

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 539.534.539.194

Уширение линий окиси углерода в объеме нанопор аэрогеля

В.И. Стариков^{1,2}, А.А. Солодов^{3*}

¹Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
634050, г. Томск, пр. Ленина, 40

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, 30

³Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Поступила в редакцию 19.09.2016 г.

Проведено вычисление уширения и сдвига центров линий поглощения молекулы СО в условиях ограниченного объема. Рассмотрена модель, в которой уширение и сдвиг центров линий молекулы обеспечены столкновениями свободных молекул СО как со стенками ячейки, так и с адсорбированными на стенках ячейки возмущающими молекулами, которые могут сохранять или не сохранять вращательные степени свободы.

Ключевые слова: окись углерода, уширение и сдвиг спектральных линий, аэрогель, нанопоры; СО, half-width and shift of spectral lines, aerogel, nanopores.

Введение

Исследование свойств газов, находящихся в нанопорах различных наноструктурных материалов, таких как силикагели, углеродные трубки, биологические объекты и т.д., привлекает к себе в последние годы повышенное внимание и имеет важное теоретическое и прикладное значение. Взаимодействие молекул с поверхностью нанопор приводит к тому, что часть молекул адсорбируется на их внутренней поверхности, а часть находится в газовой фазе. Экспериментальному и теоретическому изучению свойств молекул, адсорбированных на поверхности твердых тел, посвящено большое количество работ (см., например, [1–10] и ссылки в них). В работах [11–20] исследовано поведение молекул, таких как Н₂О, О₂, NH₃, СО₂, в условиях ограничения длины их свободного пробега. Уширение линий фундаментальной колебательной полосы СО, находящегося в нанопорах ксерогеля, изучалось в [15]. Было установлено, что при малых давлениях газа полуширины линий почти не зависят от вращательных квантовых чисел.

Наша работа посвящена анализу экспериментальных данных [21] по уширению линий поглощения колебательной полосы 2–0 окиси углерода (диапазон 4100–4400 см⁻¹), находящейся в нанопорах аэрогеля диоксида кремния, средний размер которых составляет 20 нм. При давлении 50,3 мбар и температуре 296 К измеренные полуширины Γ линий с вращательными квантовыми числами $0 \leq J \leq 20$ изменяются от 0,204 до 0,173 см⁻¹. При таких усло-

виях полуширина линий свободных молекул СО меняется от 0,0045 до 0,003 см⁻¹ (см., например, [22]). Центры линий поглощения молекул СО, находящихся в нанопорах, сдвинуты относительно центров линий свободных молекул СО на 0,005 см⁻¹. В работе [21], так же как и в [15], предполагалось, что любое столкновение со стенками нанопор переводит молекулу на другой энергетический уровень. Вращательная зависимость полуширин была объяснена прерыванием процесса поглощения излучения молекулой СО на разных расстояниях от поверхности в зависимости от энергии вращения молекулы. В настоящей работе для анализа экспериментальных данных из [21] используется другая модель, которая предполагает наличие рассеивающих центров на поверхности нанопор.

1. Модель взаимодействия молекул в нанопоре

В качестве рассеивающих центров выбраны адсорбированные на поверхности поры молекулы окиси углерода, которые обозначены как СО'. Адсорбированные молекулы СО' могут отличаться от свободных молекул СО не только в связи с изменением электрооптических параметров (дипольный и квадрупольный моменты, средняя поляризуемость), но и с тем, что адсорбированные молекулы могут терять вращательные степени свободы. Общая полуширина линии Γ (см., например, [12, 14]) определялась в виде суммы двух вкладов:

$$\Gamma = \Gamma_{Wall} + \Gamma_{if}. \quad (1)$$

* Виталий Иванович Стариков (vstarikov@yandex.ru);
Александр Александрович Солодов (asolodov@iao.ru).

Первый вклад, Γ_{Wall} , обусловлен столкновениями молекул газа со стенками нанопор, вызывающими прерывание процесса поглощения излучения. Он постоянный для всех линий, не зависит от давления газа внутри поры и химического состава нанопористого материала и определяется размерами поры и средней скоростью движения молекулы. Второй вклад, Γ_{if} , определяет вращательную зависимость полуширин линий в переходе $i \rightarrow f$, в котором i и f – начальное и конечное колебательно-вращательные состояния молекулы. Расчеты отдельных вкладов из (1) проведены при тех же предположениях, что и в [19, 20] для водяного пара, находящегося в таких же нанопорах, а именно:

а) хорошо различимый колебательно-вращательный спектр газовой фазы молекулы CO, газ разреженный;

б) нанопоры имеют сферическую форму, их диаметр определяет значение Γ_{Wall} в (1);

в) уширяющими молекулами являются молекулы CO', адсорбированные на поверхности поры с плотностью n' ; эти молекулы могут иметь или не иметь вращательные степени свободы, но взаимодействуют со свободными молекулами посредством обычных электростатических и поляризационных взаимодействий. Их эффект характеризуется вкладом Γ_{if} в полуширину линий из (1) и сдвигом линий Δ_{if} ;

г) другие силы взаимодействия активной молекулы с поверхностью пор отсутствуют.

Потенциал взаимодействия в системе «CO–CO'» был взят в виде суммы слагаемых

$$V = V_{\mu'-\mu} + V_{\mu'-q} + V_{q'-\mu} + V_{q'-q} + V_{\alpha-\alpha'}, \quad (2)$$

описывающих диполь-дипольное ($V_{\mu'-\mu}$), диполь-квадрупольное ($V_{\mu'-q}$), квадруполь-дипольное ($V_{q'-\mu}$), квадруполь-квадрупольное ($V_{q'-q}$) и поляризационное взаимодействия ($V_{\alpha-\alpha'}$). Штрих у дипольного (μ) и квадрупольного (q) моментов, а также у средней поляризуемости (α) молекулы CO означает, что эти величины могут иметь значения, отличные от соответствующих значений $\mu = 0,1D$, $q = -2,5D \text{ \AA}$, $\alpha = 1,95 \text{ \AA}^3$ свободных молекул CO [23]. Явный вид отдельных слагаемых из потенциала (2) можно найти в [24].

Расчет полуширины Γ_{if} и сдвига Δ_{if} линий был проведен с использованием коэффициентов уширения γ_{if} и сдвига δ_{if} , которые рассчитывались в полуклассическом методе [25, 26] по формуле

$$\gamma_{if} + i\delta_{if} = (n/c)v_m \sigma^2 \sum_{J_2} \rho_{J_2} \int_0^\infty y dy \left[1 - (1 - S_2^{middle'}) \times \right. \\ \left. \times \exp(-iS_1 - S_{2,i}^{outer} - S_{2,f}^{outer*} - S_2^{middle'}) \right], \quad (3)$$

где $n = 2,448 \cdot 10^{19}$ (мол. · см⁻³ · атм⁻¹) – концентрация уширяющих свободных молекул CO' (число молекул, находящихся в 1 см³ при давлении 1 атм при температуре $T = 296 \text{ K}$); c – скорость света; v_m – наиболее вероятная скорость сталкивающихся

молекул; $S_1(b)$ и $S_2(b)$ – известные [26] функции прерывания первого и второго порядка, зависящие от параметров межмолекулярного потенциала (2) и прицельного расстояния $b = \sigma \cdot y$; ρ_{J_2} – статвесы уровня J_2 возмущающей молекулы CO'; y – безразмерная переменная интегрирования. Параметр $\sigma = 3,76 \text{ \AA}$ наряду с параметром $\epsilon/k_B = 100 \text{ K}$ (k_B – постоянная Больцмана) определяет изотропный потенциал взаимодействия молекул CO (эти параметры взяты из [27]). В вариантах расчета с невращающимися молекулами CO' вращательная постоянная для CO' приравнивалась к нулю.

Для функции прерывания первого порядка

$$S_1(b) = S_{10}/b^5 \quad (4)$$

известна связь коэффициента S_{10} с молекулярными постоянными:

$$S_{10} = \frac{3\pi}{8\hbar v_m} [\mu_i^2 - \mu_f^2 + 1,5u(\alpha_i - \alpha_f)] \alpha', \quad (5)$$

где $\mu_i, \mu_f, \alpha_i, \alpha_f$ – дипольный момент и поляризуемость для начального ($v = 0$) и конечного ($v = 2$) колебательных состояний поглощающей молекулы CO; α' – поляризуемость уширяющей молекулы CO'; $u = u_1 \cdot u_2 / (u_1 + u_2)$, u_1, u_2 – энергии диссоциации CO и CO' (в расчетах использовалось $u_2 = u_1$). Вводя коэффициенты уширения γ_{if} и сдвига δ_{if} , для полуширин Γ и сдвига Δ_{if} линий, согласно (1) и (3), можно записать два соотношения:

$$\Gamma = \Gamma_{Wall} + P' \gamma_{if} = \Gamma_{Wall} + (n'/n) \gamma_{if}; \quad (6)$$

$$\Delta_{if} = P' \delta_{if} = (n'/n) \delta_{if}. \quad (7)$$

Отметим, что использование P' и соотношения (n'/n) является формальным при адаптации формул полуширины и сдвига линий свободного газа для линий газа в нанопорах. Значение n' невозможно определить из законов идеального газа – это подгоняемая величина.

Задача состояла в том, чтобы найти n' , Γ_{Wall} , а также неизвестные электрооптические параметры μ' , q' и α' для молекулы CO', наилучшим образом описывающие экспериментальные данные для Γ и Δ из [21], т.е. найти их из условия минимума величины $rms(\Gamma, \Delta) = rms(\Gamma) + rms(\Delta)$, где

$$rms(\Gamma) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Gamma_i(exp) - \Gamma_i(cal))^2}, \quad (8)$$

$rms(\Delta)$ определяется той же формулой (8), в которой символ Γ нужно заменить на символ Δ . В качестве экспериментальных значений для сдвигов центров линий $\Delta_i(exp)$ было взято значение $-0,005 \text{ см}^{-1}$, на которое сдвинуты центры всех линий молекулы CO в нанопорах по сравнению со свободными молекулами CO. Для Γ использовались данные для $N = 20$ линий поглощения из R-ветви. Такой подбор параметров должен быть проведен как для вращающихся, так и невращающихся уширяющих молекул CO'.

2. Результаты вычислений

Количество неизвестных величин слишком велико, чтобы их можно было определить из двух уравнений (6), (7), поэтому часть из них должна быть фиксирована к конкретным значениям. Основной вклад в сдвиг линий определяется функцией прерывания $S_f(b)$ (4), которая зависит от значения коэффициента S_{10} (5). Этот коэффициент зависит только от поляризуемости α' адсорбированной молекулы CO' и не зависит от ее дипольного и квадрупольного моментов. Поэтому μ' и q' были фиксированы к значениям $\mu' = -0,1D$, $q' = -2,5D \text{ \AA}$, которые имеет активная молекула CO [23]. Далее три неизвестные величины Γ_{Wall} , P' и α' определялись следующим образом. Для серии значений $\alpha' = 2,0; 4,0; \dots$ (в \AA^3) вычислялись коэффициенты уширения γ_{if} и сдвига δ_{if} по формуле (3). По формулам (6) и (7) для каждого α' подбирались Γ_{Wall} и P' , которые обеспечивают минимум $rms(\Gamma, \Delta) = rms(\Gamma) + rms(\Delta)$.

Чтобы вычислить коэффициенты сдвига δ_{if} по формуле (3), нужно для каждого α' найти величину S_{10} (5), а для этого необходимо знать значения дипольного момента и поляризуемости молекулы CO в различных колебательных состояниях. В расчетах использовались значения $\mu_i = -0,11D$, $\mu_f = -0,08D$, $\alpha_f - \alpha_i = 0,2 \text{ \AA}^3$, полученные в результате расчета матричных элементов от функции дипольного момента и поляризуемости [28, 29] в базе функций осциллятора Морзе с барьером к диссоциации $D = 88831,0 \text{ см}^{-1}$ и безразмерным параметром $\alpha = 2,61927$ (расчет аналогичен [30]).

Вращающиеся молекулы CO' . Минимальное значение $rms(\Gamma) = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ и $rms(\Delta) = 2,2 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ достигнуто для $\alpha' = 16,0 \text{ \AA}^3$, $\Gamma_{Wall} = 0,145 \text{ см}^{-1}$ и коэффициента $P' = 0,5 \text{ атм}$. Такому коэффициенту соответствует концентрация уширяющих молекул $n' = 0,0128 \text{ мол./нм}^3$.

На рис. 1 приведены экспериментальные (линия 1) и вычисленные (линия 2) значения полуширин линий Γ , а на рис. 2 показано поведение вычисленных сдвигов линий Δ (линия 1). Среднее значение $\Delta = -0,007 \text{ см}^{-1}$.

Полученное значение Γ_{Wall} соответствует, согласно формуле [31]:

$$\Gamma_{Wall} = \frac{v_{cp}}{2\rho} \frac{A}{4V},$$

среднему диаметру шаровидной поры $d \approx 25 \text{ нм}$ (A и V – площадь и объем сферы, v_{cp} – средняя скорость сталкивающихся молекул). Такую же оценку для d дают расчеты из [18].

Невращающиеся молекулы CO' . Вращательная постоянная для молекулы CO' фиксировалась к нулю. Вычисления проведены так же, как и в предыдущем случае. Наилучшее описание экспериментальных данных достигнуто для $\alpha' = 10,0 \text{ \AA}^3$, $\Gamma_{Wall} = 0,135 \text{ см}^{-1}$ и $P' = 0,6 \text{ атм}$, которому соответствует концентрация $n' = 0,015 \text{ мол./нм}^3$. Для этих вход-

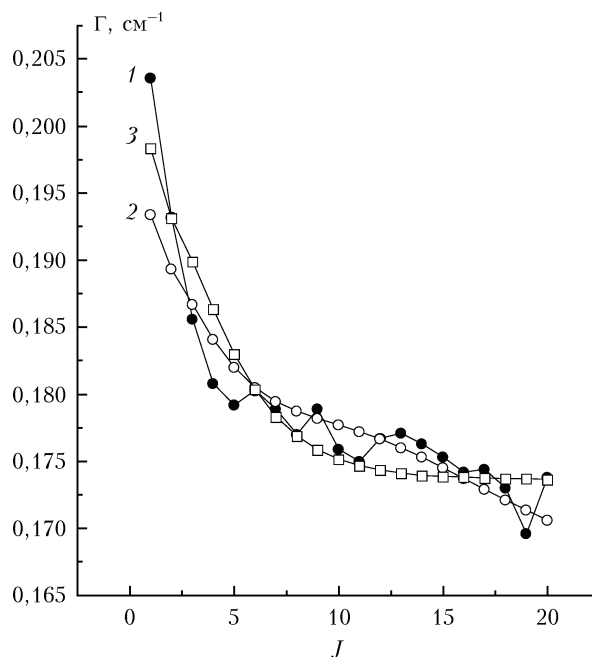


Рис. 1. Сравнение экспериментальных [21] (линия 1) и вычисленных (2, 3) полуширин линий полосы 2–0 молекул CO , ограниченных объемом нанопор аэрогеля, для вращающихся и невращающихся молекул CO'

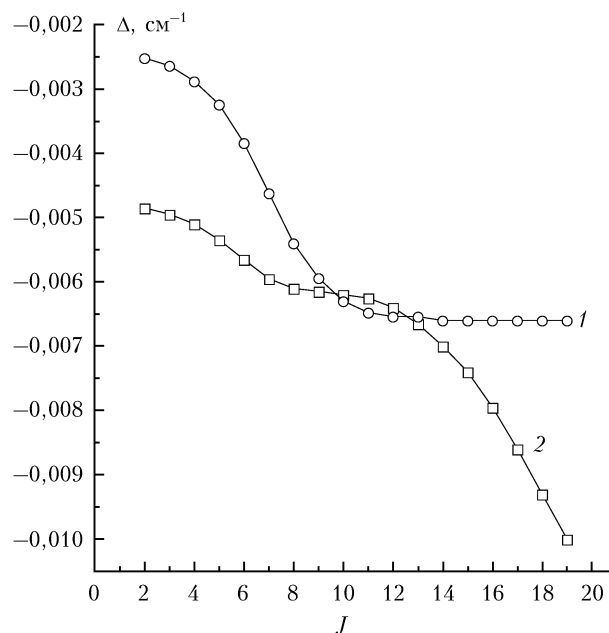


Рис. 2. Поведение вычисленных сдвигов линий полосы 2–0 молекул CO , ограниченных объемом нанопор аэрогеля, для вращающихся (1) и невращающихся (2) молекул CO'

ных параметров $rms(\Gamma) = 2,6 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ и $rms(\Delta) = 1,5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$. Среднее значение вычисленных сдвигов линий равно $-0,006 \text{ см}^{-1}$.

На рис. 1 и 2 вычисленные значения полуширин Γ и сдвигов Δ линий представлены линиями 3 и 2 соответственно. Для полученного Γ_{Wall} среднее значение диаметра поры $d \approx 28 \text{ нм}$.

3. Обсуждение

Сравнение значений рассчитанных и полученных из эксперимента [21] полуширин оксида углерода, находящегося в нанопорах, показывает возможность предложенной в разделе 1 модели адекватно описывать экспериментальные данные. Зависимость Γ от J в рассматриваемой модели предполагает наличие неупругих столкновений свободных молекул CO с рассеивающими центрами. Формально, в рамках адаптации полуклассического метода для расчетов параметров линий газов в нанопорах, все рассеивающие центры были приписаны адсорбированным на поверхности поры молекулам оксида углерода (с измененной по сравнению со свободной молекулой поляризуемостью α'). В действительности идентификация таких центров неоднозначна. Это могут быть как адсорбированные молекулы окиси углерода, так и поверхностные гидроксильные группы. Большое количество неизвестных величин, например концентрация и электрооптические параметры адсорбированных молекул, не дают возможности оценить вклад каждого из видов рассеивающих центров в уширение и сдвиг линий CO. Фактически в результате расчета были подобраны эффективные параметры, описывающие все рассеивающие центры.

Зависящий от вращательного квантового числа J вклад Γ_{if} определяется как потенциал взаимодействия в системе «CO–CO'», так и количеством адсорбированных молекул n' . Расчеты коэффициентов уширения и сдвига по формуле (3) показывают, что основным вкладом в потенциал (2) является вклад $V_{q'-q}$, связанный с квадруполь-квадрупольным взаимодействием, т.е. вклад Γ_{if} слабо зависит от поляризуемости α' . Сдвиг линий Δ_{if} зависит и от n' , и от поляризуемости α' .

Наилучшее совпадение с экспериментальными данными из [21] достигнуто для $\alpha' = 16,0$ и $10,0 \text{ \AA}^3$ для случая вращающихся и невращающихся уширяющих молекул соответственно. Именно повышенной поляризуемостью α' можно объяснить большие значения рассчитанных сдвигов линий поглощения молекулы CO в нанопорах (для свободных молекул CO $\alpha = 1,95 \text{ \AA}^3$ [23]).

Сравнивая $rms(\Gamma, \Delta) = 5,1 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ и $rms(\Gamma, \Delta) = 4,1 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$, полученные для случая вращающихся и невращающихся адсорбированных молекул CO', трудно отдать предпочтение одному из двух вариантов расчета. Оба варианта практически с одинаковой точностью описывают экспериментальные данные по полуширинам линий. Однако в целом вращательные зависимости, полученные для столкновений с вращающимися и невращающимися уширяющими молекулами, отличаются по характеру. Как видно из рис. 1, в случае уширения невращающимися молекулами CO' при малых значениях J происходит быстрый спад полуширин Γ и уже при $J > 13$ наблюдается независимость Γ от J , при этом для всех $J > 13$ вклад $\Gamma_{if} = 0,064 \text{ см}^{-1}$. В случае столкновений CO с вращающимися молекулами происходит постепенное снижение значений полуширин Γ .

Расчет вклада Γ_{if} до $J = 40$ показывает, что такое постепенное снижение полуширин Γ происходит до $J \approx 35$. Для всех $J > 35$ вклад $\Gamma_{if} \approx 0,040 \text{ см}^{-1}$.

В работе [21] не была получена вращательная зависимость сдвигов центров линий CO, находящегося в нанопорах, указано только среднее значение сдвигов линий (относительно свободного газа), равное $-0,005 \text{ см}^{-1}$. Однако рис. 2 показывает, что характер вращательных зависимостей сдвигов линий, полученных для столкновений с вращающимися и невращающимися уширяющими молекулами, разный.

Заключение

В настоящей работе анализ экспериментальных данных из [21] по уширению и сдвигу спектральных линий молекул окиси углерода, находящихся в объеме нанопор аэрогеля, проведен на основе модели, предложенной ранее в [19, 20] для водяного пара. В этой модели предполагается присутствие рассеивающих центров на поверхности пор, которые участвуют в уширении и сдвиге спектральных линий свободных молекул CO. Полуширина линии Γ и ее сдвиг Δ определяются электростатическим потенциалом взаимодействия в системе «CO–CO'» с главным вкладом $V_{q'-q}$, описывающим квадруполь-квадрупольное взаимодействие, количеством возмущающих молекул, находящихся на поверхности нанопор, и их поляризуемостью α' . От поляризуемости α' сильно зависят сдвиги линий Δ . Рассчитанные в работе значения для α' нужно рассматривать как оценочные.

Вращательная зависимость Γ , полученная в рамках используемой модели, качественно и количественно согласуется с экспериментальными данными, о чем свидетельствует рис. 1. В отличие от водяного пара [19, 20], учет ограничения свободы вращения в полуклассическом методе не является критичным при расчете уширения и сдвигов линий CO в нанопорах, во всяком случае, до $J < 20$.

В нашей модели полученная в [21] вращательная зависимость Γ объясняется столкновениями с рассеивающими центрами, роль которых повышается с уменьшением размеров поры.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук МК-2861.2017.2.

1. Henderson M.A. The interaction of water with solid surfaces: Fundamental aspects revisited // Sur. Sci. Rep. 2002. V. 46, N 1–8. P. 5–308.
2. Ohba T., Kaneko K. Cluster-associated filling of water molecules in slit-shaped graphitic nanopores // Mol. Phys. 2007. V. 105, N 2–3. P. 139–145.
3. Raghunathan A.V., Aluru N.R. An empirical potential based quasicontinuum theory for structural prediction of water // J. Chem. Phys. 2009. V. 131, N 18. P. 184703-1–184703-7.
4. Mosaddeghi H., Alavi S., Kowsari M.H., Najafi B. Simulations of structural and dynamic anisotropy in nanoconfined water between parallel graphite plates // J. Chem. Phys. 2012. V. 137, N 18. P. 184703-1–184703-10.

5. *Rasaiah J.C., Garde S., Hummer G.* Water in nonpolar confinement: From nanotubes to proteins and beyond // *Annu. Rev. Phys. Chem.* 2008. V. 59, N 1. P. 713–740.
6. *Coudert F.-X., Vuilleumier R., Boutin A.* Dipole moment, hydrogen bonding and IR spectrum of confined water // *Chem. Phys. Chem.* 2006. V. 7, N 12. P. 2464–2467.
7. *Kocherbitov V.* Properties of water confined in an amphiphilic nanopore // *J. Phys. Chem. C.* 2008. V. 112, N 43. P. 16893–16897.
8. *Луммл Л.* Инфракрасные спектры адсорбированных молекул. М.: Мир, 1969. 516 с.
9. *Киселев А.В., Лыгин В.И.* Инфракрасные спектры поверхностных соединений. М.: Наука, 1972. 459 с.
10. *Уиллис Р.* Физика поверхности: колебательная спектроскопия адсорбентов / Под ред. Р. Уиллиса. М.: Мир, 1984. 247 с.
11. *Wagner P.E., Somers R.M., Jenkins J.L.* Line broadening and relaxation of three microwave transitions in ammonia by wall and inter molecular collisions // *J. Phys. B.* 1981. V. 14. P. 4763–4770.
12. *Hartmann J.M., Sironneau V., Boulet C., Svensson T., Hodges J.T., Xu C.T.* Collisional broadening and spectral shapes of absorption lines of free and nanopore-confined O₂ gas // *Phys. Rev. A.* 2013. V. 87, N 3. P. 032510-1–032510-10.
13. *Ponomarev Yu.N., Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A.* IR spectroscopy of water vapor confined in nanoporous silica aerogel // *Opt. Express.* 2010. V. 18, N 25. P. 26062–26067.
14. *Svensson T., Lewander M., Svanberg S.* Laser absorption spectroscopy of water vapor confined in nanoporous alumina: Wall collision line broadening and gas diffusion dynamics // *Opt. Express.* 2010. V. 18, N 16. P. 16460–16473.
15. *Hartmann J.-M., Boulet C., Vander Auwera J., El Hamzaoui H., Capoen B., Bouazaoui M.* Line broadening of confined CO gas: From molecule-wall to molecule-molecule collisions with pressure // *J. Chem. Phys.* 2014. V. 140. P. 064302.
16. *Hartmann J.-M., Sironneau V., Boulet C., Svensson T., Hodges J.T., Xu C.T.* Infrared absorption by molecular gases as a probe of nanoporous silica xerogel and molecule-surface collisions: Low-pressure results // *Phys. Rev. A.* 2013. V. 8, N 4. P. 042506.
17. *Svensson T., Adolfsson E., Burreli M., Savo R., Xu C.T., Wiersma D.S., Svanberg S.* Pore size assessment based on wall collision broadening of spectral lines of confined gas: Experiments on strongly scattering nanoporous ceramics with fine-tuned pore sizes // *Appl. Phys. B.* 2013. V. 110, N 2. P. 147–154.
18. *Лугина Н.Э., Стариков В.И.* Уширение колебательно-вращательных линий поглощения молекул углекислого и угарного газов вследствие соударений со стенками // *Изв. вузов. Физ.* 2012. Т. 55, № 6. С. 657–663.
19. *Солодов А.М., Петрова Т.М., Пономарев Ю.Н., Солодов А.А., Стариков В.И.* Фурье-спектроскопия водяного пара, находящегося в объеме нанопор аэрогеля. Часть 1. Измерения и моделирование // *Оптика атмосф. и океана.* 2014. Т. 27, № 5. С. 378–386; *Solodov A.M., Petrova T.M., Ponomarev Yu.N., Solodov A.A., Starikov V.I.* Fourier spectroscopy of water vapor in the volume of aerogel nanopores. Part I. Measurements and calculations // *Atmos. Ocean. Opt.* 2014. V. 27, N 5. P. 372–380.
20. *Солодов А.М., Петрова Т.М., Солодов А.А., Стариков В.И.* Фурье-спектроскопия водяного пара, находящегося в объеме нанопор аэрогеля. Часть 2. Расчет уширений линий и сдвига спектральных линий при столкновениях с адсорбированными молекулами // *Оптика атмосф. и океана.* 2015. Т. 28, № 1. С. 32–36; *Solodov A.M., Petrova T.M., Solodov A.A., Starikov V.I.* Fourier spectroscopy of water vapor in the volume of aerogel nanopores. Part II. Calculation of broadening and shift of spectral lines by adsorbed molecules // *Atmos. Ocean. Opt.* 2014. V. 28, N 3. P. 232–235.
21. *Solodov A.A., Petrova T.M., Ponomarev Yu.N., Solodov A.M.* Influence of nanoconfinement on the relaxation dependence of line half-width for 2–0 band of carbon oxide // *Chem. Phys. Lett.* 2015. V. 637. P. 18–21.
22. *Михайленко С.Н., Бабилов Ю.Л., Головки В.Ф.* Информационно-вычислительная система «Спектроскопия атмосферных газов». Структура и основные функции // *Оптика атмосф. и океана.* 2005. Т. 18, № 9. С. 765–776.
23. *Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 240 с.
24. *Tsao C.J., Curnutte B.* Line-widths of pressure-broadened spectral lines // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 1962. V. 2, N 1. P. 41–91.
25. *Robert D., Bonamy J.* Short range force effects in semiclassical molecular line broadening calculations // *J. de Phys.* 1979. V. 40, N 10. P. 923–943.
26. *Leavitt R.P.* Pressure broadening and shifting in microwave and infrared spectra of molecules of arbitrary symmetry: An irreducible tensor approach // *J. Chem. Phys.* 1980. V. 73, N 11. P. 5432–5450.
27. *Гирифельдер Дж.О., Куртис Ч.Ф., Бред Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 929 с.
28. *Kiriyama F., Rao B.S.* Electric dipole moment of ¹²C¹⁶O // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2000. V. 65, N 4. P. 673–679.
29. *Maroulis G.* Electric polarizability and hyperpolarizability of carbon monoxide // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100. P. 13466–13473.
30. *Stroinova V.N.* Half-width and line center shifts formed by transitions into highly excited vibrational states of CO molecule // *Bull. Tomsk Polytech. Univ.* 2007. V. 311. P. 88–94.
31. *Townes C.H., Schwalow A.L.* Microwave Spectroscopy. New York: McGraw-Hill, 1955. 757 с.

V.I. Starikov, A.A. Solodov. **The broadening of CO spectral lines confined in aerogel nanopores.**

The paper presents the results of calculations of the broadening and shifts of absorption lines of CO confined in nanoporous media. The collisions with walls and absorbed rotational and non-rotational CO molecules are taken into account. The comparison with the existing experimental data is discussed.