

В.В. Зуев, А.И. Петрова

### ВЛИЯНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ СКОРОСТИ ДВИЖЕНИЯ ПОГЛОЩАЮЩЕЙ ИЗЛУЧЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ НА ТОЧНОСТЬ РАСЧЕТА ПОЛУШИРИН И СДВИГОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ ПО УАТКФ МОДЕЛИ

На примере молекул  $\text{CO}_2$  и  $\text{CO}$  показано, что если изменение скорости ( $\Delta v = |v(i) - v(f)|$ ) поглощающей излучение молекулы при квантовом переходе из состояния  $i$  в состояние  $f$  находится на уровне  $0,2 \cdot 10^4$  см/с, то расчет параметров  $\gamma$  и  $\delta$  спектральных линий по УАТКФ модели через среднюю для состояний  $i, f$  скорость  $v(i, f)$  по сравнению с функциональной зависимостью  $f(v(i), v(f))$  не превышает границы экспериментальной погрешности.

Если строго следовать теоретической модели УАТКФ [1], то для расчета полуширины ( $\gamma$ ) и сдвига ( $\delta$ ) спектральной линии поглощения молекулы газа на частоте  $\omega_{if}$  необходимо учитывать скорости движения отдельно для состояний  $i$  и  $f(v(i), v(f))$ . Однако такой подход является более трудоемким, особенно при расчете сдвига  $\delta$ , поскольку для этого нужно знать не только величину  $\delta(v(i, f))$ , но и поправку  $\Delta = \delta(v(i, f)) - \delta(v(i), v(f))$  [1], рассчитанную с помощью АТКФ [1–3] подхода.

Проведенный сравнительный анализ результатов расчета параметров  $\gamma$  и  $\delta$  молекулы  $\text{CO}_2$ , полученный на основе функциональных зависимостей  $f(v(i), v(f))$  и  $f(v(i, f))$ , показал следующее:

Таблица 1

Значения  $\gamma$  ( $10^{-2}$  см $^{-1}$  · атм $^{-1}$  для R-ветви 0–2 полосы  $\text{CO}$ )

$J_i$	CO—N $_2$		CO—CO	
	$\gamma(v(i, f))$	$\gamma(v(i), v(f))$	$\gamma(v(i, f))$	$\gamma(v(i), v(f))$
1	8,247	8,247	10,42	10,42
2	7,373	7,363	9,571	9,568
3	7,009	7,009	9,399	9,399
4	6,698	6,692	9,229	9,224
5	6,506	6,503	9,042	9,040
6	6,437	6,437	8,829	8,829
7	6,445	6,448	8,559	8,558
8	6,460	6,460	8,249	8,246
9	6,439	6,439	7,913	7,911
10	6,380	6,380	7,583	7,581
11	6,285	6,284	7,291	7,285
12	6,158	6,159	7,028	7,023
13	5,997	5,994	6,790	6,787
14	5,815	5,812	6,565	6,561
15	5,608	5,605	6,337	6,334
16	5,387	5,384	6,104	6,101
17	5,156	5,156	5,872	5,870

1) при изменении скорости движения поглощающей молекулы на величину  $\Delta v = |v(i) - v(f)| \approx 0,2 \cdot 10^4$  см/с значения полуширин для линий на частотах  $\omega_{if}$  не зависят от способа определения  $\gamma(\gamma(v(i, f)) \approx \gamma(v(i), v(f)))$ ;

2) при таком  $\Delta v$  самое большое расхождение сдвигов центров линий

$$\Delta = \delta(v(i), v(f)) - \delta(v(i, f)) = \pm 2,0 \pm 1,5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$$

наблюдается для первых трех линий  $R(J_i = 0, 2, 4)$ , которое не превышает границы экспериментальной погрешности  $\pm 4,0 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ .

Общность первого заключения подтверждается результатами по полуширинам колебательно-вращательных линий молекулы CO при разном уширении (см. табл. 1).

В этом случае так же, как и при уширении CO<sub>2</sub>, изменение скорости движения молекулы CO при переходе от состояния  $i$  к  $f$  находится на том же уровне ( $\Delta v \approx 0,2 \cdot 10^4 \text{ см/с}$ ), и рассчитанные параметры  $\gamma$  с использованием средней по состояниям  $i, f$  скорости  $v(i, f)$  практически не отличаются от  $\gamma(v(i), v(f))$  (сравнить в табл. 1 значения столбцов 1, 2 и 3, 4 между собой).

Таблица 2

Экспериментальные значения  $\delta$  и  $\Delta_{\text{эксп}}$  для первых  $J_i$  0–2 полосы ( $10^{-3}, \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ ) [4]

Смесь	$R(J_i)$	0	1	2	3
CO—CO	$\delta$	0,45	—1,0	—2,2	—3,0
	$\Delta_{\text{эксп}}$		±0,913		
CO—N <sub>2</sub>	$\delta$	—	—1,4	—3,0	—3,8
	$\Delta_{\text{эксп}}$		±1,37		

Что касается сдвигов центров линий CO, то особенно для первых вращательных состояний  $J_i$  средняя экспериментальная погрешность ( $\Delta_{\text{эксп}}$ ) определения  $\delta_{\text{CO}}$  может значительно превосходить сами экспериментальные значения сдвигов центров линий колебательной полосы 0–2 (см. табл. 2). Поэтому в данном случае также теряет смысл заниматься дальнейшим уточнением значений  $\delta$ , а достаточно определить  $\delta(v(i, f))$  через скорость  $v(i, f)$ .

Таким образом, если изменение скорости поглощающей молекулы незначительное ( $\Delta v \approx 0,2 \cdot 10^4 \text{ см/с}$ ), а экспериментальная погрешность определения сдвига существенна ( $\sim >40 \pm 100\%$  от величины  $\delta$ ), то расчет параметров полуширин и сдвигов линий по более простым формулам  $\gamma(v(i, f))$ ,  $\delta(v(i, f))$  [1] вполне обоснован.

1. Зуев В.В., Петрова А.И. // Оптика атмосферы. 1990. № 11. С. 1123.
2. Tsao C.J., Curnutte B. // JQSRT. 1962. V. 2. P. 41.
3. Anderson P.W. // Phys. Rev. 1949. V. 76. P. 64.
4. Bouanich J.P. // Can. J. Phys. 1983. V. 61. P. 919.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,  
г. Томск

Поступила в редакцию  
25 февраля 1991 г.

V.V. Zuev, A.I. Petrova. **Influence of Changes in the Velocity of an Absorbing Molecule on the Accuracy of Calculations of the Spectral Line Halfwidths and Shifts Using UATCF Model.**

It is shown in the paper, using as an example the CO<sub>2</sub> and CO molecules, that if the change ( $\Delta v = |v(i) - v(f)|$ ) in the velocity of an absorbing molecule occurring during the transition from the  $i$ -th state to the state  $f$  does not exceed  $0,2 \cdot 10^4 \text{ см/с}$ , the difference between the values of  $\gamma$  and  $\delta$  parameters of the spectral lines calculated using UATCF model with averaged over  $i$  and  $f$  states velocity  $v(i, f)$  and those calculated using the functional dependence  $F(v(i), v(f))$  does not exceed the limits of experimental errors.