

Главная » Оптика атмосферы и океана » 2019 (25) » Труды

XXV Международный Симпозиум “Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы”

30 июня - 5 июля 2019 года, Новосибирск



NOVOSIBIRSK 2019

ATMOSPHERIC and OCEAN OPTICS. ATMOSPHERIC PHYSICS

Труды

Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы: Материалы XXV Международного симпозиума.

Электронный ресурс

Томск: Издательство ИОА СО РАН.

ISBN 978-5-94458-176-1

© ИОА СО РАН им. В.Е. Зуева, 2019

Содержание

1. [Пленарные доклады](#)
2. [Конференция А. Молекулярная спектроскопия и атмосферные радиационные процессы](#)
3. [Конференция В. Распространение излучения в атмосфере и океане](#)
4. [Конференция С. Исследование атмосферы и океана оптическими методами](#)
5. [Конференция D. Физика тропосферы](#)
6. [Конференция Е. Физика средней и верхней атмосферы](#)

2002 (9)

2001 (8)

2000 (7)

1999 (6)

МОЛЕКУЛЯРНАЯ
СПЕКТРОСКОПИЯ ВЫСОКОГО
РАЗРЕШЕНИЯ

ИМПУЛЬСНЫЕ ЛАЗЕРЫ НА
ПЕРЕХОДАХ АТОМОВ И
МОЛЕКУЛ

РАБОЧАЯ ГРУППА "АЭРОЗОЛИ
СИБИРИ"

РАСПРОСТРАНЕНИЕ
РАДИОВОЛН

КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ
"МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ,
ТЕХНОЛОГИИ И ЭКОЛОГИЯ"

XXV МЕЖДУНАРОДНАЯ

ПАРАМЕТРЫ ЛИНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ ВОДЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ С ПОМОЩЬЮ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ФОРМЫ КОНТУРА

Дейчули В.М.^{1,2}, Петрова Т.М.¹, Солодов А.М.¹, Солодов А.А.¹, Щербаков А.П., Пономарев
Ю.Н.¹

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

²ТГУ, пр. Ленина, 36, 634050, г. Томск, Россия

e-mail: dvm91@yandex.ru, tanja@iao.ru, solodov@iao.ru, asolodov@iao.ru, molnija2@inbox.ru,
yurpon@iao.ru

Ключевые слова: молекула воды, параметры линий, Фурье-спектроскопия, форма контура

В области $6700 - 7600 \text{ см}^{-1}$ проведены измерения спектра поглощения молекулы воды при вариации давления аргона. Спектр был зарегистрирован на Фурье-спектрометре IFS 125 HR с высоким отношением сигнала к шуму при комнатной температуре со спектральным разрешением 0.01 см^{-1} и в диапазоне изменения давления аргона от 0 до 1000 мбар. С помощью различных моделей формы контура (Voigt, qSDVoigt и контур Tran) были получены параметры линий поглощения молекулы воды. Показано, что применение контура Tran дает лучшее согласие с экспериментальными данными во всем диапазоне давлений.

Современная спектроскопия позволяет проводить измерения с феноменальным спектральным разрешением (0.001 см^{-1} и лучше) и высоким отношением сигнал-шум (10^5 и выше). Во многих исследованиях показано, что широко используемый контур Фойгта описывает линии поглощения недостаточно точно. Самые большие различия появляются у крыльев и в центре спектральных линий, что приводит к ошибкам определения таких параметров как интенсивность, коэффициент уширения. Таким образом, необходимо использовать такие модели профиля линии, которые учитывают более тонкие эффекты, например, эффект сужения Дике и эффект ветра.

Для анализа различных контуров с высоким отношением сигнал/шум были измерены спектры поглощения молекулы воды, уширенные давлением аргона, в спектральном диапазоне $6500 - 7500 \text{ см}^{-1}$ при помощи Фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR [1].

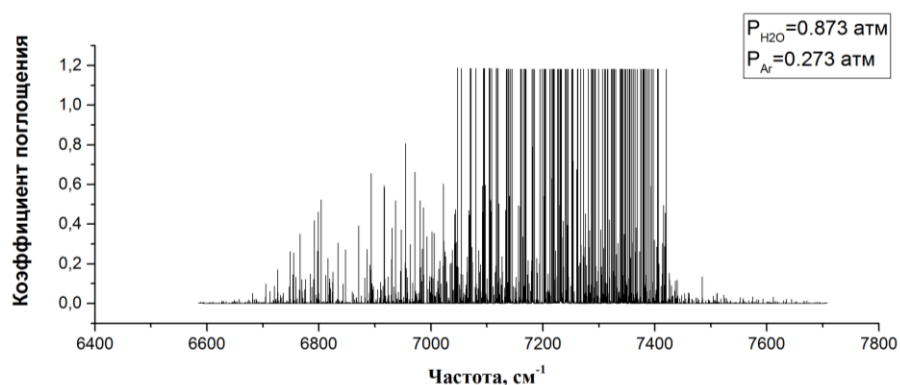


Рисунок 1 — спектр поглощения смеси вода – аргон в области 6500 – 7600 см^{-1}

Фурье-спектрометр оснащён вольфрамовым источником света и InSb детектором, охлаждаемым жидким азотом. Оптическая длина составляла 1000 см. Были зарегистрированы четыре спектра поглощения смеси вода – аргон. Давление аргона определялось с помощью датчика MKS Baratron, имеющего паспортную погрешность 0.25%, и давления исследуемых смесей – при помощи датчика давления DVR5 с точностью измерения 0.5%. Записи спектров поглощения были выполнены при комнатной температуре (296 K) со спектральным разрешением 0.007 - 0.01 см^{-1} и оптической длине луча в кювете 10 м. Экспериментальные условия для зарегистрированных спектров приведены в Таблице 1.

Таблица 1. Экспериментальные условия

Номер спектра	Спектральное разрешение, см^{-1}	Давление H_2O , атм	Давление аргона, атм	Температура $^{\circ}\text{C}$
1	0.01	0.00873	0.2730	26.1
2	0.01	0.00866	0.5030	26.3
3	0.01	0.00861	0.6800	26.0
4	0.007	0.00851	0.9000	26.3

Проведено сравнение параметров спектральных линий, полученных при помощи трёх контуров: профиль Фойгта (V), квадратичный профиль Фойгта, учитывающий зависимость уширения от скоростей сталкивающихся молекул (quadratic speed dependent voigt – qSDV); профиль TRAN. Первый контур учитывает уширение спектральных линий за счёт эффект Доплера и столкновения молекул, но не учитывает эффект ветра (зависимость столкновительной релаксации молекулы от скорости ее движения) и эффект Дике (эффект связан с упругими соударениями, при которых молекула, взаимодействующая с излучением, не

меняет своего внутреннего состояния и фазу осцилляций), в отличие от контуров Tran [2], который учитывает все перечисленные эффекты и qSDV [3], который учитывает эффект ветра.

Для определения параметров спектральной линии задействовалась программа [4], позволяющая получать параметры линий (положение центра линий, интенсивности, коэффициенты уширения, сдвига, сужения и асимметрии.) при помощи их одновременной подгонки к нескольким спектрам, зарегистрированным при разных условиях. В таблице 2 показаны параметры одной из исследуемых линий поглощения молекулы воды с центром $6787.8336 \text{ см}^{-1}$, полученные с помощью V, qSDV и Tran – контуров (интенсивность – I, коэффициенты уширения – γ , коэффициенты сдвига – δ , коэффициенты сужения из-за эффекта Дикке – ν_{vc} и коэффициенты сужения из-за эффекта ветра – β^0).

Таблица 2. Параметры линии поглощения молекулы воды с центром $6787.83364 \text{ см}^{-1}$, полученные с помощью различных моделей формы контура ($[3 \ 2 \ 1] \leftarrow [4 \ 2 \ 2]$ полоса $2\nu_1+\nu_2$)

Контур	$\gamma, \text{ см}^{-1}\text{атм}^{-1}$	$\delta, \text{ см}^{-1}\text{атм}^{-1}$	$\beta^0, \text{ см}^{-1}\text{атм}^{-1}$	$\nu_{vc}, \text{ см}^{-1}\text{атм}^{-1}$	I, см/мол	I, см/мол HITRAN
Tran	0,0336(1)	-0,0154(1)	0,0028	0,0145	1,65E-22(2)	1.687e-22
qSDV	0,0340(2)	-0,0154(1)	0,0062		1,66E-22(2)	
V	0,0332(2)	-0,0154(2)			1,63E-22(4)	

На рисунке 2 для этой же спектральной линии показано сравнение экспериментальных и рассчитанных V, qSDV и Tran профилей. На правой части рисунка изображена разность эксперимент – расчёт для четырёх значения давлений аргона – 0.273, 0.503, 0.680 и 0.900 атм. Из рисунка видно, что рассчитанный и экспериментальный спектры хорошо совпадают при использовании контура Tran. При увеличении давления буферного газа разность эксперимент – расчёт уменьшается во всех случаях. Аналогичные данные получены для других линий поглощения молекулы воды.

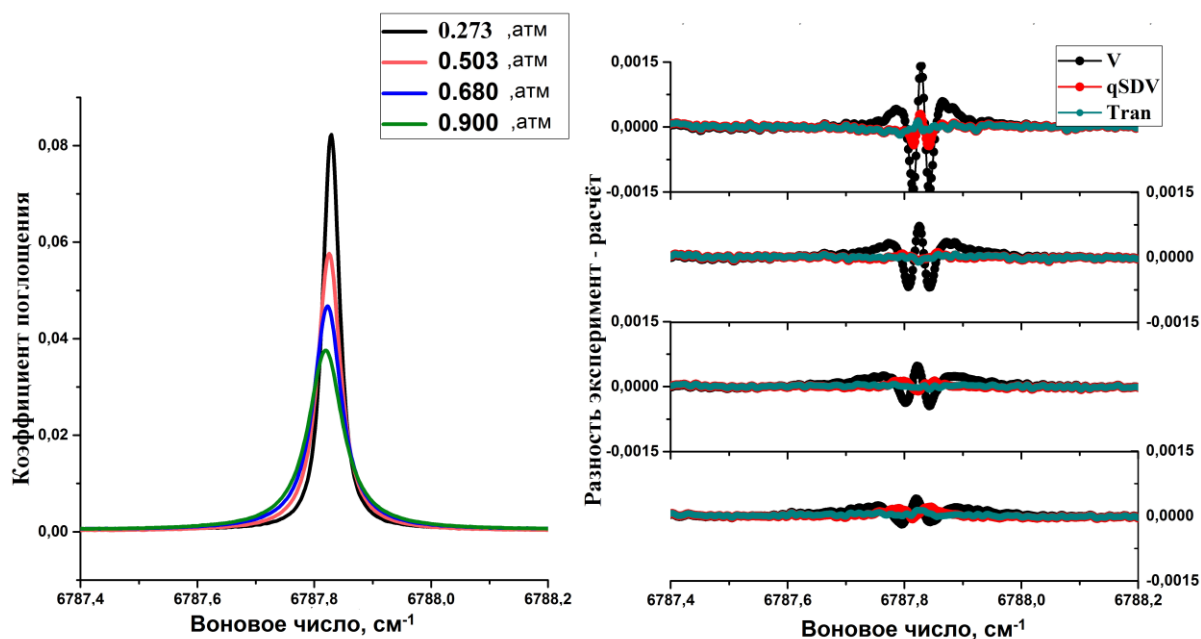


Рисунок 2 — аппроксимация линии поглощения молекулы воды контурами Tran, qSDV и V

Таким образом, для данного типа молекул и диапазона давлений наилучшее согласие между экспериментальными и рассчитанными значениями даёт контур Tran. Необходимо подчеркнуть, что корректное использование данного контура возможно для спектров с высоким отношением сигнал-шум, при этом необходимо учитывать все близкорасположенные линии меньшей интенсивности.

Исследование проведено в рамках проекта РФФИ (грант № 18-38-00472 мол_а)

1. Petrova T.M., Solodov A.M., Shcherbakov A.P, Deichuli V.M., Solodov A.A., Ponomarev Yu.N. and Chesnokova T. Yu. Parameters of Broadening of Water Molecule Absorption Lines by Argon Derived Using Different Line Profile Models // Atmos. Oceanic. Opt. 2017. V. 30. P. 123–128.
2. Tennyson J., Bernath P. F., Campargue A. Recommended isolated-line profile for representing high-resolution spectroscopic transitions (IUPAC Technical Report) // Pure Appl. Chem. 2014. V 86. № 12. P. 1931–1943.
3. Boone C., Walker K., Bernath P., Attila G. Császár A.G., Daumont L., Gamache R. R., Hodges J. T., Lisak D., Naumenko O. V., Rothman L. S. Tran H., Zobov N. F., Buldyreva J., Boone C. D., De Vizia M. D., Gianfrani L., Hartmann J.-M., McPheat R. Weidmann D., Murray J., Ngo N. H., Polyansky O. L Speed-dependent Voigt profile for water vapor in infrared remote sensing applications // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2007. V.105. P. 525–532
4. Shcherbakov A. P. Application of pattern recognition theory to identification of the rovibrational spectral lines // Atmos. Ocean. Opt. 1997. V. 10. № 8. P. 591–597.