

В.В. Зуев, А.И. Петрова

**К ВОПРОСУ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СРЕДНЕГО ПРИЦЕЛЬНОГО РАССТОЯНИЯ В УАТКФ-МОДЕЛИ**

В сообщении представлена методика получения среднего прицельного расстояния  $b_{cp}(i, f)$  в УАТКФ-модели. Показано, что такой способ определения  $b_{cp}(i, f)$  не приводит к ощутимому снижению точности расчета параметров полуширин и сдвигов линий молекул.

При создании уточненной модели Андерсона–Тсао–Курнутта–Фроста (УАТКФ) [1] для поглощения с частотой ( $\omega_{fi} = E_f - E_i$ ) было введено среднее прицельное расстояние  $b_{cp}(i, f)$ . Рассмотрим вопрос получения этого параметра. Параметр  $b_{cp}(i, f)$  появляется при интегрировании действительной и мнимой частей дифференциального сечения столкновений ( $S_2, \tilde{S}_2$ ) по прицельному расстоянию в задаче об уширении и сдвиге центра линии. Чтобы результаты интегрирования функций  $S_2$  и  $\tilde{S}_2$  по прицельному расстоянию независимо от подхода (метод Андерсона–Тсао–Курнутта–Фроста [2, 3] или метод Сривастава [1, 4]) не изменялись, необходимо выполнение равенства

$$S_{2t}(b(i, f), v(i, f), F_{nt}(b(i, f))) = \frac{2S_{2t}(b(i, f), v(i, f) f_{nt}(b_{cp}(i, f)))}{h_t - 2}, \quad (1)$$

которое переходит в (2)

$$\begin{aligned} f_{nt}(b_{cp}(i, f)) &= \frac{(h_t - 2)}{2} F_{nt}(b(i, f)), \\ \tilde{f}_{nt}(b_{cp}(i, f)) &= \frac{(h_t - 2)}{2} \tilde{F}_{nt}(b(i, f)), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $v(i, f)$  – средняя относительная скорость движения взаимодействующих молекул, соответствующая энергетическим состояниям  $i$  и  $f$  поглощающей излучение молекулы;  $f_n$  – функция неадиабатичности, полученная до интегрирования по прицельному расстоянию дифференциального сечения столкновений;  $F_n$  – функция неадиабатичности после интегрирования  $S_2, \tilde{S}_2$  по прицельному расстоянию;  $h_t$  – степень при прицельном расстоянии в функциях

$$S_2 = \sum_t S_{2t} = \sum_t \lambda_t / b^{h_t} \quad \text{и} \quad \tilde{S}_2 = \sum_t \tilde{S}_{2t} = \sum_t \tilde{\lambda}_t / b^{h_t}$$

с величиной  $1/b^{h_t}$ , определяющей явную часть от прицельного расстояния.

Если согласно определению параметров  $k = \frac{b(i, f)}{v(i, f)} \Delta\omega$  и введения  $k' = k + 0,7$ , приращение  $\Delta b$  в

$$(3) \text{ взять равным } \frac{0,7 \cdot v(i, f)}{\Delta\omega},$$

$$b_{cp}(i, f) = b(i, f) + \Delta b, \quad (3)$$

то соотношения (1,2) выполняются с хорошей точностью  $\sim 1-5\%$  для каждого ( $t$ ) типа взаимодействия (см. рис. 1, 2).

Тогда в УАТКФ-подходе с незначительной погрешностью  $\sim 1\%$  происходит переход от параметра полуширины  $\gamma(b(i, f), F_{nt}(b(i, f)))$  к  $\gamma\left(b(i, f), \frac{2f_{nt}(b_{cp}(i, f))}{h_t - 2}\right)$  (см.рис. 1). Такой же переход при расчете сдвига центра линии от  $\delta(b(i, f), F_{nt}(b(i, f)))$  к  $\delta\left(b(i, f), \frac{2\tilde{f}_{nt}(b_{cp}(i, f))}{h_t - 2}\right)$  несколько увеличивает

погрешность расчета ( $\sim 2-5\%$ ). Но расчет сдвига через средний  $b_{cp}(i, f)$  позволяет оценить вклады третьего и четвертого порядков по взаимодействию в сдвиг центра линии, которые могут значительно превосходить (на несколько десятков процентов) указанную ошибку расчета параметра  $\delta$ .

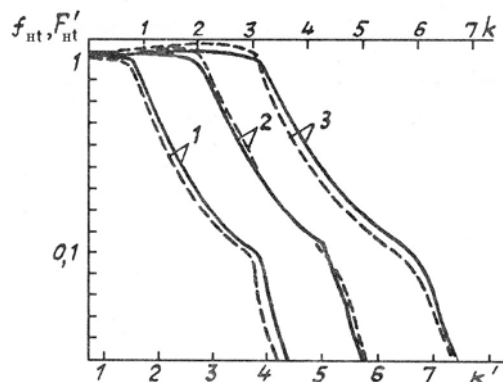


Рис. 1. Функции неадиабатичности  $f_i$  и  $F'_i$  для трех основных взаимодействий: диполь-дипольного (кривая 1,  $t = 1$ ), диполь-квадрупольного (кривая 2,  $t = 2$ ), квадруполь-квадрупольного (кривая 3,  $t = 3$ ). Сплошная кривая —  $f_{nt}(k)$ ; штриховая —  $F'_{nt}(k) = h_t - 2/2F_{nt}(k)$

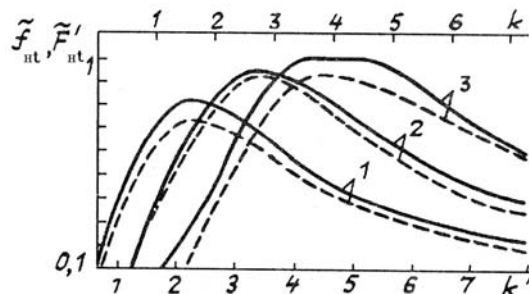


Рис. 2. Функции неадиабатичности  $\tilde{f}_i$  и  $\tilde{F}'_i$ . Обозначения аналогичны рис. 1

Таким образом, расчет релаксационных характеристик с помощью формул  $\gamma\left(b(i, f), \frac{2f_{nt}(b_{cp}(i, f))}{h_t - 2}\right)$  и  $\delta\left(b(i, f), \frac{2\tilde{f}_{nt}(b_{cp}(i, f))}{h_t - 2}\right)$  позволяет повысить информативность без ощутимого снижения точности расчета.

1. Зуев В.В., Петрова А.И. // Оптика атмосферы. 1990. № 11. С. 1123–1138.
2. Tsao C.J., Curnutte B. // JQSRT. 1962. V. 2. P. 41.
3. Frost // J. Phys. B. // Atom. Molec. Phys., 1972. V. 9. № 6. P. 1001.
4. Srivastava R.P., Zaidi H.R. // Can. J. Phys. 1977. V. 55. P. 533.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,  
Томск

Поступила в редакцию  
15 ноября 1990 г.

V.V. Zuev, A.I. Petrova. **On the Obtaining of the Middle Impact Parameter in IATCF Model.**

The paper presents a method of the middle impact parameter  $b_m(i, t)$  obtaining in IATCF model. The method is shown to remain a proper accuracy of calculation of molecules halfwidths and lineshifts parameters.