

КОНФЕРЕНЦИЯ А

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
И АТМОСФЕРНЫЕ РАДИАЦИОННЫЕ
ПРОЦЕССЫ**

КОЭФФИЦИЕНТЫ УШИРЕНИЯ И СДВИГА ЛИНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2$ В ИРФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

Петрова Т.М.¹, Солодов А.М.¹, Дейчули В.М.^{1,2}, Солодов А.А.¹, Стариков В.И.³

¹ ИАО СО РАН, ² ТГУ, ³ ТУСУР, ЮТИ ТПУ

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

В настоящее время экспериментальные исследования коэффициентов уширения и сдвига линий поглощения молекулы воды давлением водорода проведены всего в некоторых спектральных областях [1–7]. Наиболее полно исследованы линии чисто вращательной и колебательных полос ν_2 , ν_1 и ν_3 [2]. Авторами доклада в работе [7] были исследованы коэффициенты уширения и сдвига 97 линий поглощения, принадлежащие полосе $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$, причем вращательные квантовые числа нижнего состояния менялись в пределах $J \leq 12$, $K_a \leq 5$.

В данной работе мы продолжаем исследования коэффициентов уширения и сдвига линий поглощения молекулы воды давлением водорода в инфракрасной области спектра. Для этого были определены коэффициенты для 149 линий of 10 колебательных полос $2\nu_1$, $2\nu_3$, $\nu_1 + \nu_3$, $2\nu_2 + \nu_3$, $\nu_1 + 2\nu_2$, $\nu_2 + 2\nu_3$, $2\nu_1 + \nu_2$, $3\nu_2 + \nu_3$, $\nu_1 + 3\nu_2$ and $6\nu_2$ H_2O . Они послужили основой для определения колебательно зависимого межмолекулярного потенциала взаимодействия [8] для рассматриваемой оптической системы.

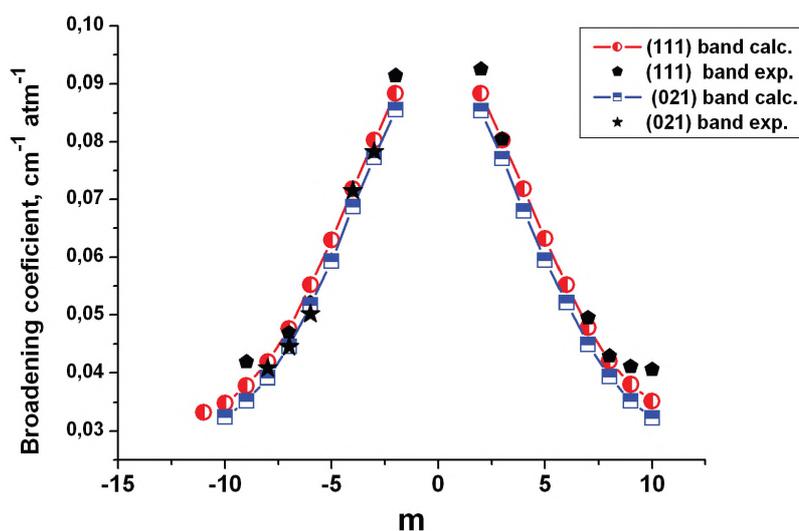


Рисунок. Зависимости экспериментальных и рассчитанных значений коэффициентов уширения линий поглощения H_2O от вращательного квантового числа m , $m = J'' + 1$ для R-ветви и $m = -J''$ для P-ветви (J'' - вращательное квантовое число нижнего колебательного состояния) - для подвеста ($J \ 1 \ J$) \leftrightarrow ($J-1 \ 1 \ J-1$).

Расчеты коэффициентов уширения γ и сдвига δ были проведены с помощью полуклассического метода Робера-Бонами. Получены параметры эффективного потенциала взаимодействия, зависящие от колебательных квантовых чисел. Они определены из условия наилучшего описания экспериментальных данных по коэффициентам уширения и сдвига для всех исследованных колебательных полос. Колебательная зависимость определяется поправками в изотропный потенциал для системы $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2$. На рисунке в качестве примера приведено сравнение рассчитанных и экспериментальных значений коэффициентов уширения для одной из подветви H_2O .

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 17-52-16022 НЦНИЛ.

Литература

1. *J.M. Dutta, C.R. Jones, T.M. Goyette, F.C. De Lucia* The Hydrogen and Helium Pressure Broadening at Planetary Temperatures of the 183 and 380 GHz Transitions of Water Vapor // *Icarus*. 1993. V. 102. P. 232–239.
2. *L.R. Brown, C. Plymate* H_2 -broadened H_2^{16}O in four infrared bands between 55 and 4045 cm^{-1} // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 1996. V. 56. P. 263–282.
3. *D.W. Steyert, W.F. Wang, J.M. Sirota, N.M. Donahue and D.C. Reuter* Hydrogen and helium pressure broadening of water transitions in the 380–600 cm^{-1} region // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2004. V. 83. P. 183–191.
4. *A. Lucchesini, S. Gozzini and C. Gabbanini* Water vapor overtones pressure line broadening and shifting // *Eur. Phys. J.D*. 2000. V. 8. P. 223–226.
5. *S. Langlois, T.P. Birbeck and R.K. Hanson* Temperature-Dependent Collision-Broadening Parameters of H_2O Lines in the 1.4- μm Region Using Diode Laser Absorption Spectroscopy // *J. Mol. Spectrosc.* 1994. V. 167. P. 272–281.
6. *V. Zeninari, B. Parvitte, D. Courtois, N.N. Lavrentieva, Yu.N. Ponomarev and G. Durry* Pressure broadening and shift coefficients of H_2O due to perturbation by N_2 , O_2 , H_2 and He in the 1.39 μm region: experiment and calculations // *Mol. Phys.* 2004. V. 102. P. 1697–1702.
7. *T.M. Petrova, A.M. Solodov, A.A. Solodov, V.M. Deichuli, V.I. Starikov* Measurements and calculations of H_2 -broadening and shift parameters of water vapour transitions of the $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ band // *Mol. Phys.* 2018 DOI: 10.1080/00268976.2018.1432905.
8. *V.I. Starikov* Vibration–rotation interaction potential for $\text{H}_2\text{O}-\text{A}$ system // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2015. V. 155. P. 49–56.