

СПЕКТРОСКОПИЯ АТМОСФЕРНЫХ ГАЗОВ

УДК 553.34:551.508:621

М.Р. Черкасов

К ТЕОРИИ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ФОРМЫ СПЕКТРА
В УДАРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Дается модификация предложенного автором ранее метода расчета совокупности релаксационных параметров, характеризующих в ударном приближении форму спектра [15], позволяющая существенно снизить вычислительные трудности. В качестве иллюстрации рассматривается самоуширение линий вращательного спектра аммиака.

Введение

Столкновительное уширение, или уширение давлением, является важнейшим механизмом формирования профилей спектральных линий и спектра в целом в широком диапазоне термодинамических условий. В ударном приближении, которое применимо в случае не слишком плотных газовых сред для описания центральных частей спектральных линий, форма спектра характеризуется совокупностью независимых от частоты параметров, являющихся в представлении пространства линий [1] приведенными матричными элементами релаксационного супероператора¹, имеющего в приближении классических траекторий вид

$$\hat{\Lambda} = -i \eta_b \int dv P(v) \text{Tr}^b \{ [1 - \hat{U}(\infty, -\infty)] \rho^b \}, \tag{1}$$

где η_b – плотность уширяющего газа, играющего для поглощающей излучение молекулы роль термостата; $\int dv P(v)$ – оператор усреднения по классическим параметрам столкновения, шпур берется по всем состояниям (за исключением трансляционных) частицы термостата; ρ_b – ее матрица плотности и $\hat{U}(\infty, -\infty)$ – супероператор рассеяния в пространстве Лиувилля поглощающей излучение молекулы и частицы термостата. Он является решением уравнения эволюции [2, 3]

$$\frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = -i \hat{L}_c(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}, \tag{2}$$

при $t \rightarrow +\infty$ и $t_0 \rightarrow -\infty$; $\hat{L}_c(t)$ – супероператор Лиувилля взаимодействия (лиувиллиан) в представлении взаимодействия. В случае 2 K-польного излучения четности π (для электрического дипольного излучения $K = 1$ и $\pi = -1$) приведенный матричный элемент релаксационного супероператора $\hat{\Lambda}$ определяется формулой [16, 2]¹

$$\hat{\Lambda}_{i' f', j' i'}^{(\pi K)} = \sum_{(m_i, m_j)} \frac{(j_{f'} K m_{f'} Q | j_{i'} m_{i'}) (j_f K m_f Q | j_i m_i)}{[(2j_{f'} + 1)(2j_i + 1)]^{1/2}}, \tag{3}$$

$$\ll \alpha_{i' j' m_{i'}} (\alpha_{j' f' m_{f'}})^+ | \hat{\Lambda} | \alpha_{i j m_i} (\alpha_{f j m_f})^+ \gg.$$

¹Супероператоры определены в гильбертовом пространстве, порожденном обычными операторами (действующими в гильбертовом пространстве волновых векторов) со скалярным произведением $(A, B) = \text{Tr}\{A^+ B\}$. В дальнейшем они будут помечаться сверху уголком.

Индексы i, i' относятся к начальным, а f, f' – к конечным состояниям переходов; j – квантовое число полного углового момента; m – его проекции на ось, фиксированную в пространстве; α – краткое обозначение совокупности всех прочих квантовых чисел, величины типа $(\alpha\beta\gamma\delta | \epsilon\phi)$ – коэффициенты Клебша–Гордана. Круглые скобки у индексов суммирования в (3) означают, что суммирование проводится по всем как штрихованным, так и нештрихованным заключенным в них индексам.

Диагональные матричные элементы супероператора $\hat{\Lambda}$ определяют полуширины и сдвиги центров отдельных линий в спектре, а недиагональные отражают индуцированную столкновениями связь между ними (столкновительную интерференцию) и ответственны за ряд аномалий, наблюдаемых на форме спектра, особенно при ее трансформации давлением [4–7].

Согласно формуле (1) расчет ударных релаксационных параметров тесно связан с расчетом матричных элементов супероператора рассеяния $\hat{U}(\infty, -\infty)$. Последние, естественно, можно вычислять, применяя любые известные методы расчета матриц рассеяния, записанные в супероператорном формализме. Наиболее прямой путь состоит в использовании итерационного ряда теории возмущений. Именно так развивался метод расчета ударных релаксационных параметров в [8]. В частном случае изолированных спектральных линий он сводится к известному методу расчета полуширин и сдвигов центров линий Андерсона–Цао–Карната–Фроста [9–11]. Однако на этом пути возникают неприятности, связанные с расходимостью на нижнем пределе интеграла по прицельному параметру, для устранения которой приходится применять плохо обусловленные искусственные приемы [9, 10]. По этой причине более предпочтительными являются методы, приводящие к экспоненциальному представлению матричного элемента, что может рассматриваться как результат частичного суммирования итерационного ряда. Подобные методы использовались, например, в [3, 12–15]. Ниже мы будем развивать вариант, применявшийся в [15].

2. Приведенные матричные элементы ударного релаксационного оператора

Наша ближайшая цель состоит в представлении приведенного матричного элемента оператора $\hat{\Lambda}$ в терминах приведенных матричных элементов супероператора рассеяния $\hat{U}(\infty, -\infty)$. Имея ее в виду, определим в пространстве Лиувилля поглощающей излучение молекулы вектора типа

$$|\alpha_i j_i (\alpha_f j_f)^+; \pi K Q \gg = \sum_{m_i, m_f} \left(\frac{2K+1}{2j_i+1} \right)^{1/2} (j_f K m_f Q | j_i m_i) |\alpha_i j_i m_i (\alpha_f j_f m_f)^+ \gg, \quad (4)$$

где $\pi = \pi_i \cdot \pi_f$ (индексы четности входят в совокупности квантовых чисел α_i и α_f). Формулу (3) теперь можно переписать в виде

$$\hat{\Lambda}_{if; if}^{(\pi Q)} = \frac{1}{2K+1} \sum \ll \alpha_f j_f (\alpha_i j_i)^+; \pi K Q | \hat{\Lambda} | \alpha_i j_i (\alpha_f j_f)^+; \pi K Q \gg. \quad (5)$$

Отметим, что векторы (4) формально соответствуют схеме связи моментов $\mathbf{j}_f - \mathbf{j}_i = \mathbf{K}$ и преобразуются по неприводимому представлению (πK) вращательно-инверсионной группы.

Далее, перепишем шпур из (1) в виде [16]

$$\text{Tr}^b \{ [1 - \hat{U}(\infty, -\infty)] \rho^b \} = \ll 1^b | \hat{1} - \hat{U}(\infty, -\infty) | \rho^b \gg, \quad (6)$$

где введены векторы

$$|1^b \gg = \sum_{\beta l} (2l+1)^{1/2} | \beta l (\beta l)^+; 00 \gg, \quad (7)$$

$$|\rho^b \gg = \sum_{\beta l} (2l+1)^{-1/2} \rho_{\beta l}^b | \beta l (\beta l)^+; 00 \gg, \quad (8)$$

¹Для векторов пространства линий мы используем обозначение $|if^+ \gg = |i \gg \langle f|$, впервые введенное в [1].

и заселенности $\rho_{\beta l}^b$ определены формулой

$$\rho_{\beta l}^b = \frac{S_{\beta l} (2l+1) \exp \{-E_{\beta l} / (k_b T)\}}{\sum_{\beta l} S_{\beta l} (2l+1) \exp \{-E_{\beta l} / (k_b T)\}}, \quad (9)$$

где k_b – постоянная Больцмана; T – температура и $E_{\beta l}$ – энергия состояния βl .

Векторы $|\beta l(\beta l)^+; 00\rangle\rangle$ ортонормированы, определены формулой

$$|\beta l(\beta l)^+; 00\rangle\rangle = (2l+1)^{-1/2} \sum_{\mu} |\beta l \mu(\beta l \mu)^+; 00\rangle\rangle \quad (10)$$

и формально соответствуют схеме связи моментов $\mathbf{I}_j - \mathbf{I}_i = 0$. Последнее есть прямое следствие использования их исключительно в операции усреднения по состояниям частицы термостата.

С помощью формул (6)–(8) для приведенного матричного элемента ударного релаксационного оператора получим

$$\hat{\Lambda}_{\hat{n}\hat{m}}^{(\pi K)} = -i \eta_b \int dv P(v) \left\{ \delta_{\hat{n}\hat{m}} - \sum_{\beta l} \rho_{\beta l}^b \left(\frac{2l+1}{2l+1} \right)^{1/2} \ll \hat{n}(\hat{\gamma}) \parallel \hat{U}^{(\pi K)}(\infty, -\infty) \parallel (\hat{\beta}) \hat{m} \gg \right\}, \quad (11)$$

где в целях сокращения записи обозначено:

$$|\hat{m} \gg = |\alpha_i j_i (\alpha_j j_j)^+; \pi K Q \gg, \quad |\hat{n} \gg = |\alpha_{j'} j_{j'} (\alpha_{j'} j_{j'})^+; \pi K Q \gg,$$

$$|\hat{\beta} \gg = |\beta l(\beta l)^+; 00 \gg, \quad |\hat{\gamma} \gg = |\beta l(\beta l)^+; 00 \gg,$$

$$|(\hat{\beta}) \hat{m} \gg = |\hat{\beta} \gg | \hat{m} \gg, \quad |(\hat{\beta}) \hat{n} \gg = |\hat{\beta} \gg | \hat{n} \gg$$

и введен матричный элемент супероператора рассеяния $\hat{U}(\infty, -\infty)$:

$$\ll \hat{n}(\hat{\gamma}) \parallel \hat{U}^{(\pi K)}(\infty, -\infty) \parallel (\hat{\beta}) \hat{m} \gg = \frac{1}{2^{K+1}} \sum_Q \ll \hat{n}(\hat{\gamma}) \parallel \hat{U}(\infty, -\infty) \parallel (\hat{\beta}) \hat{m} \gg. \quad (12)$$

В заключение отметим, что векторы типа $|(\hat{\beta}) \hat{m} \gg$ является частным случаем векторов $|\alpha_i j_i (\alpha_j j_j)^+; K_s | \beta_l l_i (\beta_{j'} l_{j'})^+; K_b | K Q \gg$, соответствующих схеме связи моментов

$$\mathbf{j}_i - \mathbf{j}_j = \mathbf{K}_s, \quad \mathbf{l}_i - \mathbf{l}_j = \mathbf{K}_b, \quad \mathbf{K}_s + \mathbf{K}_b = \mathbf{K}, \quad (13)$$

и образующих полный набор.

3. Представление в экспоненциальной форме

Существует несколько возможностей для представления матричного элемента матрицы рассеяния в экспоненциальной форме. Мы будем использовать для этой цели развитый в [12] способ решения уравнения эволюции в матричной форме. Поскольку этот способ позволяет рассчитывать только диагональные матричные элементы, расчеты будем проводить в собственном базисе матрицы приведенных матричных элементов супероператора $\hat{U}(\infty, -\infty)$. Предварительно преобразуем формулу (11), выразив приведенный матричный элемент релаксационного супероператора $\hat{\Lambda}$ через диагональные матричные элементы супероператора рассеяния. Пусть $|\hat{\sigma} \gg -$ собственный вектор матрицы приведенных матричных элементов супероператора $\hat{U}(\infty, -\infty)$:

$$\hat{U}^{(\pi K)}(\infty, -\infty) | \hat{\sigma}_u \gg = \hat{u} | \hat{\sigma}_u \gg, \quad (14)$$

$$| \hat{\sigma}_u \gg = D | \hat{k}(\hat{\alpha}) \gg, \quad (15)$$

тогда вместо (11) можем записать:

$$\hat{\Lambda}_{\hat{n}\hat{m}}^{(\pi K)} = -i \eta_b \int dv P(v) \left\{ \delta_{\hat{n}\hat{m}} - \sum_{\beta l} \rho_{\beta l}^b \left(\frac{2l+1}{2l+1} \right)^{1/2} \sum_{\hat{k}\hat{\alpha}} \ll \hat{n}(\hat{\gamma}) \| D \| \hat{k}(\hat{\alpha}) \gg \ll \hat{k}(\hat{\alpha}) \| D^{-1} \| (\hat{\beta}) \hat{m} \gg \times \right. \\ \left. \times \ll \hat{\sigma}_u \| \hat{U}^{(\pi K)}(\infty, -\infty) \| \hat{\sigma}_u \gg \right\}. \quad (16)$$

Свойства инвариантности релаксационного супероператора относительно преобразований вращательно-инверсионной группы изучались в [16], где, в частности, было показано, что в базисе, соответствующем схеме связи моментов (13), его матричные элементы диагональны по K и Q и не зависят от Q . Последнее обстоятельство позволяет вместо приведенного матричного элемента рассчитывать обычный при некотором фиксированном значении Q . Представляя для удобства лиувиллиан взаимодействия $\hat{L}_c(t)$ в виде суммы и зотропной и анизотропной частей

$$\hat{L}_c(t) = \hat{V}(t) + \hat{R}(t) \quad (17)$$

и используя в несколько измененном виде развитую в (12) технику решения уравнения эволюции, для приведенного матричного элемента супероператора рассеяния получаем

$$\ll \hat{\sigma}_u \| \hat{U}^{(\pi K)}(\infty, -\infty) \| \hat{\sigma}_u \gg = \exp - \ll \hat{\sigma}_u \| \hat{A}^{(\pi K)} \| \hat{\sigma}_u \gg \}, \quad (18)$$

где $\hat{A}^{(\pi K)}$ – диагональная в базисе векторов $|\hat{\sigma}_u \gg$ матрица приведенных матричных элементов супероператора \hat{A} , определяемого рядом

$$\hat{A} = i \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{V}(t) dt + \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \hat{L}'(t_1) \hat{L}'(t_2) \quad (19)$$

+ члены высших порядков. Штрих здесь указывает на отсутствие у лиувиллиана взаимодействия в базисе (15) диагональных матричных элементов.

Подставляя (18) в (16), для приведенного матричного элемента ударного релаксационного супероператора в итоге получаем искомое представление

$$\hat{\Lambda}_{\hat{n}\hat{m}}^{(\pi K)} = -i \eta_b \int dv P(v) \left\{ \delta_{\hat{n}\hat{m}} - \sum_{(\beta l)} \rho_{\beta l}^b \left(\frac{2l+1}{2l+1} \right)^{1/2} \sum_{\hat{k}\hat{\alpha}} \ll \hat{n}(\hat{\gamma}) \| D \| \hat{k}(\hat{\alpha}) \gg \ll \hat{k}(\hat{\alpha}) \| D^{-1} \| (\hat{\beta}) \hat{m} \gg \times \right. \\ \left. \times \exp \left\{ - \ll \hat{\sigma}_u \| \hat{A}^{(\pi K)} \| \hat{\sigma}_u \gg \right\} \right\}. \quad (20)$$

Этот результат впервые был получен в [15]. Можно показать, что при учете первых двух членов в ряде (19), после разложения экспоненты с точностью до членов второго порядка по взаимодействию, результаты итерационного метода воспроизводятся точно. Формула (20), однако, включает в себя и принципиальные отличия, о которых будет сказано ниже.

Расчет совокупности релаксационных параметров по формуле (20) формально состоит в следующем: на каждом шаге усреднения по классическим параметрам столкновения и по квантовым состояниям частицы термостата в исходном базисе рассчитываются приведенные матричные элементы супероператора \hat{A} и формируется матрица $\hat{A}^{(\pi K)}$. Затем эта матрица приводится к диагональной форме, в результате чего определяются ее собственные значения и матрица D собственных векторов. После этого значение приведенного матричного элемента релаксационного оператора вычисляется по формуле (20).

Описанная схема, очевидно, довольно трудоемка, так как на каждом шаге необходимо диагонализировать матрицу, размерность которой равна произведению размерности пространства линий на число состояний уширяющей молекулы, включенных в процедуру усреднения.

Поэтому в непосредственном виде она может применяться лишь в случаях, допускающих существенные упрощения, например, при уширении бесструктурными частицами [17], или в случаях самоуширения и уширения посторонними газами линий инверсионного спектра аммиака [18–20]. Модификация, позволяющая значительно расширить ее возможности, будет дана в следующем пункте. Здесь же отметим, что недиагональность матрицы $\hat{A}^{(\pi K)}$ в исходном базисе не только приводит к появлению новых релаксационных параметров, но и, как показано в [18–20], оказывает определенное влияние, иногда весьма существенное, на полуширины спектральных линий.

4. Модификация формулы (20)

Если уширяющая молекула обладает квантовой структурой, то, как отмечалось выше, размерность матрицы, подлежащей диагонализации, становится очень большой. Однако во многих практически интересных случаях ее можно вновь уменьшить до размерности пространства линий при относительно небольшой потере точности. С этой целью обратимся к матрице $\hat{A}^{(\pi K)}$ и, ограничиваясь вторым порядком по лиувиллиану взаимодействия, представим ее в виде суммы двух матриц

$$\{\hat{\Lambda}_{\hat{n}\hat{m}}^{(\pi K)}\} = \{[i S_1(\hat{n}, \hat{m} | \nu) + S_2(\hat{n}, \hat{m} | \nu)_{\text{outer}} + \Theta_2(\hat{n}, \hat{m} | \nu)_{\text{middle}}] \delta_{\beta\beta'}\} + \{\Theta_2(\hat{n}, \hat{m} | \nu)_{\text{middle}} (1 - \delta_{\beta\beta'})\}, \quad (21)$$

где первая диагональна, а вторая недиагональна в базисе собственных состояний уширяющей молекулы. Явные выражения для $S_1(\hat{n}, \hat{m} | \nu)$, $S_2(\hat{n}, \hat{m} | \nu)_{\text{outer}}$, $\Theta_2(\hat{n}, \hat{m} | \nu)_{\text{middle}}$ с точностью до обозначений имеются в [2]. Рассматривая далее вторую матрицу как возмущение, представим матрицу приведенных матричных элементов супероператора рассеяния в виде

$$\hat{U}^{(\pi K)}(\infty, -\infty) \approx \exp[-\hat{A}_1^{(\pi K)}] \left\{ 1 - \int_0^1 ds \exp[\hat{A}_1^{(\pi K)} s] \hat{A}_2^{(\pi K)} \exp[-\hat{A}_1^{(\pi K)} s] \right\}. \quad (22)$$

Эта формула может быть упрощена еще больше, если предположить, что матрицы $\hat{A}_1^{(\pi K)}$ и $\hat{A}_2^{(\pi K)}$ (смысл этих матриц очевиден из (21)) приближенно коммутативны, в этом случае

$$\hat{U}^{(\pi K)}(\infty, -\infty) \approx \exp[-\hat{A}_1^{(\pi K)}] (1 - \hat{A}_2^{(\pi K)}). \quad (23)$$

Подставляя (23) в формулу (11), для произвольного приведенного матричного элемента ударного релаксационного оператора получим

$$\hat{\Lambda}_{\hat{n}\hat{m}}^{(\pi K)} = -i n_b \int d\nu P(\nu) \left\{ \delta_{\hat{n}\hat{m}} - \sum_{\beta l} \rho_{\beta l} \sum_{\hat{k} \hat{\gamma}} \left(\frac{2l+1}{2l+1} \right)^{1/2} \ll \hat{n}(\hat{\gamma}) \| 1 - \hat{A}_2^{(\pi K)} \| \hat{k}(\hat{\beta}) \gg \sum_{\hat{r}} \ll \hat{k}(\hat{\beta}) \| D \| \hat{r}(\hat{\beta}) \gg \times \right. \\ \left. \times \ll \hat{r}(\hat{\beta}) \| D^{-1} \| (\hat{\beta}) \hat{m} \gg \exp \left\{ - \ll \hat{r}(\hat{\beta}) \| D \hat{A}_1^{(\pi K)} D \| \hat{r}(\hat{\beta}) \gg \right\} \right\}, \quad (24)$$

где D – матрица собственных векторов матрицы $\hat{A}_1^{(\pi K)}$, имеющая размерность пространства линий.

Возможность рассматривать вторую матрицу в (21) как малое возмущение следует из структуры величин $\Theta_2(\hat{n}, \hat{m} | \nu)_{\text{middle}}$ (см. формулу (36) в [2]). При $\hat{n} = \hat{m}$ эти величины совпадают с $S_2(b)_{\text{middle}}$ из [10, 11]. Для них характерно то, что в отличие от $S_2(\hat{n}, \hat{m} | \nu)_{\text{outer}}$ они не содержат внутренних суммирований по состояниям поглощающей излучение молекулы. Поэтому условия, близкие к резонансным, реализуются редко, что и обуславливает относительную малость этих величин.

Рассмотрим частный случай изолированных спектральных линий, когда матрица $\hat{A}^{(\pi K)}$ заведомо диагональна и, соответственно, матрица D – единичная. Формула (24) при этом существенно упрощается:

$$\hat{\Lambda}_{\hat{m}\hat{m}}^{(\pi K)} = -i \eta_b \int dv P(v) \left\{ 1 - \sum_{\beta_l} \rho_{\beta_l}^b \exp \left\{ - \ll \hat{m}(\hat{\beta}) \parallel \hat{A}_1^{(\pi K)} \parallel \hat{m}(\hat{\beta}) \gg \right\} \sum_{\hat{\gamma}} \left(\frac{2l'+1}{2l+1} \right)^{1/2} [\delta_{\hat{\beta}\hat{\gamma}} - \ll \hat{m}(\hat{\gamma}) \parallel 1 - \hat{A}_2^{(\pi K)} \parallel \hat{m}(\hat{\beta}) \gg] \right\} \quad (25)$$

и с точностью до обозначений ведет непосредственно к формулам (12) и (13) Роберта и Бонами [14] (соответственно для полуширины и сдвига центра спектральной линии).

5. Самоуширение линий вращательного спектра аммиака

В качестве примера, иллюстрирующего работоспособность формулы (24), рассмотрим, опираясь на модель, описанную в [21] и показанную на рис. 1, самоуширение линий вращательного спектра аммиака. В основе данной модели лежит тот факт, что вследствие большого значения вращательной постоянной B у молекулы аммиака существенное значение имеет лишь спектральный обмен между компонентами вращательных дублетов, поэтому пространство линий разлагается на прямую сумму двумерных подпространств, соответствующих вращательным дублетам (при $K \neq 0$), и одномерных, отвечающих синглетным линиям (при $K = 0$). Основные детали расчета те же самые, что и в [21], поэтому мы на них останавливаться не будем. Расчеты проводились только для (J, J) дублетных линий при $T = 300^\circ\text{K}$. Фазовые эффекты, ввиду их малости [21], не учитывались.

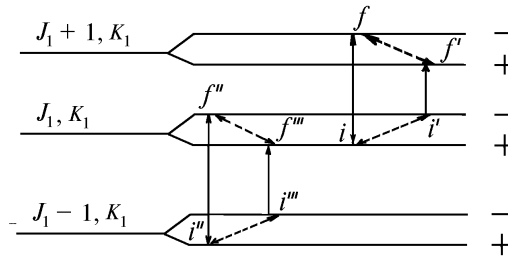


Рис. 1. Модель столкновительной интерференции линий во вращательном спектре аммиака [21]. Сплошные стрелки – радиационные переходы, штриховые – безызлучательные переходы, индуцированные столкновениями

Результаты расчетов представлены на рис. 2, где также приведены данные эксперимента из [22] по полуширинам линий и теоретические данные как по полуширинам линий, так и по параметрам кроссрелаксации, рассчитанные в [21] на основе формулы (20) в предположении, что компоненты дублетов уширяются совершенно одинаково, что позволило выполнить диагонализацию двумерных подматриц вида $\hat{A}^{(\pi K)}(J, K)$ аналитически. Наш расчет также не выявил заметных различий в уширении компонент дублета, что подтверждает обоснованность приведенных в [21] аргументов.

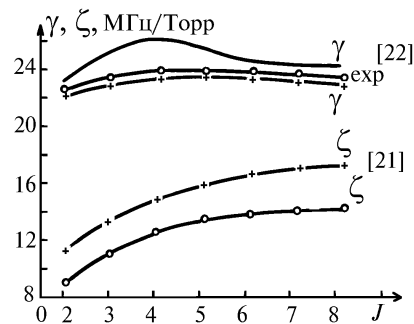


Рис. 2. Полуширины и параметры кроссрелаксации вращательных (J, J) дублетов молекулы аммиака. Сплошная линия – эксперимент из [22], $\circ-\circ$ – теоретические данные из [21], $+-$ – наши расчеты

Формальное различие между обоими расчетами (если не обращать внимание на фазовые эффекты), таким образом, сводится к присутствию в формуле (24) множителя $\Sigma_{\gamma}[(2l+1)(2l+1)]^{1/2} \ll \hat{n}(\hat{\gamma}) \parallel 1 - \hat{A}_2^{(\pi\kappa)} \parallel \hat{k}(\hat{\beta}) \gg$ вместо единицы в соответствующей формуле в [21]. Следствием этого явилось увеличение в настоящем расчете примерно на 20% значений параметров кроссрелаксации. Влияние на полуширины линий гораздо слабее и сводится к их незначительному уменьшению. Эти факты не являются неожиданными и непосредственно просматриваются в анализе формулы (24).

1. Baranger M. // Phys. Rev. 1958. V. 111. N 1. P. 494–504.
2. Черкасов М. Р. // Оптика и спектроскопия. 1977. Т. 42. Вып. 1. С. 45–51.
3. Lam Kai S. // JQSRT. 1977. V. 17. P. 351–358.
4. Ben-Reuven A. // Phys. Rev. Lett. 1965. V. 14. P. 349–353.
5. Алексеев В. А., Собельман И. И. // Жур. эксп. теор. физики. 1968. Т. 55. С. 1874–1880.
6. Бурштейн А. И., Наберухин Ю. И. // Жур. эксп. теор. физики. 1967. Т. 55. С. 1202–1211.
7. Алексеев В. А., Собельман И. И. // Acta Phys. Polon. 1968. V. 34. P. 579–586.
8. Черкасов М. Р. // Оптика и спектроскопия. 1976. Т. 40. Вып. 1. С. 7–13.
9. Anderson P. W. // Phys. Rev. 1949. V. 76. P. 647–661.
10. Tsao C. J., Curnutte B. // JQSRT. 1962. V. 2. P. 41–91.
11. Frost B. S. // J. Phys. B: Atom. Molek. Phys. 1976. V. 9. P. 1001–1024.
12. Murphy J. S., Voggs J. E. // J. Chem. Phys. 1967. V. 47. P. 691.
13. Salesky E. T., Korff D. // Phys. Lett. 1979. V. 72A. P. 431–436.
14. Robert D., Bonamy J. // Jor. de Physique. 1979. V. 40. P. 923–943.
15. Черкасов М. Р. К теории ударного уширения спектральных линий. I. Метод расчета релаксационных параметров. Депонировано в ВИНТИ. Per N 4281–77.
16. Ben-Reuven A. // Phys. Rev. 1966. V. 141. P. 34–41.
17. Cherkasov M. R. // Proceeding of Tenth All-Union Symposium and school on High-Resolution Molecular Spectroscopy. 2–9 June 1991, Omsk, Russia. Published by SPIE. P. 276–281.
18. Петрова А. И., Черкасов М. Р. // Оптика и спектроскопия. 1980. Т. 48. С. 43–70.
19. Петрова А. И., Черкасов М. Р. // Оптика и спектроскопия. 1980. Т. 48. С. 256–262.
20. Петрова А. И., Черкасов М. Р. // Оптика и спектроскопия. 1980. Т. 48. С. 871–877.
21. Петрова А. И., Черкасов М. Р. // Оптика и спектроскопия. 1980. Т. 53. С. 429–434.
22. Gierszal S., Galica J., Stankovski J. and Prussak W. // Univ. Adam Mickevicza. Ser. fis. 1975. V. 19. P. 393.

Томский политехнический университет
Институт оптики атмосферы СО РАН, Томск

Поступила в редакцию
23 декабря 1993 г.

M. R. Cherkasov. On the Impact Approximation Theory of Spectrum Shape Relaxation Parameters.

This paper presents a modification of the method earlier proposed by the author for calculating the set of relaxation parameters describing, in the impact approximation, the shape of a spectrum. The proposed in this paper modification makes the method easier for computations and widens its applicability limits. To illustrate the calculational efficiency of the modification are presented the data of calculations of self-broadening parameters for rotational doublets of ammonia.