

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 535.8

Сравнение контуров спектральных линий в моделях сильных и слабых столкновений

В.П. Кочанов*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 7.11.2018 г.

Рассмотрено качественное и количественное влияние на контур линии сильных и слабых по скоростям столкновений с рассеянием поглощающих молекул на большие и малые углы соответственно. Показано, что в диффузионной модели контура, известной как модель «слабых» столкновений, рассеяние на большие углы вносит существенный вклад, сопоставимый с таковым в модели сильных столкновений. Различие этих традиционных моделей заключается лишь в математических формах представления интеграла столкновений, интегральной и дифференциальной, и следующих из них аналитических выражений для контуров. Получены и апробированы простые приближенные формулы для контура, в котором одновременно учтены сильные и слабые столкновения.

Ключевые слова: контур линии, сильные столкновения, слабые столкновения, диффузия; line profile, hard collisions, soft collisions, diffusion.

Введение

Спустя полвека практики применения контура Фойгта [1] в качестве основной модели для обработки спектров появились усовершенствованные контуры [2–6], в которых дополнительно к ударному и доплеровскому типам уширения было учтено также изменение направления вектора скорости активной молекулы при ее столкновениях с частицами буферного газа. Учет упругих столкновений с изменением скорости позволил объяснить сужение линий с ростом давления [7, 8] и достичь ощутимо лучшего соответствия теории и эксперимента. Так, если при подгонке контура Фойгта к эксперименту невязка обычно составляет несколько процентов, то применение контуров [2–6] в большинстве случаев практически ее исключает.

Следует отметить, что основные предпосылки и способы вывода контуров [2, 3, 5, 6] и [4–6] существенно различаются. Это дало основание авторам обзора [5] отнести контуры [4–6] и [2, 3] соответственно к моделям сильных и «слабых» по скоростям столкновений. Эти термины получили широкое распространение (см., например, [9–14]) и используются до сих пор. Тот факт, что слово «слабые» приведено в [5] в кавычках, не случаен, и это требует особых разъяснений, поскольку задача настоящей работы заключается в уточнении смысла и сравнении количественных характеристик данных моделей. Приводимая в [5] интерпретация слабых столкновений как столкновений с рассеянием на малые углы вполне естественна и не требует кавычек. Применение

последних может быть объяснено неявным и неочевидным предположением о том, что используемое для вывода контура [2, 3, 5, 6] диффузионное приближение для интеграла столкновений справедливо только в случае преобладающего рассеяния на малые углы, т.е. для актуально слабых столкновений. В частности, такое рассеяние имеет место, когда поглощающая молекула заметно тяжелее возмущающей частицы и/или в случае дальнедействующих потенциалов межмолекулярного взаимодействия. Однако диффузия как процесс осуществляется независимо от соотношения масс диффундирующих частиц и происходит вследствие рассеяния молекул как на малые, так и на большие углы. При этом коэффициент пространственной диффузии [15] (а по полной аналогии с уравнениями (2.14) в [5] – и диффузии в пространстве скоростей) определяется интегралом по полярным углам рассеяния ϑ (транспортным сечением рассеяния), в котором рассеяние на малые углы дискриминируется фактором $1 - \cos \vartheta \approx \vartheta^2/2$ [15–17]. Следовательно, коэффициент диффузии, равно как и диффузионное уравнение Фоккера–Планка [5, 16, 17], определяющее модель «слабых» столкновений, выражает действие столкновений с рассеянием преимущественно на большие, а не малые углы. В работах [18–20] показано, что в большинстве случаев к малым относятся углы меньше 0,3 рад. При этом $\vartheta^2/2 \approx 0,05 \ll 1$.

Таким образом, вопреки устоявшейся парадигме, модель «слабых» столкновений по сути представляет собой иной (диффузионный) вариант модели сильных столкновений [19–21]. Поэтому при обработке спектров обе эти модели приводят к близким результатам (см., например, [22, 23]). Представленные

* Виктор Павлович Кочанов (koch@iao.ru).

выше предварительные соображения о неточности сложившейся терминологии будут подкреплены далее качественным и количественным анализом на основе исходных уравнений и следующих из них выражений для контуров спектральных линий.

Дополнительные аргументы в пользу того, что термин «слабые столкновения» применительно к контурам [2, 3, 5] имеет неоправданно расширительный смысл, предоставляет конкретная дифференциальная форма интеграла столкновений, использованная в этих работах. Подробный вывод и обсуждение диффузионного представления интеграла столкновений представлены в методической работе [17]. В ней показано, что к общепринятому дифференциальному виду интеграл столкновений можно свести в том случае, когда ширина его ядра значительно меньше среднетепловой скорости и ядро зависит от разности скоростей Δv поглощающей молекулы до и после столкновения. Это выполняется, когда слабые столкновения доминируют, а вкладом сильных столкновений с рассеянием преимущественно на большие углы можно пренебречь. Разлагая искомую функцию распределения молекул по скоростям (матрицу плотности среды) по малой величине Δv и ограничившись вторым порядком малости, можно получить уравнение диффузионного типа с первой и второй производными функции распределения по скорости. Коэффициенты перед производными по скорости при этом определяются исходя из равенства нулю суммы членов ухода и прихода в равновесных условиях (см. формулы (9) и (10) в [17], а также выражения (1) и (11) в разд. 1). В [17] процедура приравнивания членов ухода и прихода подвергается критике (после применения этой процедуры исчезает малый параметр $\propto \Delta v$, оправдывающий ограничение разложения ядра членом с второй производной по скорости). Именно за счет этой процедуры коэффициент перед второй производной функции распределения по скорости становится большим, равным половине квадрата наиболее вероятной скорости, $\bar{v}^2/2$. Данное обстоятельство означает, как это показано с применением формул в разд. 1, что эффективная величина среднего изменения скорости при столкновениях есть величина порядка среднетепловой скорости, а не много меньше нее.

Таким образом, исходное предположение в [5] и [17] о малости $\Delta v \ll \bar{v}$ не находит явного выражения в полученном дифференциальном представлении интеграла столкновений [2, 3, 5, 6], а является лишь формальным оправданием ограничения его разложения в ряд Тэйлора с точностью до второй производной по скорости. Поэтому в пионерских работах [2, 3] уравнение Фоккера–Планка вводится с целью описания диффузии поглощающей молекулы в пространстве скоростей без ограничения применимости диффузионного приближения только случаем малоуглового рассеяния. В [17] термин «модель слабых столкновений» также не употребляется и взамен предложен термин «диффузионная модель».

В 1970–1980-е гг. были получены квантово-механические выражения для ядра интеграла столкновений через амплитуды рассеяния, дающие правильное представление о структуре ядра [24–31]. В частности, было установлено [29, 17], что ядро состоит из трех элементов, обусловленных рассеянием на большие (~ 1 рад) углы (сильные столкновения), малые ($\sim 0,1$ рад) при классическом рассеянии и малые ($\sim 0,01$ рад) при дифракционном. Две последние разновидности рассеяния реализуются при слабых столкновениях. Проведенные в [18, 19] численные расчеты дифференциальных сечений рассеяния для обратно-степенных потенциалов межмолекулярного взаимодействия $\propto r^{-n}$, где r – расстояние между центрами соударяющихся молекул и $n = 3–6$, позволили определить соотношения частот сильных и слабых столкновений при различных отношениях масс возмущающей и поглощающей молекул. Это создает возможности построения более простых, но физически обоснованных моделей ядра с учетом его составной структуры и теоретической оценки ширин и площадей его трех компонентов [20].

Как уже упоминалось выше, сделанное в [5] предположение о том, что диффузионное приближение для интеграла столкновений [2, 3] является следствием преимущественного рассеяния молекул на малые углы, выполняется для тяжелых поглощающих частиц и дальнедействующих потенциалов взаимодействия. Но нет доказательств того, что малоугловое рассеяние – единственно возможная причина применимости диффузионного приближения. В связи с этим возникает дилемма о физическом обосновании диффузионного уравнения: постулат о диффузии в пространстве скоростей, включающей любые углы рассеяния [2, 3], или предполагаемое разложение интеграла столкновений, соответствующее рассеянию молекул только на малые углы [5, 6]. Эта дилемма разрешается путем проведения такого разложения для моделей ядра интеграла столкновений [20, 32], основанных на квантово-механическом выражении для ядра [18, 19, 29]. В наиболее простом и наглядном виде указанное разложение проводится в разд. 1. Сопоставление полученного дифференциального уравнения второго порядка с исходным диффузионным уравнением, полученным в [2, 3], позволяет сделать однозначный вывод о том, что модель «слабых» столкновений [2, 3, 5] не является следствием преимущественного рассеяния на малые углы, а определяется рассеянием в основном на большие углы.

По сути, изложение в данной статье следует логике анализа проблемы в работе [17], где указано: «Естественно применить диффузионное приближение только к той части интеграла столкновений, которая обусловлена малоугловым рассеянием (или только дифракционным), сохраняя интегральную форму для изотропной части», и приведены соответствующие выражения для интеграла столкновений (41)–(43) [17]. Однако конкретные формулы для контура линии, следующего из данного правильного пред-

ставления интеграла столкновений, включающего как сильные, так и слабые столкновения, в [17] отсутствуют. В задачу этой статьи входит соответствующая конкретизация соотношения вкладов сильных и слабых столкновений в контур линий на основе простых моделей [20, 32] квантово-механического ядра интеграла столкновений [28, 29], корректно объединяющих эти два типа столкновений, а также сравнение полученных на их основе контуров с общепринятыми моделями [2–6].

1. Контур линии

Исходное уравнение для вывода контура линии в модели «слабых» столкновений [2, 3, 5, 6] содержит интеграл столкновений в форме Чандрасекара [33]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}f = \nu_d \left[\operatorname{div}_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}f) + \frac{1}{2}\bar{v}^2 \Delta_{\mathbf{v}}f \right], \quad \bar{v}^2 = \frac{2k_B T}{m}, \quad (1)$$

где правая часть представляет собой интеграл столкновений; f – функция распределения молекул по скоростям и координатам; \mathbf{v} – скорость активных молекул; ν_d – эффективная частота столкновений, определяющая время «потери памяти» молекулы о своей первоначальной скорости; \bar{v} – наиболее вероятная скорость; k_B – постоянная Больцмана; m – масса поглощающей молекулы (атома) и T – температура газа.

Решение уравнения (1), полученное в формализме Фурье-корреляционной теории [5] (с добавлением в левую часть (1) члена γf , задающего столкновительную и радиационную релаксацию, дополнительную к релаксации, связанной с изменением скорости), приводит к контуру линии [5, 6, 22]:

$$\begin{aligned} K_d(\Omega) &= \frac{S}{\pi} \times \\ &\times \operatorname{Re} \int_0^{\infty} \exp \left\{ -(\gamma - i\Omega)t - \frac{(k\bar{v})^2}{2\nu_d^2} [\nu_d t - 1 + e^{-\nu_d t}] \right\} dt = \\ &= \frac{S}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{\gamma + (k\bar{v})^2/(2\nu_d) - i\Omega} \times \right. \\ &\left. \times \Phi \left[1, 1 + \frac{\gamma + (k\bar{v})^2/(2\nu_d) - i\Omega}{\nu_d}, \frac{(k\bar{v})^2}{2\nu_d^2} \right] \right\} \quad (2) \end{aligned}$$

(Ω – отстройка частоты от центра линии; S – интенсивность линии; k – волновое число; Φ – вырожденная гипергеометрическая функция [34]). Из выражений (2) непосредственно следует, что при больших давлениях газа, когда $\gamma, \nu_d \gg k\bar{v}$, величина γ является полушириной линии на полувысоте. Далее контур (2) будет сопоставляться с контуром в модели сильных столкновений [4, 5]:

$$\begin{aligned} K_{hc}(\Omega) &= \frac{S}{\sqrt{\pi k\bar{v}}} \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1/\left[\frac{\Omega + i(1+\alpha)\gamma}{k\bar{v}} \right] - \sqrt{\pi}\alpha\gamma/(k\bar{v})}} \right\}, \\ \alpha &\equiv \nu_h/\gamma, \quad \gamma = \nu - \nu_h, \quad \nu = (1+\alpha)\gamma, \quad (3) \end{aligned}$$

$$\omega(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz) = e^{-z^2} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{-iz} e^{-t^2} dt \right),$$

где ν – частота ухода интеграла столкновений [29]; ν_h – частота упругих сильных столкновений с изменением скорости на величину $\sim \bar{v}$; α – безразмерный параметр сужения, задающий степень проявления сужения Дике [7, 8]; $\omega(z)$ – интеграл вероятностей от комплексного аргумента [34] (простые и достаточно точные алгебраические аппроксимации $\omega(z)$ приведены в [19–21, 35]). Используя представление $\omega(z) \approx i/(\sqrt{\pi}z)$, $|z| \gg 1$ [34], нетрудно убедиться, что γ в выражении (3) имеет тот же смысл однородной полуширины линии, что и для контура (2).

Совместный учет сильных и слабых столкновений на основе представления интеграла столкновений в виде суммы соответствующих слагаемых (выражение (3) в [32]) дает следующий контур линии [21, 32]:

$$\begin{aligned} K_{sh}(\Omega) &= \frac{S}{\sqrt{\pi k\bar{v}}} \operatorname{Re} \left\{ \omega_s / \left[1 - \sqrt{\pi} \nu_h \omega_s / (k\bar{v}) \right] \right\}, \\ \omega_s &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp \left[-t^2 - 2 \frac{\nu - i\Omega}{k\bar{v}} t + \frac{\nu_s}{\theta k\bar{v}} \operatorname{arctg}(2\theta t) \right] dt, \\ \theta &\equiv \frac{\Delta}{\bar{v}}, \quad (4) \end{aligned}$$

где ν_s – частота слабых столкновений с изменением вектора скорости в среднем на малые углы $\sim \theta$; Δ – полуширина на высоте $1/e$ ядра $\propto \exp(-|v - v_1|/\Delta)$ [29] части интеграла столкновений, соответствующей дифракционному рассеянию и классическому рассеянию молекул на малые углы (здесь v_1 и v – скорости до и после столкновения соответственно).

Для малых углов рассеяния $\theta \sim 10^{-2}$ (расчеты θ для различных степенных потенциалов межмолекулярного взаимодействия проведены в [20]) разложение $\operatorname{arctg} x \approx x - x^3/3$ в (4) дает «кубическое» приближение

$$\omega_s = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp \left[-t^2 - 2 \frac{\nu - \nu_s - i\Omega}{k\bar{v}} t - \frac{8\theta^2 \nu_s}{3 k\bar{v}} t^3 \right] dt. \quad (5)$$

Обозначим контур (4) с подстановкой туда ω_s (5) как $K_{shc}(\Omega)$.

Разлагая экспоненту в (5) в ряд по малому члену в ее показателе $\propto \theta$ и ограничившись первым ненулевым порядком малости, в результате интегрирования получаем выражение ω_s через $\omega(z)$:

$$\omega_s \approx \left[1 + 4iz \left(\frac{2z^2}{3} - 1 \right) \theta^2 \frac{\nu_s}{k\bar{v}} \right] \omega(z) + \frac{8\theta^2 \nu_s}{3\sqrt{\pi} k\bar{v}} (z^2 - 1), \quad (6)$$

$$z = \frac{\Omega + i(\nu - \nu_s)}{k\bar{v}}.$$

Контур (4), (6) будем обозначать далее как $K_{shca}(\Omega)$.

Получим теперь из модельного интегрального представления интеграла столкновений [32] дифференциальное представление типа (1). Выпишем сначала уравнение для нормированной постоянной части светоиндуцированной поляризации R активного перехода в приближении одномерной скорости [36], не рассматривая непринципиальную в данном случае зависимость констант релаксации от скорости поглощающей молекулы [37] (при отсутствии такой зависимости подходы с одно- и трехмерной скоростями дают одинаковые результаты). Соответствующее уравнение, взятое, например, из [38], есть

$$\begin{aligned} & [v - i(\Omega - k\bar{v}\tau)]R(\tau) - v_h \frac{e^{-\tau^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau_1) d\tau_1 - \\ & - v_s \int_{-\infty}^{\infty} A(\tau_1) R(\tau + \tau_1) d\tau_1 = \frac{S}{\pi^{3/2}}, \quad \tau \equiv \frac{v}{v}, \end{aligned} \quad (7)$$

где v — проекция скорости на волновой вектор, а первый и второй интегралы задают описание сильных и слабых по скоростям столкновений соответственно. Отметим, что представление (7) полностью соответствует предложенному в [17] разделению интеграла столкновений на составляющие, обусловленные рассеянием на большие и малые углы.

Воспользовавшись явным видом нормированного разностного ядра A [29, 32]:

$$A(\tau_1) = \frac{1}{2\theta} \exp[-|\tau_1|/\theta], \quad (8)$$

представим R в виде

$$R(\tau + \tau_1) \approx R(\tau) + \tau_1 \frac{d}{d\tau} R(\tau) + \frac{1}{2} \tau_1^2 \frac{d^2}{d\tau^2} R(\tau). \quad (9)$$

Подставляя (8) и (9) в (7) и выполняя интегрирование, получаем искомое уравнение, в котором описание слабых столкновений представлено в дифференциальной форме:

$$\begin{aligned} & -\theta^2 v_s \frac{d^2}{d\tau^2} R(\tau) + [v - v_s - i(\Omega - k\bar{v}\tau)]R(\tau) - \\ & - v_h \frac{e^{-\tau^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau_1) d\tau_1 = \frac{S}{\pi^{3/2}}. \end{aligned} \quad (10)$$

С целью более наглядного сопоставления (10) и (1) перейдем к одномерным скоростям в (1), производя интегрирование по поперечным направлениям скорости:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (v - v_d + ik\bar{v})f = v_d \left(\frac{\bar{v}^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial v^2} + v \frac{\partial f}{\partial v} \right). \quad (11)$$

Из сравнения членов в (10) и (11) со второй производной по скорости и того факта, что данные уравнения описывают одну и ту же ситуацию, следует однозначное соответствие

$$v_d \leftrightarrow v_s, \quad \frac{\bar{v}}{\sqrt{2}} \leftrightarrow \Delta. \quad (12)$$

Второе соотношение (12) означает, что при гипотетическом (в принципе возможном) восстановлении из (11) интеграла столкновений в интегральной форме по схеме, обратной разложению (9), полуширина ядра, аппроксимируемого выражением (9), будет не малой, как это предполагает термин «слабые» столкновения, а сравнимой со средней скоростью. Это доказывает сделанное во введении утверждение о том, что диффузионная модель [2, 3, 5] в основном определяется сильными столкновениями с рассеянием на большие углы порядка радиана. Количественная оценка соотношения вкладов в контур линии сильных и слабых столкновений при этом затруднительна и требует отдельного рассмотрения.

Член в правой части (11) с первой производной по скорости обеспечивает восстановление равновесного максвелловского распределения молекул по скоростям в результате столкновений. Отсутствие аналогичного члена в (10) объясняется симметрией ядра (8). Учет асимметрии ядра, произведенный в [19] на основе аппроксимации численных расчетов квантово-механического ядра [18, 19], приводит к дополнительному члену $v_s \xi \tau dR(\tau)/d\tau$ в левой части (10), где ξ — параметр асимметрии, расчетные значения которого $\sim 0,04-0,1$ [20] для различных потенциалов межмолекулярного взаимодействия и отношений масс поглощающей и возмущающей молекул. Полное совпадение (10) и (11) с добавлением к первому из этих уравнений приведенного выше члена с первой производной по скорости с учетом (12) получается при замене $\xi \leftrightarrow -1$. Реалистичная аппроксимация ядра [20] основана на выделении малоуглового рассеяния (слабых столкновений) в явном виде (см. рис. 1 и формулы (2), (3) в [19]). Это позволяет установить, что рассеяние на малые углы приводит к малым $\xi \ll 1$. Проведенное выше и в [20] разложение интеграла столкновений с рассеянием на малые углы $\theta \ll 1$, основанное на представлении (9), дает перенормировку частоты ухода $v \rightarrow v - v_s$, связанную с первым членом в правой части (9) $\propto R$. Второй и третий «диффузионные» члены там же (и в [20]) с производными R по скорости имеют порядок величины $\theta^2 \ll 1$ и $\xi \ll 1$ соответственно. Правая же часть уравнения (11), сопоставляемого с (10), не является малой по сравнению с v_d . Данное расхождение говорит о том, что модель «слабых» столкновений (1), (11) [2, 3] не совпадает с моделью, корректно включающей рассеяние на малые углы [18–20, 32], а является иным (диффузионным) вариантом модели сильных по скоростям столкновений [4–6].

В завершение раздела выведем из (10) контур линии, аналогичный (4)–(6), но с использованием асимметричного ядра [20]. Следуя схеме вывода [5], уравнение (10) заменим на уравнение в частных производных

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} R(\tau, t) - \theta^2 v_s \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} R(\tau, t) + \xi v_s \tau \frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau, t) + \\ & + [v - v_s + ik\bar{v}\tau]R(\tau, t) - v_h \frac{e^{-\tau^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau_1, t) d\tau_1 = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь $R(\tau, t)$ – переопределенная функция распределения $R(\tau)$, t – время.

Коэффициент поглощения (контур линии) при этом определяется как

$$K_{\text{shcg}}(\Omega) = \frac{S}{\pi} \text{Re} \int_0^{\infty} G(t) e^{i\Omega t} dt, \quad (14)$$

где G – функция корреляции дипольного момента:

$$G(t) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau, t) d\tau. \quad (15)$$

Совершим преобразование Фурье по скорости уравнения (13):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}(s, t) - (k\bar{v} + \xi v_s s) \frac{\partial}{\partial s} \mathcal{R}(s, t) + \\ & + [v - v_s(1 + \xi - \theta^2 s^2)] \mathcal{R}(s, t) = v_h e^{-s^2/4} \mathcal{R}(0, t), \\ & \mathcal{R}(s, t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau, t) e^{-i s \tau} d\tau, \quad \mathcal{R}(s, 0) = \frac{e^{-s^2/4}}{\sqrt{\pi}}. \end{aligned} \quad (16)$$

При этом правая часть (10) перенесена в начальные условия. Для функции корреляции из (16) имеем выражение

$$G(t) = \mathcal{R}(0, t). \quad (17)$$

Решение (16), (17) и подстановка его в (14) дает контур линии вида (4), в котором

$$\begin{aligned} \omega_s &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \times \\ & \times \int_0^{\infty} \exp \left\{ - (v - v_s - \xi v_s - i\Omega)t - \frac{(k\bar{v})^2}{4\xi^3 v_s^2} \times \right. \\ & \left. \times \left[\xi (e^{\xi v_s t} - 1)^2 + 2\theta^2 (3 - 4e^{\xi v_s t} + e^{2\xi v_s t} + 2\xi v_s t) \right] \right\} dt. \end{aligned} \quad (18)$$

Обсуждавшаяся выше замена $\xi \rightarrow -1$, $\theta^2 \rightarrow 1/2$ и $v_h \rightarrow 0$, $v_s \rightarrow v_d$ приводит к полному совпадению показателей экспонент в (18) и (2). Таким образом, полученный контур (4), (14), (18) дает корректное описание совместного действия сильных и слабых столкновений при формировании контура линии и сводится к диффузионной модели [2, 3] в результате указанной выше замены параметров, соответствующей обсуждаемому в [17] искусственному приравнению членов ухода и прихода в интеграле столкновений.

Интеграл в (18) простого выражения через специальные функции, подобного (2), не имеет. С помощью разложения экспоненты в нем можно получить громоздкий ряд, содержащий неполные гамма-функции [34]. Поэтому, разлагая экспоненты $\exp(\xi v_s t)$ в (18) в ряд по степеням $\xi \ll 1$, получим более простое кубическое приближение, обобщающее аналогичное приближение (4), (6) на случай асимметричного ядра интеграла столкновений [36] с $\xi \neq 0$:

$$\begin{aligned} K_{\text{shcg}}(\Omega) &= \frac{S}{\sqrt{\pi} k \bar{v}} \text{Re} \left\{ \omega_s / \left[1 - \sqrt{\pi} v_h \omega_s / (k \bar{v}) \right] \right\}, \\ \omega_s &\approx \left[1 + 4iz \left(\frac{2z^2}{3} - 1 \right) \left(\theta^2 + \frac{3}{4} \xi \right) \frac{v_s}{k \bar{v}} \right] w(z) + \\ &+ \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\theta^2 + \frac{3}{4} \xi \right) \frac{v_s}{k \bar{v}} (z^2 - 1), \quad z = \frac{\Omega + i(v - v_s - \xi v_s)}{k \bar{v}}. \end{aligned} \quad (19)$$

Из сравнения (19) с (4), (6) видно, что учет асимметрии ядра свелся к заметному увеличению эффективной ширины ядра, $\theta^2 \rightarrow \theta^2 + 3\xi/4$ ($\theta \approx 0,015$; $\xi \approx 0,05$ [20]), и модификации параметра z , в котором немного увеличена частота слабых столкновений: $v_s \rightarrow (1 + \xi)v_s$.

2. Численное сопоставление контуров

Рассмотрим различие воздействий на контур линии сильных и слабых столкновений, используя простой контур $K_{\text{sh}}(\Omega)$ (4). Из (4) видно, что частота сильных столкновений v_h входит лишь в знаменатель выражения для K_{sh} . Если сильные столкновения преобладают над слабыми, $v_h \gg v_s$, то, полагая $v_s = 0$, из контура $K_{\text{sh}}(\Omega)$ (4) получим контур $K_{\text{hc}}(\Omega)$ (3) в модели сильных столкновений, который описывает столкновительное сужение линий по сравнению с контуром Фойгта:

$$\begin{aligned} K_V(\Omega) &= \frac{S}{\sqrt{\pi} k \bar{v}} \text{Re} \left\{ w \left[\frac{\Omega + i(v - v_s)}{k \bar{v}} \right] \right\}, \\ w &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp \left[-t^2 - 2 \frac{v - v_s - i\Omega}{k \bar{v}} t \right] dt. \end{aligned} \quad (20)$$

В противоположном пределе $v_h \rightarrow 0$ и $v_s \neq 0$ отличие K_{sh} от контура Фойгта (20) будет определяться последним членом в показателе экспоненты в выражении для ω_s (4), пропорциональным v_s , и переопределением $v \rightarrow v - v_s$. Уменьшение индикатриссы рассеяния вплоть до нуля, $\theta \rightarrow 0$, дает переход от (4) с $v_h = 0$ к (20) (см. рис. 1 в [32]). Таким образом, контур K_{sh} , в котором учтены только слабые столкновения, сводится к контуру Фойгта, полученному в предположении отсутствия изменений направления скорости при столкновениях. Данная качественная особенность столкновений с рассеянием на малые углы (уплощение контура линии в пределе до K_V) отмечалась ранее в работах [19, 20, 32, 35, 38]. Для того чтобы выяснить эффект слабых столкновений при $\theta \neq 0$, $v_s \neq 0$ и $v_h \rightarrow 0$, предварительно введем следующие обозначения [38]:

$$\begin{aligned} \alpha &\equiv \frac{v_h}{\gamma}, \quad r \equiv \frac{v_s}{v_h}, \quad \gamma \equiv v - v_h - v_s, \\ v &= [1 + (1 + r)\alpha] \gamma, \quad v_h = \alpha \gamma, \quad v_s = \alpha r \gamma. \end{aligned} \quad (21)$$

Численные расчеты контура (4), проведенные для $\gamma = k\bar{v}/4$, $\theta = 0,3$ и $r = 1/\alpha$, показывают, что

различие максимальных амплитуд $K_{sh}(0)$ при изменении r от 0,5 до 16 составляет 17,4%. С ростом r амплитуда $K_{sh}(0)$ убывает и контур K_{sh} стремится к контуру Фойгта (20). Таким образом, когда рассеяние на малые углы преобладает над рассеянием на большие углы ($r \gg 1$), контур линии становится более плоским за счет частичного устранения столкновительного сужения Дике [7, 8], которое является следствием сильных столкновений и наиболее выражено при рассеянии на большие углы [19]. Данный эффект имеет место для дальнедействующих потенциалов межмолекулярного взаимодействия и/или тяжелой поглощающей и легкой возмущающей молекул. Как следует из проведенных расчетов амплитуд $K_{sh}(0)$, уплощение контура может быть значительным.

Установив тот факт, что воздействие сильных и слабых столкновений на контур линии заметно различается как в качественном плане, так и количественно, выясним с помощью числовых расчетов, насколько велики различия между контурами K_d (2) и K_{hc} (3). Во введении и разд. 1 на основании формул и посредством качественных аргументов показано, что оба этих контура представляют сильные столкновения в двух вариантах, основанных на дифференциальной и интегральной форме записи интеграла столкновений. Естественно, что в силу различия математики, использованной при выводе этих контуров, они будут различаться в некоторой степени и количественно. С целью выяснения этого различия на рис. 1 представлен расчет контуров K_d и K_{hc} для типичного значения параметра сужения и достаточно низкого давления, при котором сужение Дике наиболее выражено. Из данных расчетов следует, что максимальное относительное расхождение амплитуд контуров невелико и равно 2,5%. С ростом давления это расхождение уменьшается, в частности составляя 0,7% для $\gamma = k\bar{v}$. Для больших давлений различием K_d и K_{hc} можно пренебречь.

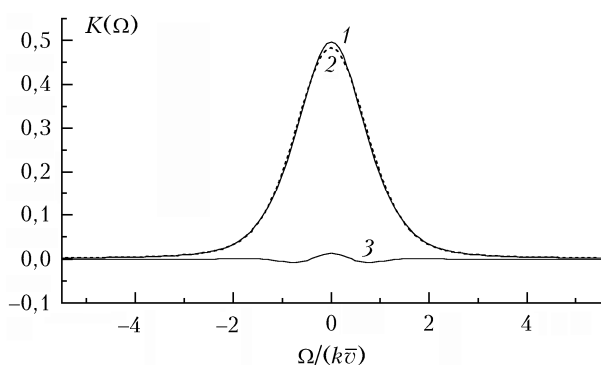


Рис. 1. Контур K_{hc} (3) (кривая 1), K_d (2) (кривая 2) и разность $K_{hc} - K_d$ (кривая 3), $\gamma = k\bar{v}/5$, $\alpha = 1$

Относительная разность максимальных амплитуд этих контуров в зависимости от γ и α представлена на рис. 2. Наибольшая величина этой разности достигается при $\gamma \approx k\bar{v}/5$ и составляет $< 6\%$ при $\alpha \geq 3-4$. При этом контур K_{hc} вблизи центра линии всегда превышает K_d . Благодаря этому при подгонке

данных контуров к эксперименту параметры сужения α , получаемые с помощью K_d , всегда больше значений α , восстанавливаемых с использованием K_{hc} (см. рис. 7 в [39]).

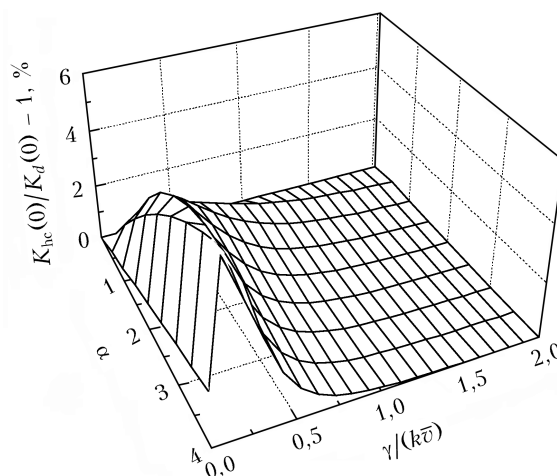


Рис. 2. Относительная разность максимальных амплитуд контуров K_{hc} и K_d в зависимости от параметра сужения α и безразмерного давления газа $\alpha \gamma$

Расчеты, представленные на рис. 3, показывают степень различия контура K_{sh} (4), одновременно учитывающего столкновения с рассеянием на большие и малые углы, и контуров K_{hc} (3), K_{shc} (5) и K_{shca} (6).

Отметим, что в соответствии с тем, что слабые столкновения делают контур более плоским, максимум контура в модели сильных столкновений K_{hc} значительно превышает максимум K_{sh} , приблизительно на 10% при $\theta = 0,3$. Из проведенных расчетов следует, что контуры K_{shca} и особенно K_{shc} , основанные на вариантах кубического приближения, дают достаточно хорошее количественное описание совместного действия сильных и слабых столкновений в широком диапазоне изменения параметров γ и r . Следует отметить, что актуальные систематические ошибки кубического приближения заметно меньше максимальных ошибок, представленных на рис. 3, б, в. Это связано с тем, что, согласно расчетам [20], значения параметров $\theta \approx 0,15$ и $r \approx 0,9-2$ достаточно далеки от значений, при которых реализуются максимальные абсолютные значения соответствующих поверхностей.

При обработке спектров, содержащих большое число линий, целесообразно использовать контур K_{hc} (3), так как в нем учтено сужение линии и разработаны эффективные алгебраические аппроксимации функции $w(z)$ [19, 20, 35, 38]. Такая рекомендация сделана недавно на основании результатов обработки спектров метана в области 6000 см^{-1} [39]. Сужение или уширение линии может быть вызвано различными физическими механизмами формирования контура (см., например, [18-21, 40]). Если пренебречь незначительными вариациями формы, отличительными для различных механизмов, то проявления последних заключаются в основном в сужении либо уширении линий. Надежная количественная

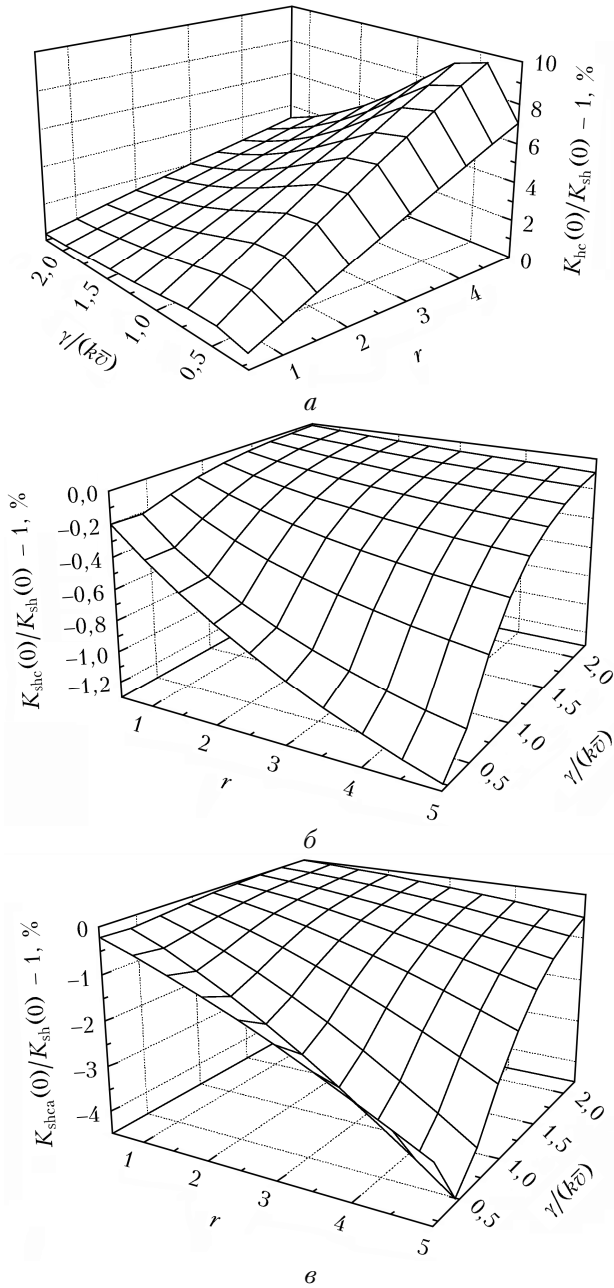


Рис. 3. Относительные разности максимальных амплитуд контура K_{sh} (4) и контуров K_{hc} (3) (а), K_{shc} (5) (б) и K_{shca} (6) (в) как функции безразмерного давления газа и отношения частот слабых и сильных столкновений r (21) при $\alpha = 1$ и $\theta = 0,3$. При уменьшении среднего угла рассеяния до $\theta = 0,1$ вид поверхностей практически не изменяется, но различия контуров значительно меньше: z -координаты графиков а, б и в следует умножить на 0,15; 0,027 и 0,019 соответственно

обработка спектров при этом может быть обеспечена наиболее простым контуром K_{hc} , в котором подгоночный параметр сужения α является индикатором той или иной степени сужения, обусловленного совокупным действием нескольких актуальных механизмов. В работе [39] было выяснено, что обработка линий с помощью более сложных контуров, в явном виде включающих различные механизмы,

дает близкие значения γ и заметно различающиеся величины α .

Соотношение параметров γ и α , получаемых из обработки спектра с помощью контура K_{hc} и с применением других модельных контуров, может быть установлено в результате подгонки K_{hc} к расчетным значениям этих контуров. Проведем такое сопоставление, используя контуры из разд. 1, а также из работ [20, 36–38]. В контуре $\tilde{K}_{sh}(\Omega)$, представленном формулами (9) в [20] и (5) в [38], учтено совместное действие сильных и слабых столкновений и зависимость констант релаксации от скорости поглощающей молекулы [37] (названная в [41] эффектом ветра) в последующих расчетах взята соответствующей случаю самоуширения. В контуре $K_{SDV}(\Omega)$ (формулы (13) в [37] и (5) в [36]) учтен эффект ветра, но не принято во внимание столкновительное сужение Дике [7, 8]. Из результатов проведенной обработки, представленных на рис. 4, следует, что

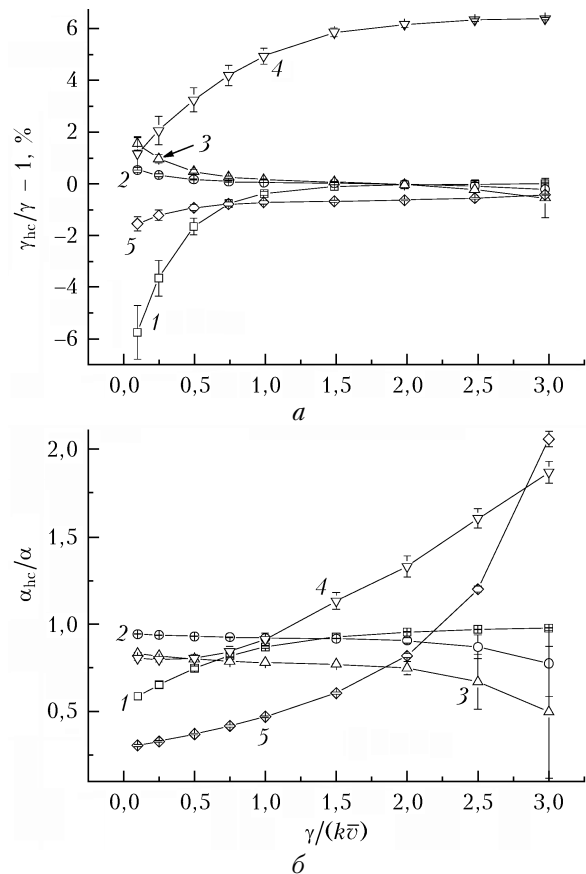


Рис. 4. Зависимости относительных разностей столкновительных полуширин γ и γ_{hc} (а) и отношения параметров уширения α и α_{hc} (б) от безразмерного давления газа для различных контуров (1 – контур K_d (2); 2 – K_{shca} (6); 3 – K_{shcg} (19); 4 – \tilde{K}_{sh} , формула (5) в [39]; 5 – K_{SDV} , формула (5) в [40]), к расчетным значениям которых с помощью метода наименьших квадратов подгонялся контур K_{hc} (3). Подгоночными параметрами этого контура являлись γ_{hc} и α_{hc} . При расчетах всех контуров были взяты значения параметров $\alpha = 1$; $r = 0,9$; $\theta = 0,164$; $\xi = 0,069$ [34]. Отношения массы возмущающей частицы к массе поглощающей молекулы β для контуров \tilde{K}_{sh} и K_{SDV} полагались $\beta = 1$ и 2 соответственно

заметное расхождение столкновительных ширин γ и γ_{hc} имеет место для контура в диффузионной модели (2) в области неоднородного уширения и для контура \tilde{K}_{sh} , в котором учтен эффект ветра (рис. 4, а).

Отметим, что разброс γ_{hc} для всех контуров, кроме \tilde{K}_{sh} , для $\gamma \geq 0,5k\bar{v}$ составляет менее одного процента. Большие значения эффективного параметра сужения α_{hc} для контуров \tilde{K}_{sh} (рис. 4, б, кривая 4) и K_{SDV} (рис. 4, б, кривая 5) обусловлены компенсацией дополнительного сужения линии за счет эффекта ветра, который учтен в контурах \tilde{K}_{sh} и K_{SDV} и отсутствует в K_{hc} , и завышением найденного в результате подгонки параметра α_{hc} . Такое завышение наблюдается в области однородного уширения, поскольку сужение Дике действует в ограниченной области низких давлений, а эффект ветра — при любых давлениях.

Заключение

Проведенный анализ вывода контура линии в модели «слабых» по скоростям столкновений [2, 3, 5, 6, 17] и численное сравнение контуров линий в различных вариантах моделей сильных и слабых столкновений позволяют заключить, что распространенный термин «слабые столкновения», имеющий смысл преимущественного рассеяния на малые углы, применительно к контуру [2, 3, 5, 6] употребляется расширительно без достаточных к тому оснований. Как следует из обсуждения (12), в модели (1), в которой получен контур (2), вклад рассеяния на большие углы (сильных столкновений) имеет тот же порядок величины, что и в модели сильных столкновений (3) [3, 6]. Основное различие этих моделей заключается лишь в форме представления интеграла столкновений в исходном кинетическом уравнении для функции распределения молекул по скоростям — интегральной для модели сильных столкновений и дифференциальной (диффузионного вида) для модели «слабых». Численные расчеты показывают, что существенно различающиеся математические представления контуров линий в этих моделях приводят к незначительным количественным различиям этих контуров, а также параметров уширения и сужения, извлекаемых из обработки спектров с их помощью.

Таким образом, в качестве физически оправданного названия модели [2, 3, 5, 6] более предпочтительнее термин «диффузионная модель», введенный в работе [17]. Отметим также, что после произведенного выше уточнения терминов контур (3.15) из [5] не отражает совместного действия сильных и слабых столкновений, а является комбинацией контуров (2) и (3), каждый из которых обусловлен рассеянием преимущественно на большие углы. Поэтому, как отмечено во введении [40], одновременное извлечение из обработки спектров частот сильных и «слабых» столкновений с помощью контура (3.15) [5] затруднено вследствие сильной корреляции этих частот и близостью форм (2) и (3).

В дополнение к анализу, проведенному в публикациях [17–21, 32], более подробно представлено качественное и количественное действие слабых столкновений с рассеянием молекулы на малые углы на контур линии. Эффект заключается в уплотнении контура вследствие частичного устранения сужения Дике в пределе до контура Фойгта. Максимальная амплитуда контура при этом может уменьшаться на 10–20%.

В кубическом приближении получены простые алгебраические формулы (4), (6) и (19) для контура линии [20, 32, 38], в котором одновременно корректно учтены сильные и слабые столкновения. Показано, что систематическая погрешность этих формул не превышает 1–2% для произвольных давлений и реалистичных отношений частот слабых и сильных столкновений $r < 3$ (см. рис. 3, в). Подгонка полученных контуров к эксперименту наиболее эффективна при использовании теоретической оценки значений параметров θ , r и ξ [20] и их фиксировании.

Посредством подгонки контура в модели сильных столкновений K_{hc} (3) к расчетным контурам, в которых в различных вариантах учтены сильные и слабые столкновения, а также зависимость констант релаксации от скорости, установлено, что получаемые из такой подгонки столкновительные ширины примерно одинаковы для рассмотренных контуров при отсутствии эффекта ветра (см. рис. 4, а). Показано, что эффект ветра приводит к значительному искажению параметров сужения в области больших давлений (см. рис. 4, б).

1. Voigt W. Über das gesetz intensitätsverteilung innerhalb der linien eines gasspektrums. München, Berlin: Sitzber. Bayr Akad., 1912. 603 p.
2. Galatry L. Simultaneous effect of Doppler and foreign gas broadening on spectral lines // Phys. Rev. 1961. V. 122. P. 1218–1223.
3. Подгорецкий М.И., Степанов А.В. К вопросу о доплеровской ширине линий испускания и поглощения // ЖЭТФ. 1961. Т. 40, № 2. С. 561–566.
4. Nelkin M., Ghatak A. Simple binary collision model for Van Hove's $G_s(r, t)$ // Phys. Rev. 1964. V. 135. P. A4–A9.
5. Раутиан С.Г., Собельман И.И. Влияние столкновений на доплеровское уширение спектральных линий // Успехи физ. наук. 1966. Т. 90, № 2. С. 209–236.
6. Раутиан С.Г. Некоторые вопросы теории газовых квантовых генераторов // Тр. ФИАН. 1968. Т. 43. С. 3–115.
7. Dicke R.H. The effect of collisions upon the Doppler width of spectral lines // Phys. Rev. 1953. V. 89. P. 472–473.
8. Wittke J.P., Dicke R.H. Redetermination of the hyperfine splitting in the ground state of atomic hydrogen // Phys. Rev. 1956. V. 103. P. 620–631.
9. Duggan P., Sinclair P.M., Berman R., May A.D., Drummond J.R. Testing lineshape models: Measurements for $v = 1-0$ CO broadened by He and Ar // J. Mol. Spectrosc. 1997. V. 186, N 1. P. 90–98.
10. Ciuryło R., Jaworski R., Jurkowski J., Pine A.S., Szudy J. Spectral line shapes modeled by a quadratic speed-dependent Galatry profile // Phys. Rev. A. 2001. V. 63, N 3. P. 032507–7. DOI: 10.1103/PhysRevA63.032507.
11. Duggan P., Sinclair P.M., May A.D., Drummond J.R. Line-shape analysis of speed-dependent collisional width inhomogeneities in CO broadened by Xe, N₂, and He // Phys. Rev. A. 1995. V. 51, N 1. P. 218–224.

12. Ciurylo R. Shapes of pressure- and Doppler-broadened spectral lines in the core and near wings // *Phys. Rev. A*. 1998. V. 58, N 2. P. 1029–1039.
13. De Vizia M.D., Castrillo A., Fasci E., Moretti L., Rohart F., Gianfrani L. Speed dependence of collision parameters in the H₂¹⁸O near-IR spectrum: Experimental test of the quadratic approximation // *Phys. Rev. A*. 2012. V. 85, N 6. P. 062512–7. DOI: 10.1103/PhysRevA.85.062512.
14. Tran H., Hartmann J.-M., Chaussard F., Gupta M. An isolated line-shape model based on the Keilson–Storer function for velocity changes. II. Molecular dynamics simulations and the Q(1) lines for pure H₂ // *J. Chem. Phys.* 2009. V. 131, N 15. P. 154303. DOI: 10.1063/1.3247898.
15. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процесса переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554 с. // *Ferziger J.H., Kaper H.G. Mathematical theory of transport processes in gases.* Amsterdam–London: North–Holland publ. comp, 1972.
16. Berman P.R., Haverkort J.E.M., Woerdman J.P. Collision kernels and transport coefficients // *Phys. Rev. A*. 1986. V. 34, N 6. P. 4647–4656.
17. Раутиан С.Г. Диффузионное приближение в задаче о миграции частиц в газе // *Успехи физ. наук*. 1991. Т. 161, № 11. С. 151–170.
18. Кочанов В.П. Проявления рассеяния молекул на малые углы в контуре спектральных линий // *ЖЭТФ*. 2014. Т. 145, № 3. С. 387–404.
19. Kochanov V.P. Combined effect of small- and large-angle scattering collisions on a spectral line shape // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2015. V. 159. P. 32–38.
20. Kochanov V.P. Speed-dependent spectral line profile including line narrowing and mixing // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2016. V. 177. P. 261–268.
21. Кочанов В.П. Алгебраическая аппроксимация контура спектральных линий с учетом сильных и слабых по скоростям столкновений // *Оптика атмосф. и океана*. 2015. Т. 28, № 5. С. 474–479. DOI: 10/15372/AOO20150510; Kochanov V.P. Algebraic approximation of the spectral line profile with allowance for hard and soft speed-related collisions // *Atmos. Ocean. Opt.* 2015. V. 28, N 5. P. 394–399. DOI: 10.1134/S1024856015050085.
22. Кочанов В.П., Пташник И.В. Аппроксимация ширины суженного столкновениями контура линии // *Оптика и спектроскопия*. 2000. Т. 89, № 5. С. 736–742.
23. Claveau C., Henry A., Hurtmans D., Valentin A. Narrowing and broadening parameters of H₂O lines perturbed by He, Ne, Ar, Kr and nitrogen in the spectral range 1850–2140 cm⁻¹ // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2001. V. 68, N 3. P. 273–298. DOI: 10.1016/S0022-4073(00)00025-X.
24. Андреева Т.Л. Уравнение диффузии для матрицы плотности // *ЖЭТФ*. 1968. Т. 54, № 2. С. 641–651.
25. Алексеев В.А., Андреева Т.Л., Сوبельман И.И. Метод квантового кинетического уравнения для атомов и молекул и его приложения к вычислению оптических характеристик газов // *ЖЭТФ*. 1972. Т. 62, № 2. С. 614–626.
26. Алексеев В.А., Андреева Т.Л., Сوبельман И.И. К теории нелинейных резонансов мощности газовых лазеров // *ЖЭТФ*. 1973. Т. 64, № 3. С. 813–822.
27. Berman P.R. Theory of collision effects on atomic and molecular line shapes // *Appl. Phys.* 1975. V. 6. P. 283–296.
28. Пестов Э.Г., Раутиан С.Г. Полевое сужение спектральных линий // *ЖЭТФ*. 1973. Т. 64, № 6. С. 2032–2045.
29. Раутиан С.Г., Смирнов Г.И., Шалагин А.М. Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул. Новосибирск: Наука, 1979. 310 с.
30. Blackmore R. A modified Boltzmann kinetic equation for line shape functions // *J. Chem. Phys.* 1987. V. 87. P. 791–800. DOI: 10.1063/1.453286.
31. Пестов Э.Г. Теория релаксации квантовых систем в сильном электромагнитном поле // *Тр. ФИАН*. 1988. Т. 187. С. 60–116.
32. Кочанов В.П. Влияние дифракции молекул на столкновительное сужение линий // *Оптика и спектроскопия*. 2000. Т. 89, № 5. С. 743–748.
33. Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии. М.: Иностран. лит-ра, 1947. 168 с.
34. *Справочник по специальным функциям* / под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. 830 с.
35. Кочанов В.П. Экономичные аппроксимации контуров Фойгта и Раутиана–Собельмана // *Оптика атмосф. и океана*. 2011. Т. 24, № 4. С. 275–278. DOI: 10/15372/AOO20150510; Kochanov V.P. Efficient approximations of the Voigt and Rautian–Sobelman profiles // *Atmos. Ocean. Opt.* 2011. V. 24, N 5. P. 432–435. DOI: 10.1134/S1024856011050071.
36. Kochanov V.P. On one-dimensional velocity approximation for speed-dependent spectral line profiles // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2013. V. 121. P. 105–110.
37. Berman P.R. Speed-dependent collisional width and shift parameters in spectral line profiles // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 1972. V. 12. P. 1331–1342.
38. Kochanov V.P. On parameterization of spectral line profiles including the speed-dependence in the case of gas mixture // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2017. V. 189. P. 18–23. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.11.007.
39. Kochanov V.P., Morino I. Methane line shapes and spectral line parameters in the 5647–6164 cm⁻¹ region // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2018. V. 206. P. 313–322. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.12.006.
40. Kochanov V.P. Line profiles for the description of line mixing, narrowing, and dependence of relaxation constants on speed // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2011. V. 112. P. 1931–1941.
41. Раутиан С.Г. Универсальный асимптотический контур спектральной линии при малом доплеровском уширении // *Оптика и спектроскопия*. 2001. Т. 90, № 1. С. 36–47.

V.P. Kochanov. Comparison of spectral line profiles in the models of hard and soft collisions.

The qualitative and quantitative effects on the line profile of hard and soft velocity-changing collisions with scattering of absorbing molecules at large and small angles, respectively, are considered. It is shown that in the diffusion model of the profile, known as the model of "soft" collisions, scattering at large angles makes a significant contribution comparable to that in the model of hard collisions. The difference between these traditional models lies only in the mathematical forms of the representation of the collision integral, integral and differential, and the following analytical expressions for the profiles. Simple approximate formulas for the profile were derived and tested, which simultaneously took into account hard and soft collisions.