

В.Ф. Головки

## Моделирование ИК-спектров поглощения углекислого газа в спектральной области полосы $\nu_2$

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 29.06.2005 г.

Оригинальная техника учета надлорентцевского поглощения центральной частью контура Q-ветвей и далеких крыльев линий используется для описания ИК-поглощения в области  $\nu_2$  полосы в широком спектральном диапазоне 550–1200  $\text{см}^{-1}$ . Проводится сравнение с экспериментальными измерениями коэффициентов поглощения углекислого газа, уширенного азотом в интервалах давлений 70–200 атм и температур 200–300 К. Испытан простой алгоритм расчета, который может быть пригодным для моделирования функции пропускания в атмосфере Земли и других планет.

### Введение

В последнее время наблюдается повышенный интерес к моделированию функции пропускания в земной атмосфере, и существенный прогресс виден в работах, выполненных в рамках различных радиационных программ (например, [1, 2]). Во всех этих исследованиях подчеркивается важность учета нелорентцевского поглощения в формировании контура линии поглощения, связанного с континуальным поглощением, смешиванием линий и ветвей в резонансной части контура и задачей подлорентцевского поглощения в далеком крыле линии. Последние две проблемы решались в ряде последних статей Ниро с соавт. [3–5], объединяющими экспериментальные лабораторные исследования и теоретические [3] с последующей проверкой подхода на моделировании атмосферных спектров [4, 5]. Основой таких комбинированных исследований являются предыдущие работы [6–9]. Кроме упомянутых выше публикаций имеется огромное количество экспериментальных лабораторных подтверждений важности подобного поведения контура линии во всем инфракрасном спектральном диапазоне в целом.

В данной статье разработанная нами техника расчета вкладов от далеких крыльев линий [10] и надлорентцевского поведения поглощения в центре контура полосы [11, 12] применяется для моделирования поглощения в области  $\nu_2$  полосы на примерах, изученных экспериментально и смоделированных в работе [3]. Так же как и в [11, 12], развиваются простые методы расчета, а особенностью является то, что вместо смеси  $\text{CO}_2$ – $\text{He}$  исследуются уширения спектров углекислого газа азотом.

### 1. Общая схема расчета

Применяется метод полинейного счета с нелорентцевским контуром  $\Phi_i(\omega, p, T)$  отдельной линии

$i$  как функции от частоты  $\omega$ , который при внешних условиях давления  $p$  и температуры  $T$  образуется из произведения лорентцевского контура  $L_i(\omega, p, T)$  и некоторой фактор-функции  $\Xi_i(\omega, p, T)$  [11, 12]:

$$\Phi_i(\omega, p, T) = L_i(\omega, p, T)\Xi_i(\omega, p, T). \quad (1)$$

В свою очередь, фактор-функция  $\Xi_i$  представляется произведением двух функций:

$$\Xi_i(\omega, p, T) = \Gamma_i(\omega, p, T)K_i(\delta\omega_i, T). \quad (2)$$

Величина  $K$  предназначена для описания далеких крыльев, зависит от смещения частоты  $\delta\omega_i = \omega - \omega_i$  от положения центра контура линии  $\omega_i$  и включает в себя согласно гипотезе из работы [10] экспоненциальную зависимость от температуры. Соответственно для правого и левого крыльев контура линии, т.е. для  $\delta\omega \geq 0$  и для  $\delta\omega < 0$ , она имеет вид [10]:

$$K_i(\delta\omega_i, T) = n_r = 1/(\exp(Nhc\delta\omega_i/kT) + 1), \quad (3)$$

$$K_i(\delta\omega_i, T) = n_l = 1 - n_r. \quad (4)$$

Функция  $\Gamma_i$  предназначена для описания сужения контура линии при достаточно больших давлениях  $p$ , например, больше, чем некоторые критические значения  $p_s^{(i)}$  для каждой линии  $i$ . Нам неизвестно ее аналитическое представление, и согласно нашей работе [11] она может задаваться поточно как

$$\Gamma_{i,k}(\omega) = \left(\frac{1}{4}\right)^{x_{i,k}}. \quad (5)$$

Если в выражении (5) опустить индекс  $i$  и разбить весь частотный интервал крыла линии от нуля до бесконечности в единицах некоторой полуширины линии  $\xi^a$  на  $n + 1$  отрезков конечными точками

$$\delta\omega^{(k)} = z_k \xi^a,$$

где  $k = 0, 1, \dots, n$ , то степень  $x_k$  в выражении (5) может пробегать непрерывный ряд интерполированных значений на каждом интервале  $k(k > 0)$ .

Функцию (5) можно задать дискретным набором  $n + 1$  значений и определить границы интервалов степеней как

$$y_k = \log_{0,25}(\Gamma(\delta\omega^{(k)})).$$

Тогда непрерывную последовательность значений степеней на каждом интервале можно найти через интерполяционную формулу для каждого  $0 < k < n + 1$ :

$$x_k(\omega) = y_k + \frac{z_k \xi^a - |\omega - \omega_i|}{(z_k - z_{k-1}) \xi^a} (y_{k-1} - y_k), \quad (6)$$

если  $z_{k-1} \xi^a \leq |\omega - \omega_i| < z_k \xi^a$ . В случае экстремально далекого крыла, когда  $k = n + 1$ ,  $x_k = y_n = y_{n+1}$ , где  $y_{n+1}$  — значение степени для бесконечно длинного крыла.

Индекс  $a$  при величине  $\xi^a$  означает асимптотический характер некоторой полуширины  $\xi$  линии, который будет введен нами в дальнейшем. Наклон ее функциональной зависимости от давления

$$\xi^a(p) = \xi_0^a + r \gamma^L(1 \text{ атм}) p \quad (7)$$

меньше, чем для обычной лорентцевской полуширины

$$\gamma(p) = \gamma(p = 1 \text{ атм}) p,$$

т.е. величина  $r$  в выражении (7) меньше единицы. Так как значения  $\xi_0^a$  больше нуля, то две прямые  $\xi^a(p)$  и  $\gamma(p)$  должны пересечься, например, в точке  $p_s$ , и все давления  $p < p_s$  можно назвать умеренными. Если ввести отношение лорентцевской полуширины к асимптотической

$$r_i(p) = \gamma_i^L(p) / \xi_i^a(p),$$

то для умеренных давлений граничные показатели степеней для отдельной линии  $i$  можно ввести как

$$y_{i,k}(p) = \log_{0,25} \{ 2 + (\Gamma_i(\delta\omega_k) - 2) r_i(p) \} \quad (8)$$

для всех значений  $\Gamma_i(\delta\omega_k) > 2$ , которые естественно принадлежат к центральной части контура. Для  $\Gamma_i(\delta\omega_k) < 2$ , т.е. для крыла линии, фактор-функция (8) в нашем алгоритме не меняется по сравнению с большими давлениями.

На рис. 1 представлены различные контуры изолированной линии на примере наиболее интенсивной Q30 линии полосы  $\nu_2$ . Наш расчет сравнивается с контурами Лорентца, с лорентцевскими полуширинами, обычной  $\gamma_{Q30}^L(p)$  и асимптотической  $\gamma_{Q30}^a(p)$ . Используются значения следующих шести пар значений  $k(n = 5)$  для величин  $\{\Gamma\}_{k=0}^n = 3,7; 3,2; 2,6; 2,0; 1,0; 0,1$  из выражения (5) для каждого смещенного значения частоты  $|\omega - \omega_k| = z_k \gamma^a$ ,

где  $\{z_k\}_{k=0}^n = 0,00; 0,25; 0,58; 1,5; 4,00; 8,00$  соответственно.

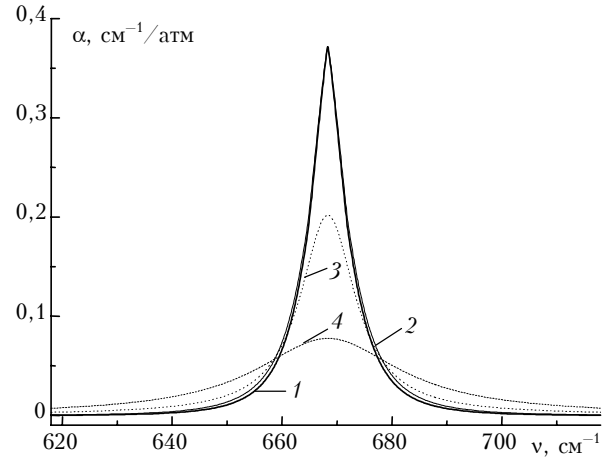


Рис. 1. Пример формы контура линии Q30 полосы  $\nu_2$  с экспоненциальным множителем (3), (4) и без при  $p = 200$  атм и  $T = 296$  К для приведенного коэффициента поглощения  $\alpha$ : 1 — полный расчет; 2 — расчет экспоненциального фактора; 3 — с лорентцианом и новой полушириной; 4 — с лорентцианом

Из рис. 1 видно, что такой контур при достаточно большом давлении 200 атм заметно отличается от лорентцевского. При этом давлении заметно влияние экспоненциального множителя (3), (4) на поведение контура. Поглощение в ветвях полосы рассчитывается методом полинейного счета как сумма вкладов отдельных линий при определенных внешних условиях, влияние которых рассматривается ниже.

В отличие от обычной лорентцевской полуширины, которая прямо пропорциональна давлению при его умеренных значениях, полуширина  $\gamma(p)$ , которая входит в лорентцевский контур  $L$  из уравнения (1), как мы предполагаем, стремится к своему асимптотическому значению  $\gamma^a(p)$  при больших давлениях  $p > p_s$ . Здесь она вычисляется как

$$\gamma(p) = \xi^a(p) \left[ \frac{2k(p) + 1}{2(k(p) + 1)} \right], \quad (9)$$

где  $k_i(p) = \gamma_i^L(p) / \xi_i^a(p_s)$  — относительное значение лорентцевской полуширины. Значение давления  $p_s$  принадлежит точке пересечения прямой  $\gamma_i^L(p)$  с асимптотической кривой  $\xi_i^a(p)$  и, следовательно,  $k_i(p_s) = 1$ . При умеренных давлениях  $p < p_s$  эта величина стремится к другому асимптотическому значению, обычной лорентцевской полуширине  $\gamma^L(p)$ . В данной схеме, например, согласно формуле

$$\gamma(p) = \gamma^L(p) \left[ \frac{k(p) + 2}{2(k(p) + 1)} \right]. \quad (10)$$

Таким образом, зная значения полуширины  $\gamma(p)$  для умеренных и больших давлений, можно описать контур отдельной линии поглощения (1) при любом давлении, а затем, используя метод поли-

нейного счета, рассчитать поглощение ветви и полосы при этом давлении. Эта простая схема с некоторыми уточнениями использовалась нами для описания поглощения углекислого газа в смесях с гелием [11, 12] и дальше в этой работе в смесях с азотом.

Нами было обнаружено, что в широком диапазоне давлений для описания зависимости лорентцевской полуширины от давления недостаточно иметь одну асимптотическую прямую. Для уточнения этой зависимости можно, например, использовать две асимптотические прямые (7)  $\xi^{a,I}$  и  $\xi^{a,II}$  (рис. 2) и получить уже асимптотическую кривую  $\xi^a$ , которая определяет асимптотическое поведение полуширины  $\gamma$  при больших давлениях.

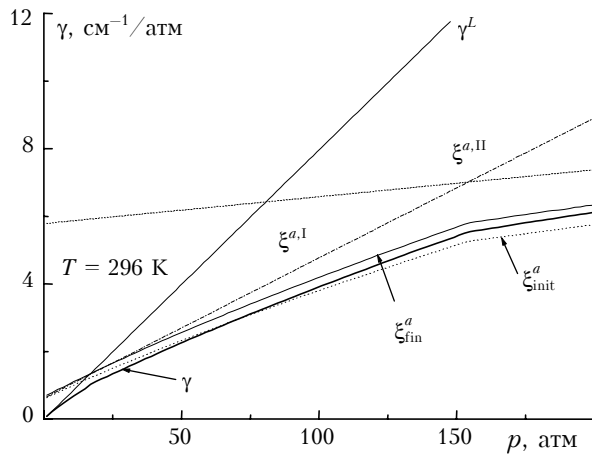


Рис. 2. Зависимость полуширины  $\gamma$  изолированной линии Q30 от давления

При высоких давлениях (9)  $p \gg p_s$  ее значение приближается к асимптотическим значениям асимптотической кривой  $\gamma^a(p)$ , а при малых давлениях (10) — к асимптотическим значениям обычной лорентцевской полуширины  $\gamma^L(p)$ . Асимптотическая кривая строится с помощью двух асимптотических прямых (7)  $\xi^{a,I}$  и  $\xi^{a,II}$  с двумя наборами параметров  $\xi_0^a$  и  $r$ . Конечная кривая  $\xi_{fin}^a$  получена из начальной  $\xi_{init}^a$  с помощью приведенного ниже выражения (14).

## 2. Расчет в центральной части контура линии

Так же как и в наших работах [11,12] для смеси углекислого газа с гелием, вычисление параметра  $\xi_0^a$  зависимости асимптотической полуширины (7) выражается соотношением

$$\xi_0^a = \xi_i^a(0) = A\Delta\omega_i, \quad (11)$$

где  $A$  — некоторая константа;  $\Delta\omega_i$  — среднее расстояние между линией  $i$  и двумя соседними линиями ветви:

$$\Delta\omega_i = (|\omega_{i+1} - \omega_i| + |\omega_i - \omega_{i-1}|)/2. \quad (12)$$

Для расчетов использовалась база параметров CDSD-1000 [13] молекулы  $\text{CO}_2$ . Параметр  $\Delta\omega_i$  заносится в переформатированную базу данных. Расчет центральной части контура линии смеси  $\text{CO}_2\text{--N}_2$  характеризуется некоторыми особенностями по сравнению со смесью  $\text{CO}_2\text{--He}$  [11, 12]. Например, в [11,12] применяются еще три дополнительных параметра, включенных в переформатированную базу данных. Как показали наши расчеты, их использование для смеси  $\text{CO}_2$  с азотом является несущественным при больших давлениях. Тем не менее для общности алгоритма мы включили еще один дополнительный параметр

$$\theta_i = (|\omega_{i+1} - \omega_i| - (\omega_i - \omega_{i-1})) / \Delta\omega_i, \quad (13)$$

показывающий относительное изменение расстояния между соседними линиями ветви, так как его применение приводит к улучшению спектра поглощения полосы при сравнительно небольших давлениях, рассмотренных, например, в [6]. Он влияет на величину асимптотической полуширины, которая трансформируется следующим образом:

$$\xi_i^a(p) = \xi_i^a(p) \exp(B\theta_i) \quad (14)$$

с некоторым положительным параметром  $B$ . На рис. 2 представлена конечная асимптотическая полуширина (7)  $\xi_{fin}^a$ , пересчитанная из начальной  $\xi_{init}^a$  с помощью формулы (14) с параметром  $B = 1,5$ . Другой особенностью является то, что в отличие от смеси углекислого газа с гелием его смесь с азотом требует различной параметризации фактор-функции (5) для различных интервалов давлений.

Пересчет полуширин от 1000 К к обычной температуре  $T$ , близкой к 296 К, осуществлялся с помощью простого закона степени 0,5:

$$\gamma_i^{0,5}(\text{N}_2, 1 \text{ атм}, T) = \gamma_i^L(\text{N}_2, 1 \text{ атм}, 1000 \text{ К})(1000/T)^{0,5}.$$

Этот закон не является точным и не всегда подтверждается экспериментально, к тому же наша зависимость полуширины от давления является существенно нелинейной. Поэтому значение лорентцевских полуширин для изолированной линии, контур которой является нелорентцевским, выступает в наших расчетах как расчетный параметр, а не как константа. Ее значение определяется из экспериментального опыта при малых давлениях, и для учета этого опыта мы вводили дополнительный пересчетный коэффициент  $k$ :

$$\gamma_i^L(\text{N}_2, 1 \text{ атм}) = k_{\text{N}_2/\text{N}_2} \gamma_i^{0,5}(\text{N}_2, 1 \text{ атм}, 296 \text{ К})$$

так, чтобы он приводил к согласию с ранее рассчитанным поведением контура полосы или ветви в тех работах, например [6], где проводился детальный анализ значений полуширин. В расчетах данной статьи коэффициент равнялся 1,4 в отличие от расчетов [11, 12] при уширении гелием, где он был близок к единице.

Моделирование спектров поглощения углекислого газа при различных температурах и уширителях в одинаковых схемах с одинаковыми

значениями параметров контуров показало, что некоторые из них должны зависеть от температуры, чтобы получить по крайней мере адекватное поглощение в пике поглощения ветви. Таким образом, мы пришли к выводу, что параметр  $A$  в выражении (11) имеет следующую параметризацию:

$$A(T) = A(296 \text{ K})(296/T)^{1/2}.$$

Наши расчеты (рис. 3) при относительно больших давлениях подтверждают работоспособность расчетной схемы (1), (2) данной работы, когда контур отдельной линии (1) моделируется параметрами из рис. 1 на основе лорентцевского контура  $L_i$  (1), (2), полуширина которого имеет специфическую зависимость от давления (см. рис. 2).

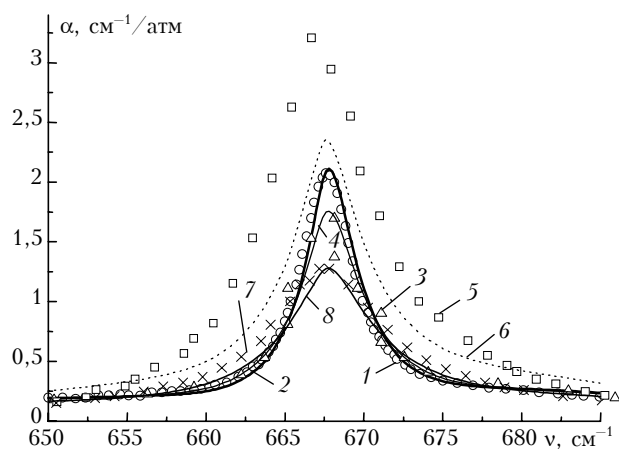


Рис. 3. Сравнение результатов расчета контура поглощения углекислого газа  $Q$ -ветви полосы  $\nu_2$  с данными [3]: 1, 3, 5, 7 — эксперимент [3]; 2, 4, 6, 8 — наш расчет; 1, 2 —  $T = 296 \text{ K}$ ,  $p = 70 \text{ атм}$ ; 3, 4 —  $296 \text{ K}$ ,  $100 \text{ атм}$ ; 5, 6 —  $198 \text{ K}$ ,  $105 \text{ атм}$ ; 7, 8 —  $296 \text{ K}$ ,  $200 \text{ атм}$

На рис. 3 проводится сравнение наших расчетов с экспериментальными измерениями работы Ниро и др. [3], которые предназначались для исследования поглощения полосы  $\nu_2$  в широких спектральных интервалах. В целом наблюдается хорошее восстановление поглощения  $Q$ -ветви при различных давлениях от 70 до 200 атм за исключением некоторых недостатков.

Во-первых, имеет место некоторый сдвиг центра контура вправо по сравнению с экспериментальными значениями. Этому сдвигу способствует применение преобразования (14), однако его исключение приводит только к некоторому улучшению, но не к полному восстановлению положения центра ветви. Напротив, в смеси  $\text{CO}_2\text{—He}$ , которая изучалась в предыдущих наших работах [11, 12], для обеспечения большого сдвига вправо необходимо ввести еще два дополнительных параметра из базы данных, в то время как смесь  $\text{CO}_2\text{—N}_2$  для больших давлений вообще не требует дополнительных параметров кроме расстояния между линиями (12).

Во-вторых, наблюдается избыточное поглощение по краям  $Q$ -ветви, которое можно в некоторой степени снять соответствующим моделированием

с уточненными параметрами поточно заданной функции (5), но здесь не приводятся такие расчеты, так как искажается контур отдельной линии (см. рис. 1) в ее крыле, что заметно при экспоненциальном представлении крыла.

Наиболее серьезным недостатком представляется плохое моделирование контура поглощения ветви при низкой температуре 198 К (см. рис. 3). Нам не удалось убрать этот недостаток полностью даже при сильном изменении контура линии. Возможно, требуются более тонкие представления о контуре линии на стыке ее центральной части с поглощением в крыле.

Несколько слов о значении параметров моделирования. Величина  $A$  из выражения (11) для первой и второй асимптотических прямых (см. рис. 2) соответственно равна 4,5 и 46,0. С ее помощью по формуле (11) определяется величина  $\xi_0^a$  из выражения (7). Для этого необходимо знать среднее расстояние  $\delta\omega$  между соседними линиями ветви (12). Например, для линии  $Q_{30}$  оно равно  $0,1257 \text{ см}^{-1}$ . Наклон двух асимптотических прямых (см. рис. 2) определяется параметром  $r$  (7), который соответственно для этих прямых равен 0,52 и 0,10.

### 3. Расчет в далеких крыльях контура линии

Для расчета поглощения углекислого газа в собственных окнах прозрачности использовался контур отдельной линии (1) с экспоненциальными температурными множителями (3), (4). В целом наблюдается довольно хорошее согласие рассчитанных нами приведенных коэффициентов поглощения с экспериментальными значениями [3] для широкого спектрального интервала  $550\text{—}1100 \text{ см}^{-1}$  (рис. 4).

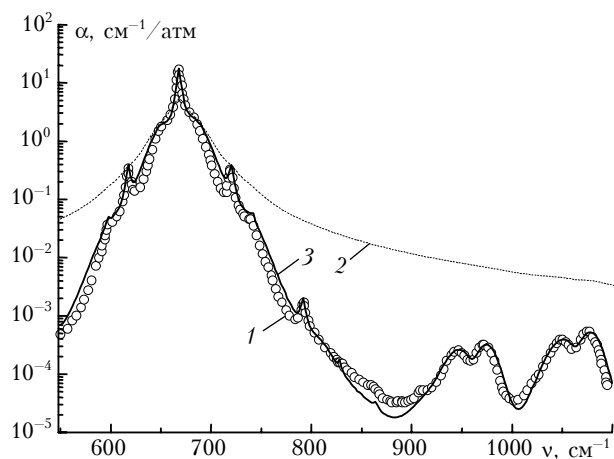


Рис. 4. Сравнение результатов расчета приведенных коэффициентов поглощения углекислого газа в спектральной области полосы  $\nu_2$  с данными [3] при  $p = 100 \text{ атм}$  и  $T = 296 \text{ K}$ : 1 — эксперимент [3]; 2 — наш расчет с лорентцианом; 3 — наш расчет

Без учета экспоненциальных множителей поглощение сильно завышено в далеких крыльях линии (рис. 5).

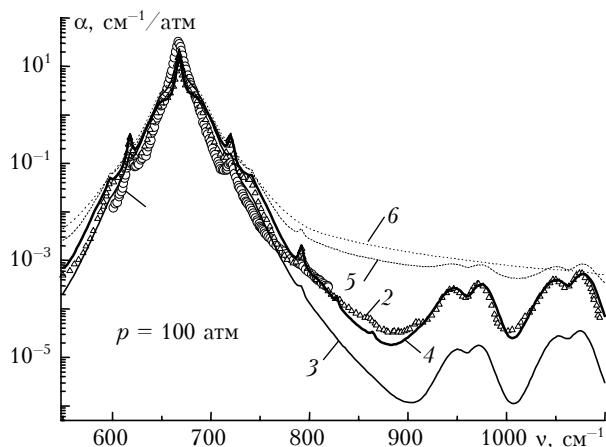


Рис. 5. То же, что на рис. 4: эксперимент [3] (1 –  $T = 198$  К,  $p = 105$  атм; 2 –  $296$  К,  $100$  атм); (3 –  $198$  К,  $105$  атм; 4 –  $296$  К,  $100$  атм); расчет без экспериментального множителя (5 –  $296$  К,  $100$  атм; 6 –  $198$  К,  $105$  атм)

Имеет место адекватный характер температурной зависимости почти во всем спектральном интервале за исключением далеких крыльев. В центральной части контура ( $640\text{--}680\text{ см}^{-1}$ ) приведенное поглощение меньше для больших температур, в близкой части крыла ( $680\text{--}760\text{ см}^{-1}$ ) оно, наоборот, больше (рис. 5). В далеких крыльях ( $760\text{--}820\text{ см}^{-1}$ ) наблюдается [3] сближение поглощения при разных температурах (рис. 5), хотя в наших расчетах сохраняется тенденция среднего крыла вплоть до  $1100\text{ см}^{-1}$ . Интересно отметить, что параметр  $N$ , входящий в выражения (3), (4), равен 5, как и во всех наших предыдущих расчетах [10, 12] в других спектральных интервалах.

Моделирование поглощения при различных давлениях также характеризуется интересными особенностями. Как видно из экспериментальных измерений [3], наглядно показанных на рис. 6, приведенное поглощение слабо зависит от давления в далеких крыльях Q-ветви, хотя в наших расчетных выражениях оно пропорционально давлению буферного газа.

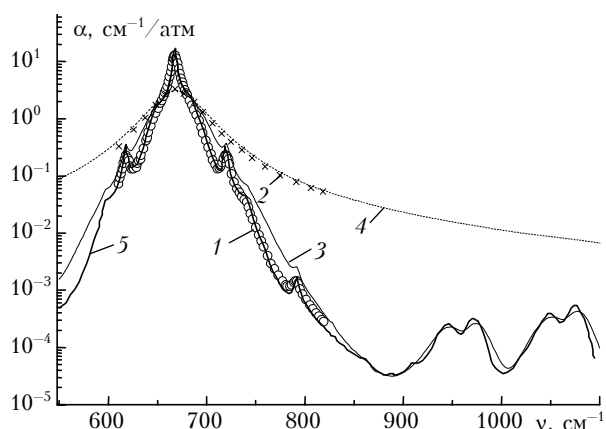


Рис. 6. То же, что и на рис. 4 при  $T = 296$  К и  $p = 200$  атм: эксперимент [3] (1 –  $p = 200$  атм, 5 –  $100$  атм); расчет [3] с лоренцианом (2); наш расчет (3); наш расчет с лоренцианом (4)

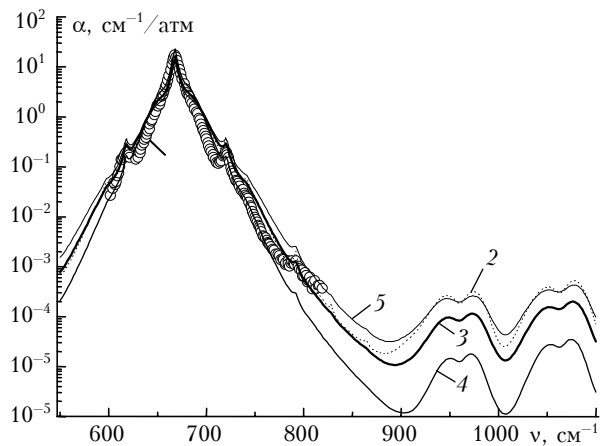


Рис. 7. То же, что на рис. 4 при  $p = 158$  атм и  $T = 255$  К. Для удобства приведены наши расчеты и при других внешних условиях: эксперимент [3] (1 –  $T = 255$  К,  $p = 159$  атм), наш расчет (2 –  $296$  К,  $100$  атм; 3 –  $255$  К,  $159$  атм; 4 –  $198$  К,  $105$  атм; 5 –  $296$  К,  $200$  атм)

Наша техника отработывалась на измерениях в других спектральных областях, где поглощение в далеком крыле пропорционально квадрату давления собственного газа или давлению буферного газа. Для некоторой комбинации внешних условий, например для  $T = 255$  К и  $p = 155$  атм, рассчитанное поглощение (рис. 7) меняется мало (вплоть до  $880\text{ см}^{-1}$ ) по сравнению с поглощением при условиях  $T = 296$  К и  $p = 100$  атм (см. рис. 4), что согласуется с экспериментальными данными и что объяснимо, если принять во внимание противоположный характер изменения поглощения при изменении температуры в отличие от давления.

#### 4. Общая дискуссия и заключительные замечания

В целом в данной статье подтверждена жизнеспособность полинейного метода расчета поглощения полосы на основе нелоренцевского поведения контура поглощения отдельной линии при больших давлениях. Хорошо известно то, что изолированной линии не существует, и то, что это является основной причиной невозможного решения проблемы контура линии экспериментальным путем. Необходимо привлекать дополнительные предположения и желательно включать моделирование для выяснения основных закономерностей поглощения. Здесь рассмотрена только одна простая схема из возможных подходов такого моделирования. Она показывает, что для применения в методе полинейного счета возможно построить контур отдельной линии (см. рис. 1) из лоренцевской формы, полуширина которой нелинейно меняется с давлением (см. рис. 2).

По-видимому, характерная зависимость полуширины от давления вполне понятна. Молекула после изменения своей энергии вследствие поглощения или испускания фотона не может перейти из одного вращательного состояния в другое мгновенно. Необходимо время для перераспределения энергии между внутренними степенями свободы, которое управляется, например, моментом количества

движения молекулы. Дополнительные столкновения в этот период перехода не изменяют в полной мере параметры релаксации или полуширину линии, как это происходит при малых давлениях. Более трудно выглядит объяснение коллапса отдельной линии (см. рис. 1). Можно предположить, что его образование не обязательно следует из временных корреляций, образующихся при использовании уравнений движения частиц сталкивающихся молекул, и вполне возможно привлечение взаимодействия фотонов в спектрах индуцированного поглощения или испускания.

Простота схемы обладает преимуществом при расчете спектров поглощения в широких спектральных областях, что очень важно для атмосферных приложений в климатических исследованиях и для построения обзорных спектров. Тем не менее данную схему можно применять и для задач зондирования в узких спектральных интервалах, но необходимо уточнение параметров, применяемых в данной работе для образования контура отдельной линии применительно к выбранной ветви или полосе.

Требуется дальнейшее исследование поглощения в далеком крыле линии. Хотя экспериментальные данные при других температурах отсутствуют в далеком крыле Q-ветви после  $820\text{ см}^{-1}$  (см. рис. 4) и, по мнению авторов экспериментальной работы [3], имеет место понижение точности измерений в этом диапазоне, намечается тенденция плохого согласия наших результатов для низкой температуры 198 К с экспериментальными данными. Вполне возможно, что этот интервал, так же как и области поглощения других полос, покрыт дополнительным континуальным поглощением, которое, как правило, характеризуется обратным температурным поведением поглощения. Крайне важно получение новых экспериментальных результатов и в областях поглощения других полос углекислого газа для исследования поведения поглощения в зависимости от температуры и давления буферного газа.

1. Turner D.D., Tobin D.C., Clough S.A., Brown P.D., Ellingson R.G., Mlawer E.J., Knuteson R.O., Revercomb H.E., Shippert T.R., Smith W.L. The QME AERI LBLRTM: A closure experiment for downwelling high spectral resolution infrared radiance // *J. Atm. Sci.* 2004. V. 61. P. 2657–2675.
2. Tjemkes S.A., Patterson T., Rizzi R., Shephard M.W., Clough S.A., Matricardi M., Haigh J.D., Hopfner M., Payan S., Trotsenko A., Scott N., Rayer P., Taylor J.P., Clerbaux C., Strow L.L., DeSouza-Machado S., Tobin D., Knuteson R. The ISSWG line-by-line inter-comparison experiment // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2003. V. 77. N 4. P. 433–453.

3. Niro F., Boulet C., Hartmann J.-M. Spectra calculations in central and wing regions of CO<sub>2</sub> IR bands between 10 and 20  $\mu\text{m}$ . I: model and laboratory measurements // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2004. V. 88. P. 483–498.
4. Niro F., Hase F., Camy-Peyret C., Payan S., Hartmann J.-M. Spectra calculations in central and wing regions of CO<sub>2</sub> IR bands between 10 and 20  $\mu\text{m}$ . II. Atmospheric solar occultation spectra // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2005. V. 90. N 1. P. 43–59.
5. Niro F., von Clarmann T., Jucks K., Hartmann J.-M. Spectra calculations in central and wing regions of CO<sub>2</sub> IR bands between 10 and 20  $\mu\text{m}$ . III: atmospheric emission spectra // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2005. V. 90. N 1. P. 61–76.
6. Rodrigues R., Jucks K.W., Lacome N., Blanquet Gh., Walrand J., Traub W.A., Khalil B., Le Doucen R., Valentin A., Camy-Peyret C., Bonamy L., Hartmann J.-M. Model, Software, and Database for Computation of Line-Mixing Effects in Infrared Q-Branched of Atmospheric CO<sub>2</sub> – I. Symmetric Isotopomers // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1999. V. 61. N 2. P. 153–184.
7. Jucks K.W., Rodrigues R., Le Doucen R., Claveau C., Traub W.A., Hartmann J.-M. Model, software, and database for computation of line-mixing effects in infrared Q branches of atmospheric CO<sub>2</sub>: II Minor and asymmetric isotopomers // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1999. V. 63. N 1. P. 31–48.
8. Ozanne L., Nguyen-Van-Thanh, Brodbeck C., Bouanich J.P., Hartmann J.-M., Boulet C. Line mixing and nonlinear density effects in the  $\nu_3$  and  $3\nu_3$  infrared bands of CO<sub>2</sub> perturbed by He up to 1000 bar // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 102. N 19. P. 7306–7316.
9. Boisssoles J., Thibault F., Boulet C. Line mixing effects in the 15  $\mu\text{m}$  Q-branches of CO<sub>2</sub> in helium: theoretical analysis // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1996. V. 56. N 6. P. 835–853.
10. Головки В.Ф. Расчет спектров поглощения двуокиси углерода в широких спектральных интервалах // *Оптика атмосферы и океана.* 2001. Т. 14. № 9. С. 879–885.
11. Golovko V.F. Modeling of IR absorption spectra of the mixture CO<sub>2</sub>-He at moderate and high pressures: Joint Tenth International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics // *Proc. SPIE.* 2003. V. 5396. P. 11–22.
12. Golovko V.F. Моделирование ИК-спектров поглощения парниковых газов в широких спектральных интервалах с учетом нелорентцевского поведения контура линии // *Оптическая спектроскопия и стандарты частот. Молекулярная спектроскопия* / Под ред. Л.Н. Синицы и Е.А. Виноградова. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2004. С. 437–465, 473–476.
13. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L., Bykov A.D., Lavrentieva N.N. CDS-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2003. V. 82. N 1–4. P. 165–197.

**V.F. Golovko. Simulation of IR absorption spectra of carbon dioxide in the spectral region of the  $\nu_2$  band.**

An original technique of calculating the super-Lorentz absorption by the central part of Q-branch profiles and far wings is used to describe the IR absorption in the  $\nu_2$  band in a wide spectral region of 550–1200  $\text{cm}^{-1}$ . The results calculated are compared with the experimental measurements of the nitrogen-broadened CO<sub>2</sub> absorption coefficients at a pressure of 70–200 atm and temperature of 200–300 K. A simple computational algorithm is tested. This algorithm can be used to simulate transmission functions in the Earth's atmosphere and other planetary atmospheres.