

Б.А. Воронин, С.С. Воронина, Ю.В. Воронина, Н.Н. Лаврентьева

Параметры линий водяного пара и пропускание атмосферы в районе 0,69 мкм

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 8.09.2004 г.

Представлена новая база данных для диапазона 14395–14407 см⁻¹, созданная для использования точно рассчитанных параметров линий для расчетов пропускания атмосферы. Полуэмпирический подход был использован для вычисления коэффициентов уширения, сдвига давлением, коэффициентов температурной зависимости линий поглощения H₂O. Данные вычисления были проведены для 24 наиболее сильных линий. Была также выполнена идентификация четырех линий, и проведено моделирование пропускания атмосферы под углами 70 и 80° для диапазона рубинового лазера.

Введение

Данная работа является продолжением наших предыдущих работ [1–4], в которых оценивался вклад в поглощение солнечной радиации слабыми линиями водяного пара, не включенными в современные банки данных (БД) HITRAN [5] и GEISA [6].

В настоящей статье исследуется молекулярное поглощение в диапазоне 14395–14407 см⁻¹. Данный диапазон представляет интерес для атмосферных приложений, например, для измерения концентраций H₂O или O₂ с использованием рубинового лазера. В этом спектральном диапазоне отмечалось наличие в атмосферном воздухе некой субстанции, являющейся источником избыточного поглощения [7]. Возможно, часть этого избыточного поглощения можно определить как поглощение слабыми неучтенными в БД линиями водяного пара. Поэтому детальная спектроскопическая информация является необходимым условием точного расчета пропускания излучения в атмосфере Земли в районе 0,69 мкм. Это, прежде всего, точные центры и интенсивности линий, квантовая идентификация линий, уширение воздухом и самоуширение, сдвиг центра и коэффициентов температурной зависимости для параметров контура.

Несмотря на то что БД HITRAN, включая последние версии, является наиболее полной и современной базой спектров по атмосферным газам, она не лишена ряда недостатков. Например, как было указано в [8], в БД HITRAN содержатся ошибки, полученные при компиляции спектров из оригинальных работ. Часть параметров спектральных линий отсутствует, или приводятся осредненные значения. В статье [9] было показано, что для расчета использовать осредненные значения уширения воздухом нужно очень осторожно, так как это может привести к значительным ошибкам (до 100%) при учете поглощения в атмосфере слабыми линиями H₂O. Поэтому в данной работе мы проводили точные расчеты коэффициентов уширения воздухом для линий поглощения водяного пара.

Слабые линии водяного пара, отсутствующие в БД HITRAN-2000, были взяты из *ab initio* расчета Партриджа–Швенке [11]. Как показали наши предыдущие исследования, например [10], точность расчета [11] по центрам линий очень хорошая, по интенсивностям – удовлетворительная и поэтому данные Партриджа и Швенке можно использовать для атмосферных приложений.

Центры и интенсивности линий поглощения H₂O для данного диапазона в БД HITRAN-2000 были взяты из работы [12], в которой приводится поглощение в пике линий для всех переходов, а интенсивности и ошибки в определении интенсивности – только для 8 наиболее сильных линий в данном регионе. В БД HITRAN-2000 имеется также информация о точности центров интенсивностей и полуширин. Данные по точности центров линий и указанные в БД HITRAN коды ошибок совпадают с ошибками, приведенными в работе [12]. С ошибками в определении интенсивностей получается все наоборот. Наиболее высокая точность по интенсивностям переходов (от 1 до 2%) приписывается четырем самым слабым линиям, у которых в БД нет даже идентификации, а для сильных линий точность или вообще не определена или хуже 20%, в то время как по данным оригинальной работы [12] она составляет порядка 5%. Подобные замечания также послужили одной из причин для проведения нашего исследования.

Методика и детали расчета параметров уширения и сдвига

Для создания базы данных по полуширинам и сдвигам линий водяного пара давлением воздуха использовалась полуэмпирическая методика, включающая различные поправки, связанные с отклонением от приближения Андерсона [13, 14].

В рамках полуклассической теории уширения линий полуширина γ_{if} и сдвиг δ_{if} , связанные с переходом $i \rightarrow f$, могут быть записаны как

$$\gamma_{if} + i\delta_{if} = \frac{n}{c} \sum_k \rho(k) \int_0^\infty v f(v) dv \int_0^\infty \{U(i, f, k, b, v) b db, \quad (1)$$

функция эффективности $U(i, f, k, b, v)$ есть

$$\begin{aligned} & \operatorname{Re}\{U(i, f, k, b, v)\} = \\ & = 1 - \{1 - S_{2,fk,ik}^{(L)}\} \cos[S_{1,fk} - S_{1,ik} + \operatorname{Im}\{S_{2,fk}\} - \operatorname{Im}\{S_{2,ik}\}] \times \\ & \quad \times \exp[-(\operatorname{Re}\{S_{2,fk}\} + \operatorname{Re}\{S_{2,ik}\} + S_{2,fk,ik}^{(C)})]; \quad (2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \operatorname{Im}\{U(i, f, k, b, v)\} = \\ & = \{1 - S_{2,fk,ik}^{(L)}\} \sin[S_{1,fk} - S_{1,ik} + \operatorname{Im}\{S_{2,fk}\} - \operatorname{Im}\{S_{2,ik}\}] \times \\ & \quad \times \exp[-(\operatorname{Re}\{S_{2,fk}\} + \operatorname{Re}\{S_{2,ik}\} + S_{2,fk,ik}^{(C)})], \end{aligned}$$

где n — плотность возмущающих молекул; $\rho(k)$ — заселенности уровня k , k — набор квантовых чисел возмущающей молекулы; v — относительная скорость сталкивающихся молекул; $f(v)$ — функция распределения Больцмана; b — прицельный параметр; S_1 и S_2 — члены первого и второго порядка функции эффективности взаимодействий. Индексы L и C соответствуют «связным» и «присоединенным» («linked» and «connected») диаграммам теории возмущения. Член первого порядка S_1 отвечает за адиабатический эффект и определяется только изотропной частью потенциала, а S_2 — его анизотропной частью. Эти две функции зависят от «классической» траектории относительного движения сталкивающихся молекул.

Выражения (1) и (2) представляют собой общую формулировку полуклассической теории. Их применимость зависит от используемых приближений, накладываемых на: а) относительную траекторию сталкивающихся молекул, б) межмолекулярный потенциал, как на коротких, так и длинных дистанциях, в) рассмотрение адиабатических и неадиабатических эффектов, связанных с функциями S_1 и S_2 . В теории Андерсона относительное движение представляется прямолинейным, а межмолекулярный потенциал имеет вид суммы вкладов дальнедействующих электростатических сил.

В работе [15] Робер и Болами разработали полуклассическую теорию (РБ), которая использует более реалистичский потенциал в виде суммы атомного короткодействующего и электростатического дальнедействующего потенциалов. Они использовали также эффективную параболическую траекторию вместо прямолинейной. Было показано, что особенности межмолекулярного взаимодействия на коротких дистанциях и искривление траекторий играют важную роль для близких столкновений и их рассмотрение приводит к значительному улучшению расчетов. Быков и др. [16] предложили модель точных траекторий (ЕТ) для полуклассического метода расчета параметров уширения. Эта модель была ус-

пешно применена Буддыревой и др. для вычисления полуширин линий [17, 18].

Различные варианты «cut-off-free» метода, учитывающие все более тонкие эффекты, дающие малые поправки, о которых говорилось выше, удовлетворительно описывают параметры линий H_2O , однако, ввиду сложности вычислений, не позволяют наглядно представить и проанализировать процессы, происходящие в сталкивающихся молекулах. Поэтому представляет интерес провести некую коррекцию метода Андерсона, которая бы устранила основные его недостатки. В работе [19] нами был предложен некий полуэмпирический вариант такой коррекции. В данной работе он рассматривается на примере выражения для полуширины. Общие выражения (1) и (2) зависят от вероятностей переходов $D^2(i' | l)$ и $D^2(ff' | l)$ различных каналов рассеяния $i \rightarrow i'$, $f \rightarrow f'$, связывающих нижний и верхний уровни перехода с близлежащими уровнями. Эти параметры являются квадратами редуцированных матричных элементов молекулярных операторов, таких как дипольный момент или компоненты квадрупольного тензора.

В теории Андерсона полуширина может быть выражена в виде суммы, включающей эти параметры:

$$\begin{aligned} \gamma_{if} = & A(i, f) + \sum_l D^2(i' | l) P_l^A(\omega_{i'}) + \\ & + \sum_l D^2(ff' | l) P_l^A(\omega_{ff'}) + \dots \quad (3) \end{aligned}$$

при пренебрежении членами более высоких поряд-

ков. Здесь $A(i, f) = \frac{n}{c} \sum_2 \rho(2) \int_0^\infty v dv b_0^2(v, 2, i, f)$ — обыч-

ное слагаемое теории Андерсона, обусловленное прерыванием ($b_0(v, 2, i, f)$ — параметр прерывания).

Стоящие в выражении (3) суммы включают переходы различного типа (дипольные, квадрупольные и т.д.) и содержат произведения двух величин — $D^2(i' | l)$ и $P_l^A(\omega_{i'})$. Силы переходов $D^2(i' | l)$ и $D^2(ff' | l)$, относящиеся к каналам рассеяния $i \rightarrow i'$, $f \rightarrow f'$, зависят только от свойств поглощающей молекулы (дипольного или квадрупольного моментов, волновых функций) и включают только внутримолекулярные эффекты. Члены с $l = 1$ относятся к переходам дипольного типа, $l = 2$ соответствует квадрупольным переходам основной молекулы.

Параметры $P_l^A(\omega_{i'})$ могут рассматриваться как функции эффективности для данного канала рассеяния. $P_l^A(\omega_{i'})$ представляет собой плавную функцию, поэтому логично ввести корректирующий множитель к этой функции, оставив без изменения член $D^2(i' | l)$, описывающий динамику поглощающей молекулы, т.е. представить функции эффективности $P_l^A(\omega)$ в виде

$$P_l(\omega) = P_l^A(\omega)[1 + a_1\omega + a_2\omega^2 + \dots], \quad (4)$$

где $P_l^A(\omega)$ — функция эффективности в приближении Андерсона. Выражение в квадратных скобках представляет собой поправки на различные эффекты, игнорируемые в теории Андерсона. Коэффициенты

a_1, a_2, \dots определяются из подгонки к экспериментальным значениям коэффициентов уширения линий. Использование функции эффективности $P_l^A(\omega)$ в качестве начального приближения в выражении (4) позволяет воспроизвести корректное поведение полуширин при больших значениях вращательных квантовых чисел или при высоких температурах. Такой полумпирический подход был использован нами в работе [19], где он неплохо зарекомендовал себя для расчета полуширин и сдвигов линии CO_2 давлением, обеспечивая хорошие предсказательные расчеты даже для линии с высокими значениями J .

Расчеты уширения линий H_2O давлением азота и кислорода были выполнены с использованием функций эффективности в следующем виде:

$$P_l(\omega_{ff'}) = P_l^A(\omega_{ff'})[c_1/(c_2 + \sqrt{J_f})], \quad (5)$$

где c_1, c_2 – подгоночные параметры. Таким образом, мы использовали корректирующий множитель к функции $P_l^A(\omega)$ в виде простого выражения, содержащего два параметра, определяемых из подгонки к экспериментальным данным. Но это не является простой операцией подгонки к некоторой экспериментальной кривой, поскольку корректирующий член, получаемый в результате подгонки к нескольким значениям коэффициентов уширения некоторой полосы, описывает не только экспериментальные данные в этой полосе, но и уширение и сдвиг линий для всей совокупности полос для сталкивающейся пары (в нашем случае $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$).

Расчеты полуширин линий выполнены при учете диполь-квадрупольного взаимодействия между дипольным моментом H_2O и квадрупольным моментом возмущающей молекулы, а также квадруполь-квадрупольных взаимодействий.

Показатели температурной зависимости N' и N'' определены согласно соотношениям:

$$\begin{aligned} \gamma(T) &= \gamma(300) \left(\frac{T}{300} \right)^{-N'}, \\ \delta(T) &= \delta(300) \left(\frac{T}{300} \right)^{-N''}. \end{aligned} \quad (6)$$

Рассчитав описанным выше методом коэффициенты уширения и сдвига линий давлением азота и кислорода для температур 200–350 К и используя соотношения

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{air}} &= 0,79\gamma_{\text{N}_2} + 0,21\gamma_{\text{O}_2}, \\ \delta_{\text{air}} &= 0,79\delta_{\text{N}_2} + 0,21\delta_{\text{O}_2}, \end{aligned} \quad (7)$$

мы получили соответствующие коэффициенты уширения и сдвига воздухом и показатели их температурной зависимости.

Параметры линий для диапазона рубинового лазера

Для того чтобы создать новую базу данных для диапазона рубинового лазера, мы использовали БД HITRAN-2000, расчет Партриджа–Швенке [11] и экспериментальные данные [20, 21], имеющиеся

в нашем распоряжении. Из 17 линий H_2^{16}O , представленных для данного диапазона в БД HITRAN, четыре линии не имеют идентификации и для них представлены усредненные значения коэффициентов уширения воздухом и самоуширения. Из расчета Партриджа–Швенке [11] нами включены только линии с интенсивностью больше 10^{-29} см/молек.: 123 – H_2^{16}O , 68 – H_2^{18}O , 27 – H_2^{17}O . Линии HDO в этой области с интенсивностью больше 10^{-29} см/молек. отсутствуют. Для семи наиболее сильных (с интенсивностью $\sim 10^{-26}$ см/молек.) линий из расчета [11], не представленных в БД HITRAN, центры линий были уточнены по верхним и нижним уровням энергии, определенным из обработки экспериментальных спектров [20, 21]. Для остальных слабых линий уточнение было произведено только там, где оно было в принципе возможно, т.е. в основном были уточнены значения нижних уровней энергии. Идентификация четырех линий, для которых отсутствовала идентификация в БД HITRAN, была произведена согласно [20]. Для 24 линий были проведены расчеты параметров уширения и сдвига.

В таблице приводятся частота, квантовая колебательно-вращательная идентификация и параметры линий для диапазона 14395–14407 см⁻¹. Для четырех линий в БД HITRAN-2000 отсутствует идентификация, в таблице она приводится с пометкой «*i*», для них приводится идентификация из нашей работы [20]. Семь линий, с пометкой – *s*, наиболее сильные (с интенсивностью $\sim 10^{-26}$ см/молек.) линии из линий, взятых из расчета [11]. Центры этих семи линий уточнены по уровням энергии, определенным из анализа экспериментальных спектров [20, 21]. Далее приводится уширение воздухом – γ_{air} , рассчитанное в настоящей работе, и $\gamma_{\text{air}}(H)$ – уширение воздухом из БД HITRAN-2000. Кроме того, коэффициент γ_{air} в HITRAN для линий 14395,9407; 14397,6187; 14397,9000 и 14406,9532 приводится равным 0,964 см⁻¹/атм, наш расчет показывает, что для линии 14397,6187 он в 2 раза меньше и равен 0,05433 см⁻¹/атм. Для линий 14395,9407; 14397,9000 и 14406,9532 γ_{air} отличается меньше и равен 0,08747; 0,09240 и 0,09450 соответственно. Данные по самоуширению γ_{self} взяты из БД HITRAN. Для линий, помеченных (*), данные по γ_{self} отсутствовали, и они заменены нашим приблизительным расчетом – осреднением по J -зависимости. После проведен расчет температурной зависимости δ , коэффициентов n_γ , $n_\gamma(H)$ и n_δ . Далее приводятся интенсивности линий – из расчета Швенке – $I(S)$, из БД HITRAN-2000 – $I(H)$, а также верхние E' и нижние E'' уровни энергии. Один верхний уровень, с пометкой – *s*, был взят из расчета [11], и еще 2 уровня (с пометкой *t*) взяты из [21], остальные верхние уровни из нашей работы [20].

Описание метода расчета пропускания и результаты моделирования

Для расчета пропускания использовался метод line-by-line счета, основанный на учете вклада в поглощение на данной частоте каждой линии. Функция пропускания определялась выражением

Линии водяного пара в районе рубинового лазера

ν	$\nu_1 \nu_2 \nu_3$	$J' K'_a K'_c$	$J'' K''_a K''_c$	γ_{air}	$\gamma_{air}(H)$	$\gamma_{rel}(H)$	δ	n_ν	$n_\nu(H)$	n_δ	$I(S)$	$I(H)$	E'	E''
14395,3028	0 0 4	5 0 5	6 1 6	0,07534	0,0737	0,4338	-0,02183	0,378	0,75	1,323	$2,15 \cdot 10^{-26}$	$4,46 \cdot 10^{-26}$	14842,5552	447,2524
14395,9407i	1 0 3	3 3 1	3 1 2	0,08747	0,0964	0,4545	-0,01105	0,635	0,68	0,603	$4,13 \cdot 10^{-26}$	$1,40 \cdot 10^{-26}$	14569,3065	173,3658
14396,1431	1 0 3	8 5 3	7 5 2	0,06505	0,0644	0,3841	-0,02359	0,452	0,68	0,980	$8,03 \cdot 10^{-26}$	$5,92 \cdot 10^{-26}$	15455,9791	1059,836
14396,4570s	2 4 0	8 8 1	7 5 2	0,05020	—	0,317*	-0,04493	0,318	—	1,356	$1,86 \cdot 10^{-26}$	—	15456,2930s	1059,836
14397,3635	1 0 3	5 1 5	4 1 4	0,08230	0,0812	0,4430	-0,01651	0,491	0,61	1,121	$8,41 \cdot 10^{-24}$	$4,89 \cdot 10^{-24}$	14622,2019	224,8384
14397,5811s	1 0 3	8 2 7	8 0 8	0,05446	—	0,317*	-0,03929	0,113	—	1,545	$1,68 \cdot 10^{-26}$	—	15141,6448	744,0637
14397,6187i	1 0 3	8 1 7	8 1 8	0,05433	0,0964	0,4545	-0,03837	0,148	0,68	1,588	$5,10 \cdot 10^{-26}$	$6,21 \cdot 10^{-26}$	15141,7814	744,1627
14397,9000i	0 0 4	2 1 2	3 2 1	0,09240	0,0964	0,4545	-0,01654	0,713	0,68	0,779	$1,73 \cdot 10^{-26}$	$3,37 \cdot 10^{-26}$	14610,0564	212,1564
14400,0730	4 0 0	6 4 2	5 3 3	0,07611	0,0741	0,3859	-0,01809	0,572	0,68	0,894	$1,68 \cdot 10^{-25}$	$1,07 \cdot 10^{-25}$	14904,0411	503,9681
14400,2409s	4 0 0	6 4 3	5 3 2	0,07835	—	0,443*	-0,01769	0,630	—	0,900	$2,26 \cdot 10^{-26}$	—	14909,0530	508,8121
14400,3285	1 0 3	5 0 5	4 0 4	0,08482	0,0837	0,4400	-0,01478	0,547	0,68	0,981	$3,09 \cdot 10^{-24}$	$1,89 \cdot 10^{-24}$	14622,3812	222,0527
14400,7314s	0 0 4	3 1 2	4 2 3	0,09078	—	0,563*	-0,01593	0,638	—	0,870	$2,27 \cdot 10^{-26}$	—	14701,0937	300,3623
14400,7819	1 0 3	4 2 2	3 2 1	0,08823	0,0915	0,4400	-0,01406	0,683	0,68	0,774	$6,20 \cdot 10^{-24}$	$3,60 \cdot 10^{-24}$	14612,9383	212,1564
14402,4341	1 0 3	7 4 4	6 4 3	0,07032	0,0710	0,4040	-0,02287	0,457	0,68	1,089	$3,47 \cdot 10^{-25}$	$2,19 \cdot 10^{-25}$	15159,1590	756,7249
14402,7474	1 0 3	5 3 3	4 3 2	0,07578	0,0788	0,3890	-0,01903	0,543	0,54	1,034	$2,61 \cdot 10^{-24}$	$1,76 \cdot 10^{-24}$	14785,2643	382,5169
14403,1693s	1 0 3	9 5 5	8 5 4	0,06078	—	0,309*	-0,02728	0,342	—	1,201	$3,10 \cdot 10^{-26}$	—	15658,3363t	1255,167
14403,1818s	4 0 0	5 5 1	4 4 0	0,05213	—	0,495*	-0,03438	0,402	—	1,197	$1,94 \cdot 10^{-25}$	—	14891,3160	488,1342
14403,1819	4 0 0	5 5 0	4 4 1	0,05189	0,0513	0,2975	-0,03449	0,395	0,68	1,199	$5,77 \cdot 10^{-25}$	$6,83 \cdot 10^{-25}$	14891,2912t	488,1077
14403,4766s	1 0 3	9 2 8	9 0 9	0,04559	—	0,309*	-0,04944	0,063	—	1,541	$1,80 \cdot 10^{-26}$	—	15323,6451	920,1685
14404,8663	1 0 3	4 1 3	3 1 2	0,09177	0,0922	0,4870	-0,01405	0,678	0,68	0,778	$8,84 \cdot 10^{-24}$	$5,12 \cdot 10^{-24}$	14578,2321	173,3658
14405,7822	1 0 3	5 3 2	4 3 1	0,08061	0,0939	0,4840	-0,01636	0,681	0,68	0,784	$9,58 \cdot 10^{-25}$	$6,06 \cdot 10^{-25}$	14789,6247	383,8425
14406,0515	1 0 3	5 2 4	4 2 3	0,08087	0,0844	0,4389	-0,01742	0,517	0,68	1,102	$5,45 \cdot 10^{-24}$	$3,34 \cdot 10^{-24}$	14706,4138	300,3623
14406,7745	1 0 3	7 4 3	6 4 2	0,07880	0,0710	0,4228	-0,01815	0,635	0,68	0,745	$9,49 \cdot 10^{-26}$	$5,76 \cdot 10^{-26}$	15164,5547	757,7802
14406,9532i	4 0 0	3 3 1	2 0 2	0,09450	0,0964	0,4545	-0,00525	0,645	0,68	-0,536	$2,57 \cdot 10^{-26}$	$2,24 \cdot 10^{-26}$	14477,0440	70,09079

Примечания: ν — частота, см^{-1} ; $\nu_1 \nu_2 \nu_3$ — верхние колебательные квантовые числа; $J' K'_a K'_c$ — верхние и нижние вращательные квантовые числа; γ_{air} — коэффициент уширения воздухом, $\text{см}^{-1}/\text{атм}$ (296 К); $\gamma_{rel}(H)$ — коэффициент самоуширения, $\text{см}^{-1}/\text{атм}$ (296 К) (* — J -зависимость); δ — коэффициент сдвига давлением, $\text{см}^{-1}/\text{атм}$ (296 К); n_ν — коэффициент температурной зависимости полуширины; n_δ — коэффициент температурной зависимости сдвига; $I(S)$ — интенсивность, $\text{см}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})$, 296 К, из расчета [5]; $I(H)$ — интенсивность, $\text{см}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})$, 296 К, из БД HITRAN-2000; E' (E'') — верхние (нижние) уровни энергии, см^{-1} ; (H) — HITRAN-2000; (S) — расчет Парtridge и Швенке.

$$T_{\Delta\nu} = \frac{1}{\nu} \int_{\Delta\nu} \exp[-\tau(\nu)] d\nu, \quad (8)$$

где

$$\tau(\nu) = \frac{1}{\cos\varphi} \int_{z_2}^{z_1} \sum_{i=1}^N k_i(\nu, z) \rho(z) dz \quad (9)$$

— оптическая толщина; N — количество учитываемых линий; φ — зенитный угол; $k_i(\nu, z)$ — коэффициент поглощения i -й линии, определенный на единицу концентрации поглощающего газа; $\rho(z)$ — концентрация поглощающего газа на высоте z .

В данном расчете использовался контур Фойгта. При проведении расчетов в рассмотрение бралось только поглощение водяным паром и его континуумом (модель SKD2.4). Для вычисления пропускания использовался зенитный угол, равный 70 и 80°.

Для того чтобы в задачах распространения излучения проанализировать влияние уточнения базы данных HITRAN на основе данных Швенке и наших данных по полуширинам, были проведены три серии модельных расчетов. Результаты моделирования представлены на рис. 1–4. На рис. 1 показано влияние коррекции коэффициентов уширения воздухом на результаты расчетов.

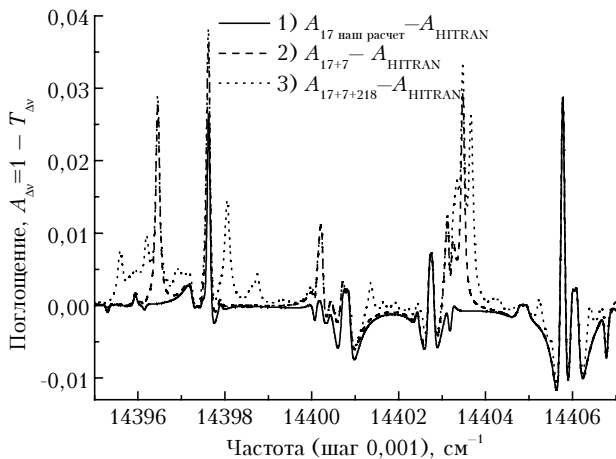


Рис. 1. Разница в поглощении при учете различного числа линий для зенитного угла 70°

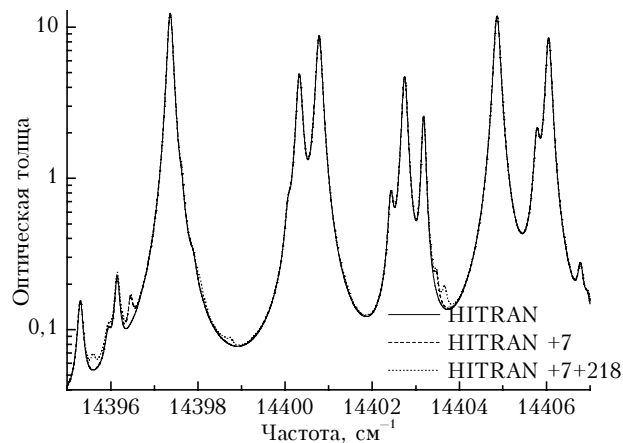


Рис. 2. Моделирование оптической толщины для зенитного угла 80°

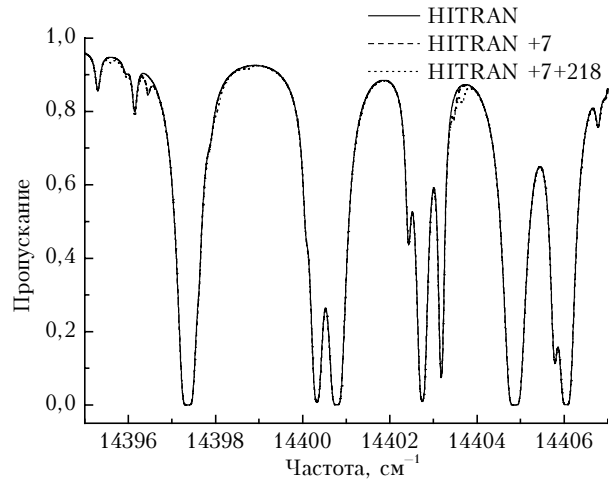


Рис. 3. Пропускание H₂O в диапазоне 14395–14407 см⁻¹ для зенитного угла 80°

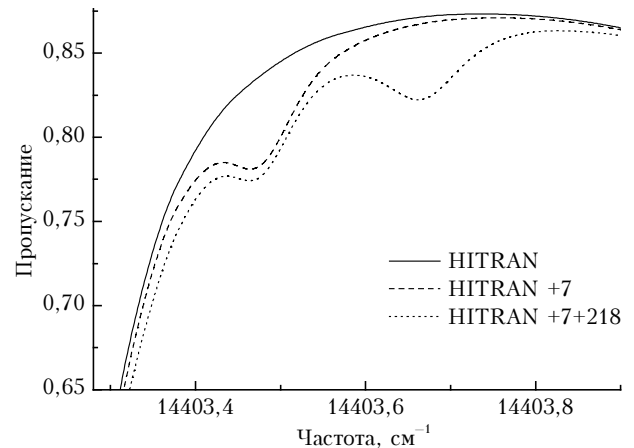


Рис. 4. Пропускание H₂O в районе 14403 см⁻¹ для зенитного угла 80°

Кривые на рис. 1–4 обозначают следующее:

1) Непрерывная кривая показывает разницу между расчетом поглощения для 17 линий из БД HITRAN-2000 с измененными, согласно нашим расчетам, коэффициентами уширения воздухом (см. таблицу) с этими же линиями, но без изменения коэффициентов. То есть данная кривая показывает разницу только за счет уточнения коэффициентов уширения воздухом для линий поглощения H₂O.

2) Пунктирной линией показана разница между поглощением для 17 линий из БД HITRAN-2000 и теми же самыми линиями с измененными параметрами и к ним прибавлены семь наиболее сильных линий из расчета Швенке [11] (в таблице эти семь линий отмечены «*»).

3) Точечной линией показана разница между поглощением 17 типичных линий HITRAN-2000 и теми же самыми линиями с измененными параметрами уширения с добавленными семью сильными и 218 слабыми линиями из расчета Швенке [11].

Различие между расчетами для первого и второго случаев на рис. 1 дает 3% в поглощении, что является уже значимой величиной, так как типичная погрешность определения функции поглощения для Фурье-спектрометров составляет примерно 1%

и меньше (т.е. отношение сигнал-шум $\sim 100/1$ и выше [22]). Для третьего случая, когда учитываются все возможные линии из расчета с интенсивностью [11], она дает величину уже до 4% и говорит о необходимости пополнения информации о слабых линиях и/или континууме водяного пара [7].

На рис. 2 представлен расчет оптической толщи для трех описанных выше ситуаций. В первом случае приводится поглощение 17 линиями (непрерывная черта) из БД HITRAN-2000 (17 линий в данном диапазоне и 62 ближайшие линии, лежащие в диапазоне 13370–14432 cm^{-1} , учтены далекими крыльями). Во втором случае (пунктирная линия) к 17 линиям из БД HITRAN-2000 добавлены семь наиболее сильных линий H_2^{16}O из расчета [11]. Центры этих семи линий были уточнены по известным экспериментальным верхним уровням энергии [20, 21]. В третьем случае (точечная линия) к 17 и 7 линиям были добавлены 218 линий из расчета [11], относящиеся к изотопическим модификациям H_2^{16}O , H_2^{17}O и H_2^{18}O .

На рис. 3 приводится пропускание в спектральном диапазоне 14395–14407 cm^{-1} для условий, описанных выше для рис. 2. Можно видеть, что существенный вклад неучтенные линии могут давать в районе 14396 и 14404 cm^{-1} . На рис. 4 представлено пропускание в спектральном диапазоне 14404 cm^{-1} . Из рис. 4 можно видеть, что вклад неучтенных линий поглощения отличается от расчета по БД HITRAN почти на 7%.

Выводы

В настоящей статье приводится наиболее полная информация на сегодняшний день по параметрам линий водяного пара в диапазоне 14395–14407 cm^{-1} .

Показано, что в БД HITRAN используются осредненные коэффициенты уширения воздухом для ряда линий водяного пара и их уточнение может приводить к значительному, до 3%, увеличению в поглощении на длинных трассах через атмосферу под углом 70°.

Включение всех линий поглощения водяного пара [11], отсутствующих в БД HITRAN, может давать вклад в поглощение до 5–7% (трасса под углом 80°).

Пополнение базы данных HITRAN-2000 наиболее сильными линиями поглощения водяного пара из расчета [11] может давать увеличение поглощения до 3–5%. Следует ожидать, что дополнительные линии можно экспериментально зарегистрировать в спектре, например с использованием оптико-акустической техники [7, 23].

Авторы выражают благодарность С.Д. Творову, А.Д. Быкову и К.М. Фирсову за полезные обсуждения в ходе работы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 04-05-64569а), ГНТП ОФН РАН № 2.10 и гранта Министерства образования (2002) E02-3.2-91.

1. Быков А.Д., Воронин Б.А., Науменко О.В., Симица Л.Н., Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю. Вклад слабых линий поглощения водяного пара в ослабление корот-

коволнового излучения // Оптика атмосф. и океана. 1999. Т. 12. № 9. С. 787–790.

2. Воронин Б.А., Серебренников А.Б., Чеснокова Т.Ю. Оценка роли слабых линий поглощения водяного пара в переносе солнечного излучения // Оптика атмосф. и океана. 2001. Т. 14. № 9. С. 788–791.
3. Воронин Б.А., Воронина С.С. Роль слабых линий поглощения водяного пара в ослаблении узкополосного лазерного излучения в микроокнах прозрачности атмосферы // Оптика атмосф. и океана. 2002. Т. 15. № 4. С. 360–363.
4. Воронин Б.А., Насретдинов И.М., Серебренников А.Б., Чеснокова Т.Ю. Моделирование переноса солнечного излучения с учетом слабых линий поглощения водяного пара в различных аэрозольных условиях // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16. № 3. С. 298–302.
5. <http://www.hitran.com>
6. <http://ara.lmd.polytechnique.fr>
7. Тихомиров Б.А., Тихомиров А.Б., Фирсов К.М. Нерезонансное поглощение импульсного излучения лазера на рубине атмосферным воздухом и смесью H_2O с азотом // Оптика атмосф. и океана. 2001. Т. 14. № 9. С. 740–747.
8. Giver L.P., Chackerian C., Jr., Varanasi P. Visible and near-infrared H_2^{16}O line intensity corrections for HITRAN-96 // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2000. V. 66. P. 101–105.
9. Пташник И.В., Шайн К.П. Влияние обновления спектроскопической информации на расчет потоков солнечной радиации в атмосфере // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16. № 3. С. 276–281.
10. Воронин Б.А. Анализ экспериментальных спектров и расчетов *ab initio* водяного пара // Изв. вузов. Физ. 1999. № 3. С. 93–100.
11. Partridge H., Schwenke D. 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. № 11. P. 4618–4639.
12. Mandin J.-Y., Camy-Peyret C., Flaud J.-M., Chevillard J.-P., Brault J.W. The high-resolution spectrum of water vapor between 13200 and 16500 cm^{-1} // J. Mol. Spectrosc. 1986. V. 116. P. 167–190.
13. Anderson P.W. Pressure broadening in the microwave and infrared region // Phys. Rev. 1949. V. 76. P. 657–661.
14. Tsao C.J., Curnutte B. Line-widths of pressure-broadening spectral lines // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1961. V. 2. P. 41–91.
15. Robert D. and Bonamy J. Short range force effects in semiclassical molecular line broadening calculations // J. de Phys. 1979. V. 40. N 10. P. 923–943.
16. Быков А.Д., Лаврентьева Н.Н., Симица Л.Н. Влияние искривления траектории столкновением на сдвиги линий молекул в видимой области спектра // Оптика атмосф. и океана. 1992. Т. 5. № 9. С. 907–914.
17. Buldyreva J., Bonamy J.J., Robert D. Semiclassical calculations with exact trajectory for N_2 rovibrational Raman linewidths at temperatures below 300 K // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1999. V. 62. P. 321–343.
18. Buldyreva J., Benec'h S., and Chrysos M. Infrared nitrogen perturbed NO linewidths in a temperature range of atmospheric interest: An extension of the exact trajectory // Phys. Rev. A. 2001. V. 63. N 1. P. 708–722.
19. Быков А.Д., Лаврентьева Н.Н., Симица Л.Н. Расчет коэффициентов уширения и сдвига спектральных линий углекислого газа для высокотемпературных баз данных // Оптика атмосф. и океана. 2000. Т. 13. № 12. С. 1098–1102.

20. *Bykov A., Naumenko O., Sinita L., Voronin B.A., Flaud J.-M., Camy-Peyret C., Mandin J.-Y.* Reanalysis of water vapor high resolution spectrum in the 13200 to 16500 cm^{-1} region // Proc. SPIE. 1998. V. 3583. P. 119–124.
21. *Tennyson J., Zobov N.F., Williamson R., Polyansky O.L., Bernath P.F.* Experimental Energy Levels of the Water Molecule // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. N 11. P. 4618–4639.
22. *Toth R.A.* Line positions and strengths of HDO between 6000 and 7000 cm^{-1} // J. Mol. Spectrosc. 1997. V. 186. P. 66–89.
23. *Tikhomirov A.B., Tikhomirov B.A.* Water vapour absorption spectrum in the region of the ruby laser generation // XI Joint International Symposium «Atmospheric Physics». Tomsk: IAO SB RAS. A1-22. P. 52.

B.A. Voronin, S.S. Voronina, Yu.V. Voronina, N.N. Lavrent'eva. **Spectral line parameters of water vapor and atmospheric transmission in 0.69 μm region.**

A new linelist for water vapor in the 14395–14407 cm^{-1} region is created in order to use the refined line parameters in atmospheric transmittance calculations. The dea semiempiric approach developed has been used for calculation of the air pressure broadening and shifting coefficients of H_2O spectral lines, as well as the coefficients of thermal dependence of line profile parameters. This calculations have been performed for 24 strongest lines. The calculation of the atmospheric transmission spectrum has been carried out in this region.