

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 535; 504.32; 42.68 Ау, 92.60 Вб, 92.60 Та, 33.20.-т

Оценка вклада линий поглощения H_2O в атмосферное пропускание в УФ-диапазоне

А.В. Ченцов¹, Т.Ю. Чеснокова¹, Б.А. Воронин¹, С.Н. Юрченко^{2*}

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

²Department of Physics and Astronomy, University College London
Gower St., London WC1E 6BT, UK

Поступила в редакцию 29.07.2021 г.

В настоящее время наиболее полным теоретическим списком линий поглощения мономера водяного пара является спектроскопический банк данных POKAZATEL, в котором содержатся линии H_2O до энергии диссоциации 40000 см⁻¹ (0,25 мкм). Проведено моделирование атмосферного пропускания УФ-излучения с использованием линий H_2O из списка POKAZATEL. В УФ-диапазоне уточнены параметры усиления линий поглощения с применением различных аппроксимаций. Показано, что вклад линий поглощения H_2O в атмосферное пропускание может достигать 0,03 в диапазоне ~ 25000 см⁻¹ при спектральном разрешении 0,01 см⁻¹.

Ключевые слова: водяной пар, ультрафиолетовый диапазон, атмосферное пропускание, линии поглощения; water vapor, ultraviolet region, atmospheric transmission, absorption lines.

Введение

Водяной пар поглощает ~ 60% солнечного излучения, поступающего в атмосферу [1]. Наибольшее поглощение водяным паром солнечного излучения наблюдается в ближнем ИК- и видимом диапазонах, но также он имеет полосы поглощения в УФ-диапазоне. В исследованиях J. Du et al. [2] было показано, что водяной пар дает суммарный вклад ~ 1% в радиационный форсинг в диапазоне 290–350 нм, при этом спектральные различия в прямых и диффузных потоках солнечного излучения у земной поверхности за счет поглощения водяным паром могут достигать 22% при спектральном разрешении 2 см⁻¹. Добавление измеренных сечений поглощения H_2O в модель атмосферного радиационного переноса в диапазоне 290–350 нм дает дополнительный вклад 0,75 Вт/м² в случае тропической атмосферы [3]. Неучет поглощения водяным паром в моделировании атмосферного радиационного переноса может также привести к значительной погрешности в результатах восстановления содержания O_3 , O_4 , HONO и OCIO из спектров солнечного излучения, прошедшего через атмосферу [4].

Измерения спектра поглощения водяного пара в УФ-области затруднительны из-за малой интенсивности линий. В настоящее время получено не так

много данных по сечениям поглощения водяного пара в УФ-диапазоне, и они достаточно противоречивы, имеют разный спектральный ход и могут различаться более чем на порядок [2–8]. В работе J. Lampel et al. [8] было показано, что учет линий поглощения H_2O при определении атмосферного содержания водяного пара и малых газовых составляющих методом дифференциального поглощения в диапазоне 394–480 нм позволяет улучшить согласие между модельным и измеренным спектрами. Но при этом, в зависимости от используемой спектроскопической базы данных, корректирующий фактор по сечениям поглощения менялся от 0,5 до 1,9. Предпринимались попытки измерения поглощения H_2O на более коротких длинах волн в УФ-диапазоне [5–7, 9]. В частности, E.M. Wilson et al. [9] провели измерения спектра поглощения водяного пара при температуре и давлении окружающей среды в диапазоне 325–420 нм со спектральным разрешением 0,5 нм и сделали вывод, что поглощение меньше порога чувствительности прибора.

В [7] представлен обзор экспериментальных данных и методов измерения поглощения H_2O в УФ-области. Отмечено, что имеющихся экспериментальных и модельных данных недостаточно для решения проблемы определения природы линий поглощения водяным паром в области 270 нм и необходимо проводить дополнительные исследования. Поэтому новые теоретические исследования совместно с измерениями спектра поглощения водяного пара в УФ-области являются актуальными.

За последние 25 лет проведено несколько «глобальных» высокоточных расчетов спектров водяного

* Алексей Владимирович Ченцов (cav@iao.ru); Татьяна Юрьевна Чеснокова (ches@iao.ru); Борис Александрович Воронин (vba@iao.ru); Сергей Николаевич Юрченко (s.yurchenko@ucl.ac.uk).

пара: расчеты H. Partidge, D.W. Schwenke 1996 [10] и 2000 гг. [11], а также более поздние вычисления С.А. Ташкуна [12, 13], банк данных BT2 [14] и расчет VoTe [15]. Все вышеупомянутые расчеты выполнены для спектральных диапазонов от 0 до $\sim 25000 \text{ см}^{-1}$, за исключением расчета BT2, который проведен до 30000 см^{-1} (333 нм), но выполнен на основе потенциала, оптимизированного только для энергий ниже 25000 см^{-1} [16]. Наиболее полным расчетом спектроскопических свойств водяного пара H_2^{16}O на сегодняшний день является расчет в работе [17], результатом которого стал список линий POKAZATEL, включенный в базу данных ExoMol [18]. Для уточнения потенциала в [17] были использованы экспериментальные уровни энергии H_2^{16}O [19], включающие высоковозбужденные уровни, такие как измеренные О.В. Бояркиным [20] вплоть до диссоциации $\sim 40000 \text{ см}^{-1}$ (250 нм). Эти экспериментальные значения уровней затем также использовались для замены теоретических значений, что было важно для улучшения точности спектральных данных для различных приложений. Список линий POKAZATEL содержит линии с интенсивностью до $10^{-104} \text{ см}/\text{мол.}$ (> 5 млрд переходов), при этом в УФ-диапазоне интенсивность не превышает $10^{-25} \text{ см}/\text{мол.}$ (рис. 1).

В недавней работе E.K. Conway et al. [21] приводятся полуэмпирические данные по УФ-спектру поглощения воды (до 37000 см^{-1}). Они менее полные по сравнению с POKAZATEL (ограниченные по J и интенсивностям), но более точные.

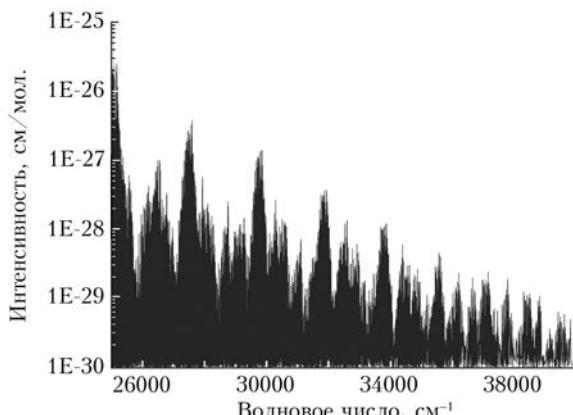


Рис. 1. Интенсивности линий поглощения H_2O из POKAZATEL при комнатной температуре (296 К) в УФ-диапазоне

Ранее в [22] нами была оценена актуальность использования в атмосферных приложениях линий поглощения H_2O в ИК-диапазоне 8–12 мкм из POKAZATEL. Оказалось, что в обычных прикладных задачах для земной атмосферы многочисленные слабые линии не дают значимого результата в ИК-окне прозрачности, тем не менее для протяженных трасс в других спектральных диапазонах их вклад может быть заметен [23].

В настоящей работе приводятся оценки атмосферного поглощения в УФ-диапазоне при различ-

ном спектральном разрешении. Представлены оценки вклада слабых линий поглощения водяного пара, приведенных в банке данных POKAZATEL, и анализируется влияние различных способов моделирования параметров уширения линий на вычисление пропускания.

Подготовка данных по линиям поглощения H_2O для атмосферных расчетов в УФ-диапазоне

Для вычисления атмосферного пропускания полинейным методом необходимо знать параметры линий поглощения H_2O : интенсивность, положение центра линии, энергию нижнего уровня, коэффициенты уширения воздухом и самоуширения, коэффициент температурной зависимости полуширины в случае уширения воздухом. Оригинальный список линий H_2O POKAZATEL предлагает довольно ограниченное описание параметров уширения линий (см. [24]), что может быть недостаточным для некоторых приложений. Кроме того, набор «приближенных» квантовых чисел (колебательных v_1 , v_2 , v_3 , вращательных K_a , K_c), обычно приводимых для молекул типа асимметричного волчка, приписан только для части уровней энергии согласно списку, рекомендованному международной группой IUPAC для H_2^{16}O [19]. Для остальных уровней энергии приведен сокращенный набор, в котором указываются только «точные» квантовые числа — углового момента J , типа симметрии и номера уровня.

Здесь необходимо отметить следующий момент. Для определения коэффициентов уширения в «глобальных» расчетных спектрах, содержащих миллионы линий, требуется лейблинг уровней — присваивание уровню шести квантовых колебательно-вращательных чисел — v_1 , v_2 , v_3 , J , K_a и K_c . Поскольку имеется плавная зависимость полуширин линий от этих приближенных квантовых чисел, возможно оценить коэффициенты уширения, используя простые аппроксимации. Число J является точным квантовым числом и задано априори. Также можно восстановить четность квантового числа K_c , анализируя тип симметрии уровня и четность J .

В нашей работе проведено частичное восстановление квантовых чисел v_1 , v_2 , v_3 , J , K_a и K_c линий поглощения H_2O , позволившее дополнить оригинальный лейблинг POKAZATEL. Для уровней энергии было проведено несколько этапов лейблинга. Сначала для малых $J = 0, 1, 2$ были добавлены вращательные квантовые числа K_a и/или K_c . То есть если $J = 0$, то проекции нулевого вектора не могут быть ничем иным кроме 0, и поэтому в первых двух подматрицах для уровней, где $J = 0$, приписывалось $K_a = K_c = 0$. Аналогичные процедуры идентификации для вращательных квантовых чисел были проведены для уровней в подматрицах с $J = 1, 2$.

Далее в зависимости от симметрии и J можно говорить о четности или нечетности K_c . Мы приписывали значение «-4» для четных значений K_c , что

означает, что K_c может принимать значения 0, 2, 4, 6, 8, 10, ... или «-3» для нечетных значений, т.е. K_c может принимать значения 1, 3, 5, 7, 9, Знание четности или нечетности K_c может помочь в идентификации перехода и/или улучшить в некоторых ситуациях оценку параметров контура (самошире-ния, уширения воздухом). Также был проведен частичный лейблинг по расчету BT2. Когда у одного уровня была разная идентификация по BT2 и по IUPAC [19], данные [19] считались приоритетными. И наконец, была проведена маркировка квантовыми числами v_1, v_2, v_3, J, K_a и K_c уровней с большими J в начале подматрицы, которые относятся к вращательному состоянию с колебательными квантовыми числами, равными 0, и с вращательными числами, равными первым четырем уровням в начале каждой подматрицы $[J \ 0 \ J]$ (000), $[J \ 1 \ J]$ (000), $[J \ 1 \ J - 1]$ (000) и $[J \ 2 \ J - 2]$ (000).

В итоге были дополнительно приписаны приближенные квантовые числа для 26969 колебательно-вращательных уровней энергии, что важно для задач идентификации и расчета параметров контура линий поглощения.

На основе проведенного лейблинга мы выполнили уточненную оценку параметров уширения по JJ -зависимости [25] для самошире-ния и уширения воздухом и J -зависимости для коэффициента температурной зависимости, как было предложено в табл. 7 из [26]. Также были вычислены параметры уширения с использованием аппроксимации, предложенной I.V. Ptashnik et al. в [27]. Проведенное в нашей работе [22] сравнение атмосферного пропускания в диапазоне 8–12 мкм, вычисленного с параметрами уширения линий H_2O с применением различных аппроксимаций и с данными уширения из HITRAN2016 [28], показало, что наилучшее согласие наблюдалось между аппроксимацией [27] и данными HITRAN2016.

Коэффициенты поглощения POKAZATEL были рассчитаны с использованием уточненных в настоящей работе параметров уширения при помощи программы ExoCross [29]. Интенсивность линий мономера H_2^{16}O была домножена на коэффициент 0,99734 согласно его содержанию в земной атмосфере. Значение статсуммы для расчета было взято равным 174,5813. Данные по линиям поглощения H_2O из расчета POKAZATEL, дополненные нашим лейблингом линий и уточненными параметрами уширения, доступны на сайте ИОА СО РАН [<ftp://ftp.iao.ru/pub/VTT/Pokazatel>].

Моделирование атмосферного пропускания

Атмосферное пропускание в УФ-диапазоне вычислялось методом *line-by-line* [30, 31] с использованием линий поглощения H_2O из POKAZATEL и уточненных параметров уширения линий согласно JJ -зависимости [25, 26] при различном спектральном разрешении. В расчетах применялись контур линии Фойгта и прямоугольная аппаратная

функция. Атмосфера по высоте от 0 до 120 км разбивалась на 50 слоев, в которых температура, давление и концентрация газов задавались постоянными согласно метеомоделям [32]. Температурная зависимость статсуммы линий поглощения H_2O аппроксимировалась по данным [33]. Проведено моделирование атмосферного пропускания для метеомоделей лета средних широт и тропиков.

На рис. 2 приведено атмосферное пропускание для наклонной трассы через всю атмосферу под углом 70°. Выбор такой трассы был обоснован тем, что на протяженных наклонных трассах вклад слабых линий H_2O наиболее заметен, и при этом сферичность Земли и рефракция еще не оказывают заметного влияния на расчеты переноса излучения. В расчетах учитывалось поглощение только водяным паром, концентрация которого распределялась по высоте согласно метеомодели лета средних широт. При повышении спектрального разрешения до 0,01 см⁻¹ максимальный вклад линий H_2O в атмосферное поглощение увеличивается более чем в 3 раза по сравнению с расчетами с разрешением 1 см⁻¹.

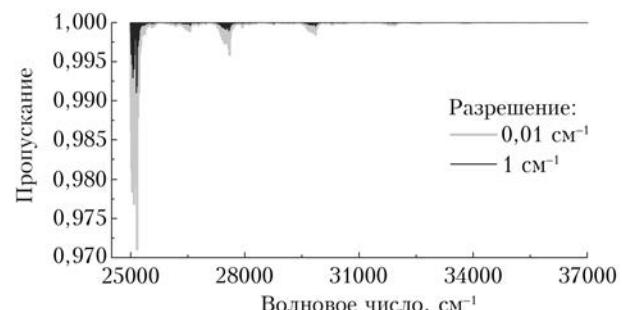


Рис. 2. Атмосферное пропускание, вычисленное с использованием POKAZATEL и параметров поглощения, полученных с помощью JJ -зависимости [25, 26], на наклонной трассе через всю атмосферу от 0 до 120 км под углом 70°; метеомодель – лето средних широт; поглощающий газ – H_2O

На рис. 3, *a* приведено атмосферное пропускание, рассчитанное с учетом основных поглощающих газов для метеомоделей лета средних широт и тропиков [32]. В УФ-диапазоне озон наиболее сильно поглощает солнечное излучение. Концентрация озона в столбе атмосферы была 300 DU. На рис. 3, *b* представлен вклад линий водяного пара в атмосферное пропускание, который рассчитывался как разность между пропусканием, вычисленным с учетом всех газов и без учета поглощения H_2O . Как показано на рисунке, при высоком спектральном разрешении 0,01 см⁻¹ вклад линий H_2O в атмосферное поглощение в УФ-диапазоне составляет 0,03 для лета средних широт и ~0,04 в случае тропической атмосферы, и его следует учитывать в атмосферных расчетах.

Сравнение атмосферного пропускания, вычисленного с фиксированными параметрами уширения и с параметрами, полученными с привлечением JJ -зависимости [25, 26] и аппроксимации Ptashnik et al. [27], представлено на рис. 4. Пропускание

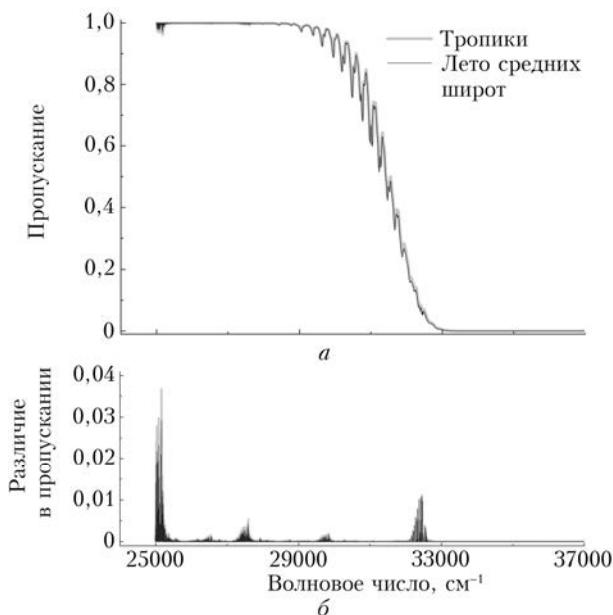


Рис. 3. Атмосферное пропускание, вычисленное с учетом основных поглощающих газов на наклонной трассе через всю атмосферу от 0 до 120 км под углом 70° (а); метеомодели – лето средних широт и тропики; различие в пропускании, вычисленном с учетом всех газов и без учета поглощения H_2O (б)

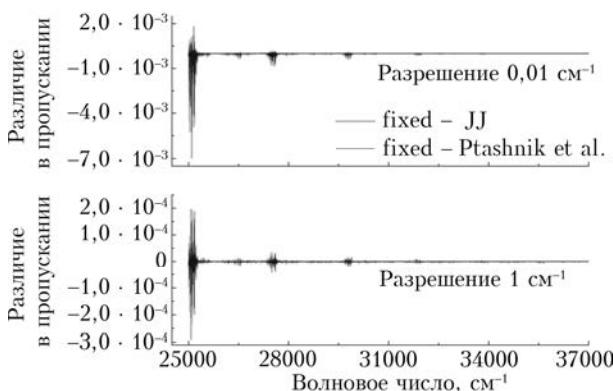


Рис. 4. Различие в атмосферном пропускании, вычисленном с фиксированными параметрами уширения линий H_2O (fixed) [17] и с параметрами, полученными с использованием JJ -зависимости [25, 26] и аппроксимации Ptashnik et al. [27], на наклонной трассе через всю атмосферу от 0 до 120 км под углом 70° ; метеомодель – поглащающий газ – H_2O

моделировалось для атмосферных условий лета средних широт и тропической атмосферы. Различие в атмосферном пропускании в УФ-диапазоне за счет использования различных параметров уширения линий поглощения H_2O достигает 0,006 для модели лета средних широт и 0,007 для тропиков при спектральном разрешении $0,01 \text{ cm}^{-1}$. При спектральном разрешении 1 cm^{-1} различие уменьшается более чем на порядок.

Заключение

В настоящей работе проведены оценки вклада линий H_2O в поглощение солнечного излучения в УФ-диапазоне, для чего были уточнены параметры уширения линий H_2O с использованием JJ -зависимости [25, 26] и аппроксимации Ptashnik et al. [27] и проведен дополнительный лейбллинг линий из списка POKAZATEL. Выявлено, что различие в атмосферном пропускании в УФ-диапазоне за счет использования различных параметров уширения линий поглощения H_2O достигает 0,007.

В прикладных атмосферных задачах при моделировании радиационного переноса в УФ-диапазоне обычно не учитывают поглощение водяным паром. Проведенное моделирование атмосферного пропускания на наклонных трассах через всю атмосферу показало, что вклад линий поглощения H_2O может достигать 0,03 в спектральном диапазоне $0,37\text{--}0,4 \text{ мкм}$ для атмосферных условий лета средних широт и $\sim 0,04$ для тропиков и его следует учитывать при дистанционном зондировании атмосферы спектроскопическими методами. Для повышения точности моделирования поглощения H_2O в УФ-диапазоне необходимо проведение новых измерений и теоретических исследований спектра поглощения водяного пара.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН и при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 19-03-00389 и № 18-45-700011 р_а) и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 18-45-700011 р_а. Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Атмосфера» при частичной финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение № 075-15-2021-661).

1. Kiehl J., Trenberth K.E. Earth's annual global mean energy budget // Bull. Am. Meteorol. Soc. 1997. V. 78. P. 197–208.
2. Du J., Huang L., Min Q., Zhu L. The influence of water vapor absorption in the 290–350 nm region on solar radiance: Laboratory studies and model simulation // Geophys. Res. Lett. 2013. V. 40. P. 4788–4792. DOI: 10.1002/grl.50935.
3. Pei L., Min Q., Du Y., Wang Z., Yin B., Yang K., Disterhof P., Pongetti T., Zhu L. Water vapor near-uv absorption: Laboratory spectrum, field evidence, and atmospheric impacts // J. Geophys. Res.: Atmos. 2020. V. 124. P. 14310–14324. DOI: 10.1029/2019JD030724.
4. Lampel J., Pöhler D., Polyansky O.L., Kyuberis A.A., Zobov N.F., Tennyson J., Lodi L., Frieß U., Wang Y., Beirle S., Platt U., Wagner T. Detection of water vapour absorption around 363 nm in measured atmospheric absorption spectra and its effect on DOAS evaluations // Atmos. Chem. Phys. 2017. V. 17, N 2. P. 1271–1295.
5. Макогон М.М. Спектральные характеристики водяного пара в УФ-области спектра // Оптика атмосфер и океана. 2001. Т. 14, № 9. С. 764–774.
6. Tikhomirov B.A., Troitskii V.O., Kapitanov V.A., Evtushenko G.S., Ponomarev Yu.N. Photo-acoustic measurements of water vapor absorption coefficient in UV spectral region // Acta Phys. Sin. 1998. V. 47, N 3. P. 190–195.

7. Макогон М.М., Пономарев Ю.Н., Тихомиров Б.А. Проблема поглощения водяного пара в УФ-области спектра // Оптика атмосф. и океана. 2012. Т. 25, № 7. С. 584–588; Makogon M.M., Ponomarev Yu.N., Tikhomirov B.A. The problem of water vapor absorption in the UV spectral range // Atmos. Ocean. Opt. 2013. V. 26, N 1. P. 45–49.
8. Lampel J., Pöhler D., Tschritter J., Frieß U., Platt U. On the relative absorption strengths of water vapour in the blue wavelength range // Atmos. Meas. Tech. 2015. V. 8. P. 4329–4346. DOI: 10.5194/amt-8-4329-2015.
9. Wilson E.M., Wenger J.C., Venables D.S. Upper limits for absorption by water vapor in the near-UV // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 170. P. 194–199. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.11.015.
10. Partridge H., Schwenke D.W. The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive *ab initio* calculations and experimental data // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 4618–4639.
11. Schwenke D.W., Partridge H. Convergence testing of the analytic representation of an *ab initio* dipole moment function for water: improved fitting yields improved intensities // J. Mol. Spectrosc. 2000. V. 113. P. 6592–6597.
12. Spectroscopy of atmospheric gases [Electronic resource]. URL: <http://spectra.iao.ru/molecules> (last access: 20.07.2017).
13. Михайленко С.Н., Бабиков Ю.Л., Головко В.Ф. Информационно-вычислительная система "Спектроскопия атмосферных газов". Структура и основные функции // Оптика атмосф. и океана. 2005. Т. 18, № 9. С. 765–776.
14. Barber R.J., Tennyson J., Harris G.J., Tolchenov R.N. A high accuracy computed water line list – BT2 // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2006. V. 368. P. 1087.
15. Voronin B.A., Tennyson J., Lodi L., Kozodoev A.V. The VoTe room temperature $H_2^{16}O$ line list up to 25000 cm^{-1} // Opt. Spectrosc. 2019. V. 127, N 6. P. 967–973.
16. Polyansky O.L., Császár A.G., Shirin S.V., Zobov N.F., Barletta P., Tennyson J., Schwenke D.W., Knowles J.P. High-accuracy *ab initio* rotation-vibration transitions for water // Science. 2003. V. 299, N 5606. P. 539–542.
17. Polyansky O.L., Kyuberis A.A., Zobov N.F., Tennyson J., Yurchenko S.N., Lodi L. ExoMol molecular line lists XXX: A complete high-accuracy line list for water // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2018. V. 480, N 2. P. 2597–2608.
18. Tennyson J., Yurchenko S.N., Al-Refaie A.F., Clark V.H.J., Chubb K.L., Conway E.K., Dewan A., Gorman M.N., Hill C., Lynas-Gray A.E., Mellor T., McKemmish L.K., Owens A., Polyansky O.L., Semenov M., Somogyi W., Tinetti G., Upadhyay A., Waldmann I., Wang Y., Wright S., Yurchenko O.P. The 2020 release of the ExoMol database: Molecular line lists for exoplanet and other hot atmospheres // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2020. V. 255. P. 107228.
19. Tennyson J., Bernath P.F., Brown L.R., Campargue A., Császár A.G., Daumont L., Gamache R.R., Hodges J.T., Naumenko O.V., Polyansky O.L., Rothman L.S., Vandaele A.C., Zobov N.F., Alderzi A.R., Fabrie C., Fazliev A., Furtenbacher T., Gordon I.E., Lodi L., Mizus I. IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor. Part III. Energy levels and transition wavenumbers for $H_2^{16}O$ // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 117. P. 29–58.
20. Boyarkin O.V., Koshelev M.A., Aseev O., Maksyutenko P., Rizzo T.R., Zobov N.F., Lodi L., Tennyson J., Polyansky O.L. Accurate bond dissociation energy of water determined by triple-resonance vibrational spectroscopy and *ab initio* calculations // Chem. Phys. Lett. 2013. V. 568–569. P. 14–20.
21. Conway E.K., Gordon I.E., Tennyson J., Polyansky O.L., Yurchenko S.N., Chance K. A semi-empirical potential energy surface and line list for $H_2^{16}O$ extending into the near-ultraviolet // Atmos. Chem. Phys. 2020. V. 20. P. 10015–10027. DOI: 10.5194/acp-20-10015-2020.
22. Voronina Yu., Chesnokova T.Yu., Voronin B., Yurchenko S. Contribution of new water vapor absorption lines to the atmospheric transmission in the transparency window 8–12 μm // Proc. SPIE. 2020. V. 115600. P. 11560-0B1-OB9. DOI: 10.1117/12.2575547.
23. Chesnokova T.Yu., Voronin B.A., Bykov A.D., Zhuravleva T.B., Kozodoev A.V., Lugovskoy A.A., Tennyson J. Calculation of solar radiation atmospheric absorption with different H_2O spectral line data banks // J. Mol. Spectrosc. 2009. V. 256, N 1. P. 41–44.
24. Barton E.J., Hill C., Czurylo M., Li H.Y., Hyslop A., Yurchenko S.N., Tennyson J. The ExoMol pressure broadening diet: H_2 and He line-broadening parameters // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2017. V. 203. P. 490–495.
25. Voronin B.A., Lavrentieva N.N., Mishina T.P., Chesnokova T.Yu., Barber M.J., Tennyson J. Estimate of the JJ'' -dependence of water vapor line broadening parameters // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2010. V. 111, N 15. P. 2308–2314.
26. Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., Chris Benner D., Birk M., Brown L.R., Carleer M.R., Chackerian Jr.C., Chancea K., Couder L.H., Dana V., Devi V.M., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Hartmann J.-M., Jucks K.W., Maki A.G., Mandin J.-Y., Massie S.T., Orphal J., Perrin A., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Tennyson J., Tolchenov R.N., Toth R.A., Vande Auwer J., Varanasi P., Wagne G. The HITRAN2004 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2005. V. 96. P. 139–204.
27. Пташник И.В., Shine K.P. Влияние обновления спектроскопической информации на расчет потоков солнечной радиации в атмосфере и океана. 2003. Т. 16, № 3. С. 276–281; Ptashnik I.V., Shine K.P. Calculation of solar radiative fluxes in the atmosphere: The effect of updates in spectroscopic data // Atmos. Ocean. Opt. 2003. V. 16, N 3. P. 251–255.
28. Gordon I.E., Rothman L.S., Hill C., Kochanov R.V., Tana Y., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Peralvalov V.I., Perrin A., Shine K.P., Smith M.-A.H., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Barbe A., Császár A.G., Devi V.M., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Jolly A., Johnson T.J., Karman T., Kleiner I., Kyuberis A.A., Loos J., Lyulin O.M., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Moazzen-Ahmadi N., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Polyansky O.L., Rey M., Rotger M., Sharpe S.W., Sung K., Starikova E., Tashkun S.A., Vanden Auwer J., Wagner G., Wilzewski J., Wcislo P., Yu S., Zak E.J., The HITRAN2016 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2017. V. 203. P. 3–69. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.06.038.
29. Yurchenko S.N., Al-Refaie A.F., Tennyson J. ExoCross: a general program for generating spectra from molecular line lists // Astron. Astrophys. 2018. V. 614. P. A131.

30. Мицель А.А., Пташник И.В., Фирсов К.М., Фомин Б.А. Эффективный метод полинейного счета пропускания поглощающей атмосферы // Оптика атмосф. и океана. 1995. Т. 8. № 10. С. 1547–1551.
31. Мицель А.А., Пташник И.В., Миляков А.В. Оптимизация line-by-line алгоритма расчета молекулярного поглощения // Оптика атмосф. и океана. 2000. Т. 13, № 12. С. 1137–1141.
32. Anderson G.P., Clough S.A., Kneizys F.X., Chetwynd J.H., Shettle E.P. AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km), Air Force Geophysics Laboratory. AFGL-TR-86-0110. Environ. Res. Paper. 1986. N 954.
33. Fischer J., Gamache R.R., Goldman A., Rothman L.S., Perrin A. Total internal partition sums for molecular species in the 2000 edition of the HITRAN database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2003. V. 82. P. 401–412.

A.V. Chentsov, T.Yu. Chesnokova, B.A. Voronin, S.N. Yurchenko. Estimation of H₂O absorption lines contribution to the atmospheric transmission in ultraviolet spectral region.

At present, the most complete theoretical list of H₂O monomer absorption lines is the POKAZATEL data bank, which contains H₂O lines up to energy dissociation ~ 40000 cm⁻¹ (0.25 μm). The atmospheric transmission of ultraviolet (UV) radiation is simulated with use of H₂O lines from the POKAZATEL. The broadening parameters of the absorption lines are defined more accurately with use of different approximations in the UV region. It is shown that the H₂O absorption lines contribution to the atmospheric transmission can reach 0.03 near 25000 cm⁻¹ at a spectral resolution of 0.01 cm⁻¹.