_a - \rho_b} \Gamma_{ab}(\omega) \tag{12}$$

которое и есть общая формулировка флуктуационно-диссипационной теоремы [12] (коэффициенты в последних соотношениях не составляют проблемы, они учтены в (10), (11) и подобраны так, чтобы в (12) было равенство).

В случае термодинамического равновесия (пли локального равновесия в смысле [16]), когда

$$\rho^{(0)} = \frac{1}{Z} \exp(-\hat{H}_0/k\Theta) , \tag{13}$$

(k — постоянная Больцмана; Z — нормировка $\mathrm{Sp}\rho^{(0)} = 1$), δ-функция из Γ_{ab} представляет возможность написать (12) как

$$\Lambda = \frac{1 + \exp(-\hbar\omega/k\Theta)}{1 - \exp(-\hbar\omega/k\Theta)} \Gamma(\omega, \lambda) , \tag{14}$$

и (14) — наиболее распространенная формулировка теоремы. Выражения (14) и (11) гласят, что теперь для вычисления коррелятора квантовых флуктуаций достаточна любая информация о коэффициенте поглощения — эмпирическая, вычисленная в бинарном приближении и т. п.

3. О нарушении (2) в верхних слоях атмосферы. Критический обзор

В расчетах η для верхних слоев атмосферы бытует мнение, восходящее, по-видимому, к статье [19] (см. еще [20]) о неисполнении (13) из-за того, что весьма редкие в этих условиях столкновения не способны восстановить нарушенное излучением равновесие; априорно утверждается, что не успевают релаксировать к (13) именно колебательные (и электронные) состояния молекул. Формальным итогом этой позиции оказалось выражение

$$\eta = \varkappa B \frac{\tau' + \tau y}{\tau' + \tau} , \quad y = \frac{\int J(\omega, \boldsymbol{k}_0) \, \mathrm{d}\omega \, d\boldsymbol{k}_0}{4\pi \int \varkappa(\omega) B(\omega) \, d\omega} , \tag{15}$$

где τ названо временем колебательной столкновительной релаксации, и τ' — есть время жизни молекулы в возбужденном состоянии. Понятно, что (15) переходит в (2) при $\tau \to 0$ — это соответствует нижним слоям атмосферы.

Эти же идеи в более рафинированном математическом исполнении изложены в [21], и результаты ее использованы для обширных расчетов интенсивности [22—24]. В серии [25, 26] просто принимается, что колебательная температура Θ' (в смысле (13)) отлична от Θ, и для Θ' решается обратная задача.

Методическую основу обсуждаемых сейчас работ составляет «балансный подход»: переходы между состояниями молекулы из-за взаимодействия с полем и межмолекулярных столкновений объявляются независимыми; поэтому изменение заселенности состояния со временем возможно представить как разность между актами «прихода» и «ухода» с соответствующего энергетического уровня. Подобный взгляд на описание рассматриваемых сейчас процессов существовал на заре «лазерной революции» (см., например, [27]) и весьма популярен в астрофизике (например, [28, 29]). Однако начиная фактически с [3, 4, 9], «волновая» точка зрения (построенная на (3) и (6)) становится общепринятой. В сущности, вывод (1), (10), (13) из (3) и (4) — техническая ее реализация. Добавим еще, что современная нелинейная спектроскопия, много внимания уделяющая эффектам при малом давлении газа (например, [30, 31]), и физика плазмы (см., например, [17, 32—34]) также целиком базируются на полуклассической электродинамике.

Главный тезис нашего критического обзора состоит в утверждении, что «балансный» подход в довольно тонкой задаче о нарушении (2) ведет к ошибке.

Надобность обсуждения этого вопроса несомненна. Действительно, (15) гласит о зависимости η от J. Это, кстати, радикально меняет математическую структуру (1) — вместо просто неоднородного дифференциального уравнения придется решать еще и интегральное относительно y из (15); более того, возникают идеи о «лазерном эффекте» в верхних слоях атмосферы (см., например, [35]). Между тем обсуждение (7)–(9) и (10)–(12) недвусмысленно показывает, что связь между η и J может появиться только для сильных лазерных полей (спонтанное излучение в присутствии сильного поля [8, 36, 37]) независимо от того, исполняется (13) или нет. Собственно, сейчас приведен главный аргумент в духе «доказательства от противного». Но это, конечно же, не освобождает от анализа соображений, дающих (15).

Непременный элемент «балансной» схемы — привлечение для самого вывода (1) соображений с коэффициентами Эйнштейна. Процедура эта совершенно безупречна, когда обсуждается равновесное излучение. Действительно, для анализа его достаточна энергия системы, и, согласно выводам квантовой электродинамики [38], должна здесь сработать аналогия фотоны—частицы. (Напомним, что волновые функции фотонов существуют в пространстве, которое является Фурье преобразованием реального мира [38, 39]). Именно поэтому и можно оперировать понятием «плотность фотонов» как «плотностью реальных частиц», трактуя столкновения молекула—молекула и «столкновения» молекула—фотон совершенно равноправными. Однако в (1) речь идет о распространении света (а не о свойствах поля внутри полости с абсолютно черными стенками), и эффективность аналогии фотоны—частицы надо доказывать. Но она принимается без оговорок и, более того, дополняется новыми элементами (далее обсуждается [19]). После априорного утверждения о неравновесности колебательных состояний появляется выражение $\eta = \varkappa B(E/E^{(0)})$, в котором E и $E^{(0)}$ — средняя (в статическом смысле) колебательная энергия для нарушенного термодинамического равновесия и при его исполнении. Далее авторы пишут уравнение $dE/dt = (-\gamma)\,(E-E^{(0)})$ с временем колебательной релаксации $\tau = 1/\gamma$. Казалось бы, для вычисления входящего в η отношения $E/E^{(0)}$ надо найти $\lim E/E^{(0)}$ при $t \to 0$ — естественный здесь стационарный предел; но тогда $E/E^{(0)} = 1$, что, конечно же, никак не устраивает авторов. Поэтому появляется трюк: опираясь почти на чисто семантический смысл величин J и dE/dt, пишется равенство

$$-\gamma\,(E - E^{(0)}) = \int (\mathbf{k}_0 \,\mathrm{grad}\, J)\, d\omega\, d\mathbf{k}_0 \,. \tag{16}$$

После подстановки (1) с полученным η появляется уравнение относительно $E/E^{(0)}$, что и дает (15). (Значением τ' объявляется величина $\sim\int \varkappa(\omega)B(\omega)d\omega$, и это вполне соответствует квантовой механике [18]).

Комментарий подобных рассуждений должен основываться на хорошо ныне понятых взаимоотношениях между процессом взаимодействия квантовых систем с полем и их релаксацией. Центральный тезис состоит в том, что оба фактора надобно рассматривать одновременно — они «интерферируют» в одной квантовой задаче (6). Прекрасной качественной иллюстрацией служит исчерпывающий анализ [40] резонанса: $\omega \simeq \omega_0$ — частоте молекулярного перехода. (Для крыла линии положение еще более определенное [14, 41, 42]). На участке свободного пробега волновая функция взаимодействующей с полем молекулы осциллирует (с частотой $\mathbf{ED}/\hbar$ — см. (9)) между верхним и нижним состояниями [43]. Необходимо столкновение, чтобы прервать этот периодический процесс, и только тогда произойдет поглощение кванта. Разумеется, можно и по периодической волновой функции вычислить вероятность перехода в единицу времени — она содержит $\delta(\omega-\omega_0)$ (см., например, [18]). Фактически сингулярность устраняется заменой δ-функции контуром линии, но для его появления обязательна релаксация, участвующая в игре одновременно с полем.

Формальной иллюстрацией этих «волновых» идей может служить популярная ныне «лазерная» система уравнений, полученная из (6) редукцией к матрице плотности «активной» (взаимодействующей с полем) молекулы. Например, в [8] для двухуровневой системы она пишется в виде

$$\partial\rho_{nn}(t)/\partial t + \upsilon\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{R}}\,\rho_{nn} = \frac{1}{i\hbar}(\rho_{nm}\boldsymbol{D}_{mn} - \boldsymbol{D}_{nm}\,\rho_{mn})\mathbf{E} - \gamma_n(\rho_{nn} - \rho_n^{(0)}),$$

$$\partial\rho_{mm}(t)/\partial t + \upsilon\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{R}}\,\rho_{mm} = -\frac{1}{i\hbar}(\rho_{nm}\boldsymbol{D}_{mn} - \boldsymbol{D}_{nm}\,\rho_{mn})\mathbf{E} - \gamma_m(\rho_{mm} - \rho_m^{(0)}),$$

$$(\partial/\partial t + \upsilon\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{R}} + i\omega_0 + \gamma_{nm})\rho_{nm} = \frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{D}_{nm}(\rho_{nn} - \rho_{mm})\mathbf{E}\,,$$

$$\rho_{mn} = \rho_{nm}^{*}\,. \tag{17}$$

Теперь $\hat{\rho}$ — матрица плотности «активной» молекулы, и ее гамильтониан $\hat{H}_0$ входит в (13); n, $|n\rangle$, E_n — квантовый индекс, собственная функция и собственное значение $\hat{H}_0$, $\omega_0 = (E_n - E_m)\hbar$, $\rho_{nm} = \langle n|\hat{\rho}|m\rangle$, $\rho_n^{(0)} = \langle n|\hat{\rho}^{(0)}|n\rangle$, $D_{nm} = \langle n|\mathbf{D}|m\rangle$ для $\mathbf{D}$ — дипольного момента молекулы. Далее, $\mathbf{R}$ и $\mathbf{v}$—

координата центра масс и его скорость; в линейном по полю варианте можно вычеркнуть $\mathbf{v}\,\mathrm{grad}_{\overline{\mathrm{R}}}(\ldots)$, компенсируя это введением эффекта Доплера по схеме из п. 4. Числа γ_n, γ_m, $\gamma_{nm} = \frac{1}{2}(\gamma_n + \gamma_m)$ как раз и являются постоянными релаксации; как обычно, $1/\gamma_n$ — время релаксации. Систему (16) надо рассматривать вместе с (3) и очевидным определением $\mathbf{P} = N\int d\mathbf{v}\sum(\rho_{nm}\mathbf{D}_{mn} + \rho_{nm}\mathbf{D}_{nm})$ дипольного момента (N — число «активных молекул в единице объема).

Теперь входящие в (16) величины можно увидеть и в (17) — написав очевидное $E = \sum(\rho_{nn}E_n + \rho_{mm}E_m)$ и заменив γ_n и γ_m, как это часто делается, средним γ, получим соотношение

$$\frac{\gamma}{\tilde{\omega}}\int \varkappa(\omega)\, J(\omega, \boldsymbol{k}_0)\, d\omega\, d\boldsymbol{k}_0 = \Delta E + 4\pi\int \eta\, d\omega - \int d\omega\, d\boldsymbol{k}_0\, \boldsymbol{k}_0\, \mathrm{grad}\, J - \gamma(E - E^{(0)})\,. \tag{18}$$

Здесь ΔE — изменение внутренней энергии в единицу времени, ω — средняя частота, и имеется в виду стационарное E. К (18) ведут вполне стандартные вычисления, включающие усреднение по времени, переход к спектральным компонентам и правила обращения с преобразованием Фурье нестационарных функций. Во время расчета возникает комбинация $\mathbf{E}(\partial P/\partial t) = \mathbf{Ej} = Q$, где Q — количество поглощенного тепла, так как $\mathbf{j} = \partial\mathbf{P}/\partial t$ — есть ток связанных частиц. Затем, уже для спектральных компонент, $Q = \varkappa J$, и привлекается (1).

При предположении (16) появится

$$\frac{\gamma}{\tilde{\omega}}\int \varkappa(\omega)\, J(\omega, \boldsymbol{k}_0)\, d\omega\, d\boldsymbol{k}_0 = \Delta E + 4\pi\int \eta(\omega)\, d\omega\,. \tag{19}$$

В «балансной» схеме, пролонгированной на задачу о распространении света, правая часть (19) должна, для стационарной ситуации, совпадать в точности с количеством исчезнувшей энергии поля. Но возможно это только при явно абсурдном $\gamma \sim \tilde{\omega}$(?!).

Собственно, «волновая» трактовка (18) совершенно очевидна — это закон сохранения энергии из полуклассической электродинамики. Особой прагматической значимости форма (18), соответствующая конкретностям (17), не имеет, и здесь обсуждалась только ради (19), призванной подчеркнуть произвольность предположения (16).

4. О контуре линии поглощения для условий верхних слоев атмосферы

Физические аспекты задачи о контуре спектральной линии при малом давлении хорошо известны — видную роль должен играть эффект Доплера [44]. Самый простой рецепт учета его состоит в замене частоты центра линии ω_0 на $\omega_0+\boldsymbol{\kappa}\mathbf{v}$ ($\mathbf{v}$ — по-прежнему скорость центра масс, и $\boldsymbol{\kappa} = (\omega/c)\boldsymbol{\kappa}_0$ — волновой вектор поля) с последующим усреднением по максвелловскому распределению молекул по скоростям.

Другому существенному элементу предшествует небольшое предисловие. Контур изолированной молекулы есть $\frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\int\limits_0^\infty dt\, \exp(i(\omega - \omega_0)t$; после введения эффекта Доплера появится $\mathbf{v}t$, и произведение это, учитывая влияние столкновений на траекторию центра масс, надо написать как $\mathbf{R(t)}$. Последняя величина, безусловно, случайная, и надобно проводить усреднение по $W(\mathbf{R}, t, \mathbf{v})$ — вероятности смещения центра масс за время t на величину $\mathbf{R}$ при начальной скорости движения $\mathbf{v}$. Тогда контур линии [45]

$$g(\Omega) = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty dt\int d\mathbf{r}\, d\mathbf{v}\; W(\mathbf{r}, t, \mathbf{v})\, e^{i\Omega t - i\mathbf{kR}}\,,\quad \Omega = \omega - \omega_0\,. \tag{20}$$

Выражение (20) трактуется как учитывающее влияние столкновений на доплеровскнй контур.

Более обстоятельный учет соударений ведет к свертке [44—46]:

$$g'(\Omega) = \frac{\beta}{\pi}\int \frac{g(\Omega')\, d\Omega'}{(\Omega - \Omega')^2 + \beta^2} \tag{21}$$

с функцией (20) и β — лоренцовской полушириной линии; для крыла линии β заменяется соответствующей функцией $\beta(\Omega)$ [14].

Итак, расчету контура должно предшествовать вычисление W. Функция эта — решение уравнения Больцмана [32,47]

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \mathbf{v}\ \mathrm{grad}\ W = \mathrm{St}(W) \tag{22}$$

в которое входит интеграл столкновений $\mathrm{St}(W)$. Если положить $\mathrm{St}(W) = 0$, то итогом окажется процедура из начала пункта (на этот пункт была ссылка во время обсуждения (17)). Возможно использовать уравнение типа Фоккера–Планка [32, 48], приближение «легкие активные молекулы в газе из тяжелых буферных молекул» [32] и т.п. Очень популярен [45] вариант из [49]; хотя формально он описывает ситуацию «тяжелые активные молекулы в легком буферном газе», его аппроксимационные возможности гораздо шире. Конечно же, при аккуратных расчетах контура линии на больших высотах выбор $\mathrm{St}(W)$ в (20), адекватного физическим условиям задачи, — необходимый элемент анализа.

Теперь предстоит убедиться, что стоящая за (20) (и (21)) физическая картина приводит к пространственной дисперсии (4).

Доказательство начинает решение (6) в первом порядке теории возмущений по (9):

$$\mathbf{P}(\mathbf{r},\ \omega) = \int_0^\infty dt\ \mathrm{e}^{i\omega t}\ \mathrm{Sp}\ \hat{\rho}^{(0)} \frac{1}{i\hbar}\left(\sum_\alpha \mathbf{E}(\mathbf{r}_\alpha,\ \omega)\ e_\alpha \mathbf{r}_\alpha,\ \mathrm{e}^{-(t/i\hbar)\hat{H}_0} \sum_{\alpha'} e_{\alpha'} \mathbf{r}_{\alpha'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha'})\ \mathrm{e}^{(t/i\hbar)\hat{H}_0}\right]. \tag{23}$$

Далее следуют стандартные [14] упрощения (23).

Длинноволновое приближение для внутримолекулярных степенен свободы, трактовка «активной» молекулы как динамической подсистемы и очевидная изотропность среды позволяют выделить $\mathbf{E}(\mathbf{R},\ \omega)$ в (23) с прежним смыслом $\mathbf{R}$. Появится множитель «интенсивность линии S» и $\exp(-i\omega_0 t)$ (последний — из представления взаимодействия для $\exp(\pm(t\ /\ i\hbar)\hat{H}_0)$. Весьма примечательна роль $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha'})$; разумеется, уже перечисленные обстоятельства предоставляют возможность заменить ее на $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R})$. Конечно же, $\mathbf{R}$ объявляется величиной классической, и δ-функция, во время необходимого для перехода к макроскопической электродинамике усреднения (23) по элементарному объему, заставит рассматривать только те траектории центров масс, которые начинаются в точке $\mathbf{r}$. Иными словами, надобно будет искать вероятность смещения на $\mathbf{R}-\mathbf{r}$ (т.е. $W = W(\mathbf{r}-\mathbf{R},\ t,\ \mathbf{v})$). Наконец, надо обратить внимание на то, что, из-за классичности $\mathbf{R}$, операция $\mathrm{Sp}\hat{\rho}^{(0)}$ содержит $\int d\mathbf{R} d\mathbf{v} W(\ldots)$.

Включив все квантовые операции и интегрирование по $\mathbf{v}$ в определение f из (4), приняв во внимание зависимость «отклика» системы на поле именно от $\mathbf{r}-\mathbf{R}$, после выделения $\int d\mathbf{R}$ из Sp и очевидной замены переменной интегрирования увидим выражение (4).

Коэффициент поглощения отдельной линией равен $Sg(\Omega)$, и сейчас для него есть явный вид (20). Собственно, это и дает возможность написать $\Gamma(\Omega,\ \lambda)$ для (10): сопоставляя (4), (11), (10) и (20), получим

$$\Gamma(\Omega,\ \lambda) = \frac{Sc}{4\pi^2 \omega}\ i \int_0^\infty dt \int d\mathbf{r}\ d\mathbf{v}\ \exp(i\Omega t - i\lambda\mathbf{R})\ W(\mathbf{R},\ t,\ \mathbf{v}). \tag{24}$$

Полная $\Gamma(\omega,\ \lambda)$ — есть сумма (24) по линиям. Обобщение (24) на (21) очевидно: для Re Γ надо написать свертку вида (21) с (24) вместо $g(\Omega')$, а Im Γ найти через дисперсионные соотношения. (Здесь стоит обратить внимание на возможно интересную задачу о рефракции луча (вычисление $\boldsymbol{\kappa}_0$ в (1)) в среде с пространственной дисперсией).

Физический смысл (4) для малых давлений довольно ясен. В самом деле, пространственная дисперсия возникает тогда, когда почему-либо нельзя воспользоваться длинноволновым приближением для центров масс [14. 41]. Большая длина свободного пробега и взаимодействие молекулы с резонансным полем именно на участке свободного пробега — обстоятельства, делающие длинноволновое приближение неприемлемым. В [14] подчеркивалось, что пространственная дисперсия в крыльях полос и рассматриваемая сейчас — предельные варианты (по величине Ω) одной проблемы «центры масс молекул».

5. Коэффициент излучения при малом давлении

Вернемся к обсуждению (10). Как выясняется [14], выражение (10) превращается в (2) при исполнении двух условий: а) нет пространственной дисперсии — т.е. (4) переходит в (5); б) существует термодинамическое равновесие — матрица плотности (13) и формула (14) для коррелятора.

В [14] детально обсуждалась пространственная дисперсия мнимой части диэлектрической проницаемости, присущая крыльям полос, и есть убедительные экспериментальные доказательства ее существования, в том числе и нарушение локального термодинамического равновесия. Подобный численный и экспериментальный анализ характерной для малых давлений пространственной дисперсии еще предстоит.

Есть одна вполне очевидная причина нарушения условия (б) в верхних слоях атмосферы — фотохимические реакции (аналогичный вопрос рассматривался в [50]). Потоки заряженных частиц и т.п. явно могут изменить заселенность квантовых состояний. Теперь надо ориентироваться на (12), и необходима небольшая модернизация его вывода. Строится она на том, что в обычном для газа бинарном варианте контур линии предстает как статистическое среднее от δ-функции, аргумент которой — «золотое» правило Ферми в задаче о сталкивающейся паре молекул [14]; тем самым сохраняется главный формальный элемент в уяснении связи между Λ и ϰ.

Итогом оказывается выражение

$$\Lambda = \frac{1 + e^{-\hbar\omega/k\Theta}}{1 - e^{-\hbar\omega/k\Theta}} \sum_{nm} \frac{1 + e^{-\hbar\omega/k\Theta}\,\sigma_{mn}}{1 + e^{-\hbar w/k\Theta}} \, \frac{1 - e^{-\hbar\omega/k\Theta}}{1 - e^{\hbar\omega/k\Theta}\,\sigma_{mn}} \, \mathrm{Im}\,\tilde{\Gamma}_{mn}\,. \tag{25}$$

По-прежнему n, m — квантовые индексы «активной» молекулы, и Σ — сумма по линиям (n — нижнее состояние); $\sigma_{mn} = \sigma_m/\sigma_n$, $\sigma_n = \rho_n\, /\, \rho_n^{(0)}$ — отношение заселенности, возникшей из-за уже упоминавшихся внешних воздействий, к равновесной (здесь имеются в виду только внутримолекулярные степени свободы). Величина Γ_{mn} строится как (24), только в интенсивность линии добавляется множитель σ_n.

Существует еще одна, и универсальная, причина систематического уклонения от (13)— термодинамические флуктуации распределения состояний при сравнительно небольшом числе молекул в единице объема. Конечно, обсуждавшиеся в § 2 электромагнитные флуктуации «мгновении» на фоне термодинамических, и поэтому можно вводить их непосредственно в (10).

Проблема флуктуаций функции распределения хорошо известна в физической кинетике [32], и вновь возвращает нас к уравнению (22). Последующее решение исполнено при двух упрощениях. Во-первых, W полагается устойчивым распределением [51]—т.е.

$$\int W(\mathbf{R}_1, t_1, \mathbf{v})\, W(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}, t_1 + t, \mathbf{v})\, d\mathbf{R}_1 dt_1 = \tau W(\mathbf{R}_1, t_1, \mathbf{v})$$

с временем релаксации τ. Во-вторых, опираясь па стандартную трактовку релаксации систем, но очень удаленных от состояния равновесия, полагаем, что в уравнении типа (22) для коррелятора термодинамических флуктуаций St $(W) = (-1/\tau)\, W$.

Остальные приближения, в сущности, сугубо технические, и в ответе надо в числителе подынтегральной функции из (10) к слагаемому $c\mathrm{th}(\hbar\,\omega/k\Theta)$ $(\mathrm{Im}\,\Gamma^2)$ — оно соответствует (14) — добавить

$$N \frac{|D|^4}{\hbar^2}\, \rho_n^{(0)}\, [\mu_m - \mu_n\, e^{-\hbar\omega/k\Theta}] \tag{26}$$

с суммированием по линиям. По-прежнему N — число «активных» молекул в единице объема, D_{nm} — матричные элементы дипольного момента и $\rho_n^{(0)}$ — как в (15). Далее

$$\mu_n = \frac{\tau_n}{\upsilon_0^2 \lambda} \frac{1}{2\pi^3} \int k dk \int d\Omega' g(\Omega', k)\, B(\Omega - \Omega', k, \lambda)$$

с контуром (20) (или, при надобности, (21)), а времени релаксации приписан индекс состояния; υ_0^2 — средняя квадратичная скорость, а

$$B(\Omega - \Omega', k, \lambda) = \int_0^\infty dz\, e^{-\tau/z}\, \frac{\sin(\lambda\upsilon_0 z)\, \sin(k\upsilon_0 z)\, \cos((\Omega - \Omega')z)}{z^2}.$$

6. Заключительные замечания

Условия верхних слоев атмосферы привносят весьма нетривиальные аспекты в проблему описания поглощения и излучения света. И ниже просто перечислены возникающие здесь задачи.

Вопросу о контуре спектральной линии, пространственной дисперсии и влиянии ее на коэффициенты поглощения и излучения (формулы (20), (21), (24), (10), (11)) должен предшествовать аккуратный выбор статистической модели для интеграла столкновений в уравнении (22).

Только обстоятельный численный анализ для различных спектральных участков, поглощающих газов и моделей атмосферы позволит установить, насколько существенны пространственная дисперсия и флуктуации распределения (соотношения (10) и (26)) для коэффициента излучения и нарушения локального термодинамического равновесия.

Изменение коэффициента излучения из-за фотохимических реакций и других внешних воздействий (выражение (25)) может предоставить интересные возможности для соответствующих обратных задач (например, при лимбовых измерениях со спутников).

Во многих прикладных задачах атмосферной оптики фигурируют весьма длинные трассы, и может появиться надобность учитывать на них рефракцию. Ее величина для среды с пространственной дисперсией (типа той, которой соответствует (24)) пока не оценена.

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: ГИТТЛ, 1972. 532 с.
2. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1970. 856 с.
3. Бломберген Н. Нелинейная оптика. М.: Мир, 1966. 424 с.
4. Ахманов С.А., Хохлов Р.В. Проблемы нелинейной оптики. М.: ВИНИТИ, 1964. 295 с.
5. Келих С. Молекулярная нелинейная оптика. М.: Наука, 1981. 671 с.
6. Файн В.М. Квантовая радиофизика. Фотоны и нелинейные среды. М.: Сов. Радио, 1972. Т. 1. 472 с.
7. Гордов Е.П., Творогов С.Д. Метод полуклассического представления квантовой теории. Новосибирск: Наука, 1984. 167 с.
8. Волновые и флуктуационные процессы в лазерах/Под ред. Ю.Л. Клнмонтовича. М.: Наука, 1974. 415 с.
9. Файн В.М., Ханин Я.И. Квантовая радиофизика. М.: Сов. радио, 1965. 608 с.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Физматгиз, 1964. 454 с.
11. Левин И.Л., Рытов С.М. Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике. М.: Наука, 1967. 307 с.
12. Климонтович Ю.Л. Кинетическая теория электромагнитных процессов. М.: Наука, 1980. 373 с.
13. Несмелова Л.И., Творогов С.Д., Фомин В.В. Спектроскопия крыльев линий. Новосибирск: Наука, 1977. 141 с.
14. Несмелова Л.И., Родимова О.Б., Творогов С.Д. Контур спектральной линии и межмолекулярное взаимодействие. Новосибирск: Наука, 1986. 214 с.
15. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1976. 664 с.
16. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 414 с.
17. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1978. Т. 1. 405 с. Т. 2. 399 с.
18. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука. 1973. 703 с.
19. Curtis A.R., Goody R.M. //Proc. Roy. Soc. 1956. V. 236A. № 1205. P. 193–206.
20. Гуди Р. Атмосферная радиация. М.: Мир, 1966. 522 с.
21. Швед Г.М. //Астрономический журнал. 1974. Т. 51. Вып. 4. С. 841–851.
22. Кутепов А.А., Швед Г.М. //Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1978. Т. 14. № 1. С. 28–42.
23. Швед Г.М.. Степанова Г.И, Кутепов А.А. //Изв. АН СССР. Сер ФАО. 1978. Т. 14. № 8. С. 833-845.
24. Демьяников А.И., Кутепов А.А. //Изв. АН СССР. Сер ФАО. 1987. Т. 23. № 5. С. 510–517.
25. Zachor A.S., Sharma R.D. //J. Geophys. Res. 1975. V. 90. P. 467–484.
26. Rinsland C.P., Zander R., Hambung J.C., Farmer C.B., Norton R.H. //J. Geophys. Res. 1989 V. 94. P. 16303–16322.
27. Машкевич В.С. Кинетическая теория лазеров. М.: Наука. 1971. 472 с.
28. Михалас Д. Звездные атмосферы. М.: Мир, 1982. Т. 1. 352 с. Т. 2. 422 с.
29. Иванов В.В. Перенос излучения и спектры небесных тел. М.: Наука, 1969. 472 с.
30. Раутиан С.Г., Смирнов Г.И., Шалагин А.И. Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул. Новосибирск: Наука, 1979. 312 с.
31. Апанасевич П.А. Основы теории взаимодействия света с веществом. Минск: Наука и техника, 1977. 495 с.
32. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
33. Климонтович Ю.Л. Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы. М.: Наука, 1975. 352 с.
34. Крефт В.-Д., Крелиг Д., Эбелинг В., Репке Г. Квантовая статистика систем заряженных частиц. М.: Мир, 1988. 405 с.
35. МануйловаР.О., Швед Г.М. //Геомагнетизм и аэрономия. 1991. Т. 31 № 3. С. 506–511
36. Хакен Г.. Вайдлих В. Квантовые флуктуации излучения лазера. М.: Мир. 1974. С. 143–205.
37. Лэкс М. Флуктуации и когерентные явления. М.: Мир. 1974. 300 с.
38. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М.: ИЛ, 1956. 491 с.
39. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1969. 623 с.
40. Бурштейн А.И. Лекции по курсу «Квантовая кинетика». Новосибирск: Изд. НГУ, 1968. 231 с.
41. Творогов С.Д. //Оптика атмосферы. 1988. Т. 1. № 1. С. 13–26.
42. Творогов С.Д., Родимова О.Б., Несмелова Л.И. //Оптика атмосферы. 1990. Т. 3. № 5. С. 468–483.
43. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука. 1974. 752 с.
44. Зуев В.Е. Распространение лазерного излучения в атмосфере. М.: Радио и связь, 1981. 287 с.
45. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И.. Юков А.Е. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979. 344 с.
46. Пеннер С.С. Количественная молекулярная спектроскопия и излучательная способность газов. М.: ИЛ. 1963. 492 с.
47. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978. 495 с.
48. Терлецкий Я.П. Статистическая физика. М.: Высшая школа, 1966. 236 с.
49. Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии. М.: ИЛ, 1947. 168 с.
50. Kaye J.A., Kumer J.B. //Appl. Optics. 1987. V. 26. № 22. P. 4747–4754.
51. Пугачев В.С. Теория случайных функций. М.: Физматгиз, 1960. 883 с.

Институт оптики атмосферы СО РАН,
Томск

Поступила в редакцию
2 июля 1992 г.

S.D. Tvorogov. **On the Light Absorption and Radiation in the Upper Layers of the Atmosphere**.

The processes of molecular absorption and radiation of an electromagnetic field in the upper layers of the atmosphere are treated from the point of view of the up-to-date semiclassical statistical electrodynamics.