## КОНФЕРЕНЦИЯ А

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И АТМОСФЕРНЫЕ РАДИАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ

## ИНТЕНСИВНОСТИ ЛИНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ ВОДЫ В ОБЛАСТИ 7000 CM<sup>-1</sup>

Т.М. Петрова<sup>1</sup>, А.М. Солодов<sup>1</sup>, <u>В.М.Дейчули<sup>1,2</sup></u>, А.А. Солодов<sup>1</sup>, Ю.Н.Пономарев<sup>1</sup> <sup>1</sup>Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, <sup>2</sup> Томский государственный университет

tanja@iao.ru, solodov@iao.ru, dvm91@yandex.ru, asolodov@iao.ru, yupon@iao.ru

В области 6670-7680 см<sup>-1</sup> проведены измерения спектров поглощения молекулы воды, уширенных давлением двух буферных газов – аргона и водорода. Спектры были зарегистрированы на Фурье-спектрометре IFS 125 HR при комнатной температуре с разрешением 0.01 см<sup>-1</sup> и в диапазоне изменения давлений буферных газов от 0 до 1000 мбар. Из анализа двух наборов данных получены значения интенсивностей линий поглощения молекулы воды, причем для аппроксимации использовался контур Фойгта, зависящей от скорости поглощающей молекулы.

**Ключевые слова:** параметры линий поглощения, молекула воды, Фурье-спектрометр, контур Фойгта, зависящий от скорости контур Фойгта.

Молекула воды является одной из наиболее распространенных молекул во Вселенной. Она играет важную роль в атмосферном поглощении излучения и оказывает влияние на радиационном балансе Земли. Широко применяемый контур Фойгта (VP) не описывает линий поглощения молекулы H<sub>2</sub>O с достаточной точностью: существуют значительные отклонения теоретического контура от расчётного вблизи центра спектральной линии и на ее крыльях. В работах ряда авторов показано, что для устранения этой проблемы необходимо использовать модели контуров, учитывающих тонкие эффекты, например, эффект Дикке, интерференцию линий, эффект ветра и т.д (см., например, [1-3]). Эффект ветра вызван зависимостью констант столкновительной релаксации от скорости поглощающей активной молекулы. В этом случае лоренцевская полуширина и сдвиг центра линии не являются постоянными, а зависят от скорости поглощающей молекулы. Одной из моделей, в которой учитывается данный эффект, является зависящий от скорости контур Фойгта [4].

В данной работе представлен анализ значений параметров линий поглощения молекулы воды для оптических систем вода-аргон и вода-водород, полученных из спектров с высоким отношением сигнала к шуму. Для аппроксимации линий поглощения использован контур Фойгта, зависящий от скорости.

Используя Фурье-спектрометр Bruker IFS 125HR, были выполнены измерения спектров поглощения молекулы воды в области  $6670-7680 \text{ см}^{-1}$  для H<sub>2</sub>O-Ar и H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>. Более подробно описание спектрометра приведено в работе [5]. В качестве источника излучения в спектрометре был использован вольфрамовый источник света, регистрация излучения осуществлялась с

A14

помощью InSb детектора, охлаждаемого жидким азотом. Многоходовая оптическая кювета Thermo Electron с базой 20 см, позволяющая получить длину оптического пути до 10 м, размещалась внутри кюветного отделения спектрометра. Давление буферного газа аргона варьировалось от 0 до 1000 мбар. Измерение давления смесей внутри кюветы производилось с помощью датчика давления DVR5, обладающего погрешностью измерения 1%. Для улучшения отношения сигнала к шуму использовался оптический фильтр, который имел максимальное пропускание в области 7000 см<sup>-1</sup>. Усреднение проводилось по 4000 сканированиям. Все записи спектров поглощения были выполнены при комнатной температуре (296 K) со спектральным разрешением 0.01 см<sup>-1</sup>. На рисунке 1 в качестве примера представлен обзорный спектр пропускания молекулы воды.



Рисунок 1. Обзорный спектр пропускания  $H_2O$  в области 6000-8400 см<sup>-1</sup> при давлении паров воды 0.0087 атм. и аргона – 0.503 атм.

Для анализа спектров поглощения использовалась программа [6, 7], которая позволяет получать параметры линий с помощью их одновременной подгонки к нескольким зарегистрированным спектрам, заснятым при разных условиях. В новой версии программы добавлен зависящий от скорости контур Фойгта, в котором учитывается квадратичная зависимость коэффициентов уширения от скорости активной молекулы. С помощью программы определяются такие параметры спектральных линий, как положение центра линий, их интенсивности, коэффициенты уширения и сдвига, сужения и асимметрии. На рисунке 2 представлен пример аппроксимации линии поглощения молекулы воды ( положение центра 7178.45 см<sup>-1</sup>). Для аппроксимации было использовано два контура – контур Фойгта и контур Фойгта зависящий от скорости. При низких давлениях буферного газа (0.273 атм) наблюдается отличие разностей коэффициентов поглощения экспериментальных и рассчитанных. При

увеличении давления буферного газа это отличие уменьшается. При давление аргона выше 0.9 атм, то разности расчёт-эксперимент практически совпадают.



Рисунок 2. Пример аппроксимации линии поглощения молекулы воды с помощью двух контуров – контура Фойгта и зависящего от скорости контура Фойгта. Давление аргона составляло 0.273 (1), 0.503 (2), 0.680 (3), и 0.9 атм (4). Справа приведена разность между рассчитанными и экспериментальными значениями.



Рисунок 3. Сравнение интенсивностей линий поглощения молекулы воды, полученные из двух наборов данных : вода– аргон (  $I_{Ar}$ ) и вода- водород ( $I_{h2}$ )

Используя два набора данных «вода – аргон» и «вода – водород» получены значения интенсивностей для 110 линий поглощения молекулы воды. Сравнение полученных данных представлено на рисунке 3. Отличие значений не превышает 2%, а в среднем оно составляет

0.4%. В докладе также приведено сравнение полученных значений интенсивности линий поглощения молекулы воды с данными других авторов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 15-02-06808.

## Литература

1. *Hartmann J.-M., Boulet C., Robert D.* Collisional Effects on Molecular Spectra: Laboratory experiments and models, consequences for application. Amsterdam, Boston: Elsevier Science, 2008. 406 p.

2. *Lisak D., Cygan A., Bermejo D., Domenech J.L., Hodges J.T., Tran H.* Application of the Hartmann–Tran profile to analysis of H<sub>2</sub>O spectra // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2015. V. 164. P. 221–233

3. *Ngo N.H., Lisak D., Tran H., Hartmann J.-M.* An isolated line-shape model to go beyond the Voigt profile in spectroscopic databases and radiative transfer codes // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V.129 P. 89–100

4. Boone C.D. Speed-dependent Voigt profile for water vapor in infrared remote sensing applications //J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2007. V.105. P.525–532.

5. *Ponomarev Yu.N., Solodov A.A., Solodov A.M., Petrova T.M., Naumenko O.V.* FTIR spectrometer with 30 m optical cell and its applications to the sensitive measurements of selective and nonselective absorption spectra // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V.177. P. 253–260.

6. *Круглова Т.В., Щербаков А.П.* Автоматический поиск линий в молекулярных спектрах на основе методов непараметрической статистики. Регуляризация в оценке параметров спектральных линий // Оптика и спектроскопия. - 2011. - Т. 111, N 3. - С. 383-386

7. Петрова Т.М., Солодов А.М., Щербаков А.П., Дейчули В.М., Солодов А.А., Пономарев Ю.Н., Чеснокова Т.Ю. Параметры уширения линий поглощения молекулы воды давлением аргона, полученные с помощью различных моделей формы контура. // Оптика атмосферы и океана. 2016. Т. 29. № 10. С. 821–827.