

А.Д. Быков, Н.Н. Лаврентьева

ВЫЧИСЛЕНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ ФУНКЦИЙ В УДАРНОЙ ТЕОРИИ УШИРЕНИЯ И СДВИГА СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

Вычислены резонансные функции теории Андерсона—Тсао—Карната—Фроста для поляризационной части межмолекулярного потенциала. Проведено усреднение резонансных функций по относительной скорости столкновения с распределением Максвелла.

Вычисление коэффициентов поглощения атмосферных и загрязняющих атмосферу газов требует знания параметров контура линий — полуширины и сдвига центра. В последние годы значительные усилия были направлены на уточнение коэффициентов уширения линий поглощения водяного пара, метана, озона, углекислого газа давлением азота, кислорода, воздуха [1–4]. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало необходимость совершенствования методов расчета, а именно — включение в расчет высоких членов мультипольного разложения электростатического потенциала, поляризационных взаимодействий, сил отталкивания, эффекта искривления траектории столкновением. Учет перечисленных факторов приводит к необходимости вычисления новых резонансных функций.

Часть необходимых для расчетов коэффициентов уширения и сдвига линий резонансных функций проведена ранее в [5–9]. В настоящей работе получены новые функции для индукционного и дисперсионного взаимодействий, проведено усреднение резонансных функций по распределению Максвелла для относительной скорости.

Полученные результаты применимы не только в методе Андерсона—Тсао—Карната—Фроста [5, 8], но могут быть также использованы и в других вариантах ударной теории [7].

1. Рассматриваемые функции $g_n(k)$ ($n = 1, \dots, 7$) и функции $G_n(k)$, применяемые в методах, использующих «приближение прерывания» [5], зависят от параметра адиабатичности

$$k = \frac{2\pi cb}{v} \Delta E, \quad (1)$$

где b — прицельное расстояние; v — относительная скорость столкновения; ΔE — баланс энергии безызлучательных переходов в поглощающей и уширяющей молекулах. Функции $g_n(k)$ и $G_n(k)$ связаны соотношением

$$G_n(k) = k^{N-2} \int_k^\infty dk' \frac{g_n(k')}{k'^{N-1}}, \quad (2)$$

где $N = 10$ для $n = 1, 2$ и $N = 12$ в остальных случаях. Резонансные функции для сдвига $Ig_n(k)$ и $IG_n(k)$ получаются из $g_n(k)$ и $G_n(k)$ преобразованием Гильберта [7]:

$$Ig_n(k) = \frac{1}{\pi} P.V. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_n(k')}{k' - k} dk', \quad (3)$$

$$IG_n(k) = \frac{1}{\pi} P.V. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_n(k')}{k' - k} dk'. \quad (4)$$

Главное значение интеграла по Коши определяется по формуле:

$$P.V. \int_a^b \dots = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_a^{k-\varepsilon} \dots + \int_{k+\varepsilon}^b \dots \right\}. \quad (5)$$

Усреднение по относительной скорости с функцией распределения Максвелла приводит к переопределению резонансных функций [9]:

$$\tilde{g}_n(k) = \frac{4}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |x| e^{-x^2} g_n\left(\frac{2k}{\sqrt{\pi} x}\right) dx. \quad (6)$$

Аналогично определяются и функции $\tilde{G}_n(k)$, $\tilde{I}g_n(k)$, $\tilde{I}G_n(k)$.

Задача заключается в том, чтобы, используя известные выражения для $g_n(k)$ [7], получить:

- функции $G_n(k)$ с помощью выражения (2);
- функции для сдвига $Ig_n(k)$, $IG_n(k)$ с помощью (3)–(5);
- провести усреднение по распределению Максвелла согласно (6).

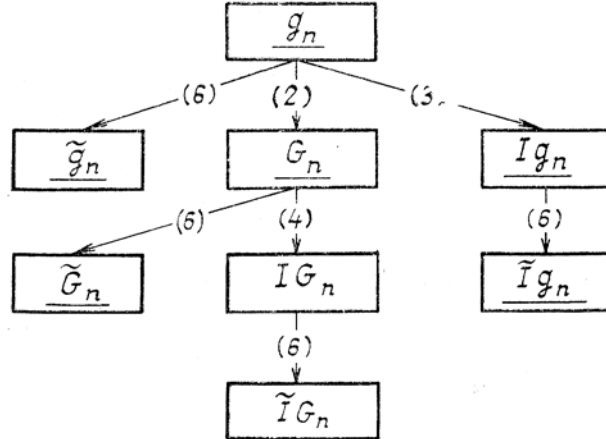


Схема вычисления резонансных функций. В скобках указаны номера формул, по которым проводились расчеты. Подчернуты функции, представимые в аналитическом виде

Порядок вычисления резонансных функций схематически представлен на рисунке.

2. Резонансные функции для поляризационных взаимодействий имеют вид [7]

$$g_n(k) = e^{-2k} \sum_{m=0}^{L_n} a_m^{(n)} k^m. \quad (7)$$

Функции $G_n(k)$, $Ig_n(k)$, $IG_n(k)$ ранее в литературе не приводились. Подставив (7) в формулы (2)–(6) и используя некоторые интегралы из [10], после ряда преобразований получаем:

$$G_n(k) = e^{-2k} \sum_{m=0}^{L_n} a_m^{(n)} \sum_{l=0}^{M_n} \frac{(-1)^l k^{m+l}}{(M_n + 1 - m)(M_n - m) \dots (M_n - m - l)} = e^{-2k} \sum_{m=0}^{P_n} b_m^{(n)} k^m, \quad (8)$$

$$I g_n(k) = \frac{1}{\pi} \left\{ e^{-2k} \text{Ei}(2k) \sum_{m=0}^{L_n} a_m^{(n)} k^m - e^{2k} \text{Ei}(-2k) \sum_{m=0}^{L_n} a_m^{(n)} (-k)^m + \sum_{m=1}^{L_n} a_m^{(n)} \sum_{l=1}^m \frac{(l-1)!}{2^l} [(-1)^{m-l} - k^{m-l}] \right\} =$$

$$= \frac{1}{\pi} \left\{ e^{-2k} \text{Ei}(2k) \sum_{m=0}^{L_n} a_m^{(n)} k^m - e^{2k} \text{Ei}(-2k) \sum_{m=0}^{L_n} a_m^{(n)} (-k)^m + \sum_{m=0}^{R_n} c_m^{(n)} k^{2m+1} \right\}, \quad (9)$$

$$\tilde{g}_n(k) = \frac{8}{\pi} \sum_{m=0}^{L_n} a_m^{(n)} \left(\frac{2k}{\sqrt{\pi}}\right)^m \left[\Gamma\left(\frac{-m+1}{2}\right) \frac{2k}{\sqrt{\pi}} {}_0F_2\left(\frac{m+1}{2}, \frac{3}{2}; -\frac{4k^2}{\pi}\right) - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{-m+2}{2}\right) {}_0F_2\left(\frac{m}{4}, \frac{1}{2}; -\frac{4k^2}{\pi}\right) - (m-3)! \left(\frac{4k}{\sqrt{\pi}}\right)^{-m+2} {}_1F_3\left(1; \frac{-m+3}{2}, \frac{-m+4}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{4k^2}{\pi}\right) \right]. \quad (10)$$

Аналогичные (9) и (10) формулы получаются и для функций $IG_n(k)$, $\tilde{G}_n(k)$ с заменой коэффициентов $a_m^{(n)}$ на $b_m^{(n)}$ и $c_m^{(n)}$ на $d_m^{(n)}$. Эти коэффициенты приведены в табл. 1–3. В (8)–(10) $\text{Ei}(x)$ –

интегральная экспонента; $({}_n I_m)$ — гипергеометрические функции [11], $M_n = N - 3$ (см. формулу (2)); P_n, R_n — номера последних коэффициентов $b_m^{(n)}$ и $c_m^{(n)}$ в табл. 2 и 3 соответственно.

Таким образом, резонансные функции для поляризационных взаимодействий, в том числе и усредненные по скорости, могут быть представлены в аналитическом виде, что упрощает вычисления коэффициентов уширения и сдвига линий в тех случаях, когда индукционное и дисперсионное взаимодействия вносят значительный вклад.

Таблица 1

Коэффициенты $a_m^{(n)}$ в формуле (7)

| g_n | a_m | | a_2 | a_3 | a_4 | a_5 | a_6 | a_7 | a_8 | a_9 | a_{10} |
|-------|-------|-------|---------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|------------------|------------------|
| | a_0 | a_1 | | | | | | | | | |
| g_1 | 1 | 2 | 2 | $\frac{4}{3}$ | $\frac{13}{21}$ | $\frac{4}{21}$ | $\frac{2}{63}$ | — | — | — | — |
| g_2 | 1 | 2 | $\frac{88}{43}$ | $\frac{184}{129}$ | $\frac{1292}{1677}$ | $\frac{580}{1677}$ | $\frac{668}{5031}$ | $\frac{24}{559}$ | $\frac{6}{559}$ | — | — |
| g_3 | 1 | 2 | $\frac{46}{25}$ | $\frac{76}{75}$ | $\frac{9}{25}$ | $\frac{2}{25}$ | $\frac{2}{225}$ | — | — | — | — |
| g_4 | 1 | 2 | $\frac{872}{425}$ | $\frac{1832}{1275}$ | $\frac{964}{1275}$ | $\frac{392}{1275}$ | $\frac{364}{3825}$ | $\frac{16}{765}$ | $\frac{2}{765}$ | — | — |
| g_5 | 1 | 2 | $\frac{101}{50}$ | $\frac{103}{75}$ | $\frac{209}{300}$ | $\frac{41}{150}$ | $\frac{37}{450}$ | $\frac{4}{225}$ | $\frac{1}{450}$ | — | — |
| g_6 | 1 | 2 | $\frac{2694}{1325}$ | $\frac{5564}{3975}$ | $\frac{26332}{35775}$ | $\frac{11336}{35775}$ | $\frac{4184}{35775}$ | $\frac{4088}{107325}$ | $\frac{1186}{107325}$ | $\frac{4}{1431}$ | $\frac{4}{7155}$ |
| g_7 | 1 | 2 | $\frac{68}{35}$ | $\frac{128}{105}$ | $\frac{58}{105}$ | $\frac{4}{21}$ | $\frac{16}{315}$ | $\frac{16}{1575}$ | $\frac{2}{1575}$ | — | — |

Таблица 2

Коэффициенты $b_m^{(n)}$ в формуле (8)

| G_n | b_m | | | | | | | | | |
|-------|----------------|---------------|--------------------|--------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------|------------------|
| | b_0 | b_1 | b_2 | b_3 | b_4 | b_5 | b_6 | b_7 | b_8 | b_9 |
| G_1 | $\frac{1}{8}$ | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{6}$ | $\frac{1}{14}$ | $\frac{1}{63}$ | — | — | — | — |
| G_2 | $\frac{1}{8}$ | $\frac{1}{4}$ | $\frac{133}{516}$ | $\frac{47}{258}$ | $\frac{227}{2236}$ | $\frac{479}{10062}$ | $\frac{21}{1118}$ | $\frac{3}{559}$ | — | — |
| G_3 | $\frac{1}{10}$ | $\frac{1}{5}$ | $\frac{9}{50}$ | $\frac{7}{75}$ | $\frac{13}{450}$ | $\frac{1}{225}$ | — | — | — | — |
| G_4 | $\frac{1}{10}$ | $\frac{1}{5}$ | $\frac{351}{1700}$ | $\frac{373}{2550}$ | $\frac{197}{2550}$ | $\frac{13}{425}$ | $\frac{13}{1530}$ | $\frac{1}{765}$ | — | — |
| G_5 | $\frac{1}{10}$ | $\frac{1}{5}$ | $\frac{81}{400}$ | $\frac{83}{600}$ | $\frac{7}{100}$ | $\frac{2}{75}$ | $\frac{13}{1800}$ | $\frac{1}{900}$ | — | — |
| G_6 | $\frac{1}{10}$ | $\frac{1}{5}$ | $\frac{541}{2650}$ | $\frac{563}{3975}$ | $\frac{8099}{107325}$ | $\frac{3562}{107325}$ | $\frac{1357}{107325}$ | $\frac{458}{107325}$ | $\frac{1}{795}$ | $\frac{2}{7155}$ |
| G_7 | $\frac{1}{10}$ | $\frac{1}{5}$ | $\frac{27}{140}$ | $\frac{5}{42}$ | $\frac{11}{210}$ | $\frac{3}{175}$ | $\frac{13}{3150}$ | $\frac{1}{1575}$ | — | — |

3. Резонансные функции для сдвига $Ig_n(k), IG_n(k)$ имеют «медленную» асимптотику при больших значениях аргументов, что затрудняет проведение вычислений. Для получения приближенных формул при больших k использовался асимптотический ряд для интегральной экспоненты:

$$\text{Ei}(x) e^{-x} \simeq \sum_{m=0}^{\infty} m! / x^{m+1}. \quad (11)$$

Используя разложение (11) и формулы (9), мы получили

$$\begin{aligned} I g_n(k) &\simeq \frac{1}{\pi} \sum_{m=0} A_m^{(n)} k^{-(2m+1)}, \\ I G_n(k) &\simeq \frac{1}{\pi} \sum_{m=0} B_m^{(n)} k^{-(2m+1)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Для расчетов при $k \geq 30$ достаточно учесть первые три члена в сумме (11). Коэффициенты $A_m^{(n)}$ и $B_m^{(n)}$ представлены в табл. 4.

4. Для всех рассмотренных в работе резонансных функций, а также функций $f_n(k)$, $I f_n(k)$, $F_n(k)$, $I F_n(k)$ ($n = 1, \dots, 5$) вычислен интеграл (6). Интегрирование проведено численно по формуле трапеции (уменьшение шага интегрирования в 10 раз изменяет результат меньше, чем на 10^{-5}). Верхний предел интегрирования можно ограничить значением $k = 4$, так как для больших k подынтегральное выражение пренебрежимо мало ($< 5 \cdot 10^{-7}$), а $f_n\left(\frac{2k}{\sqrt{\pi x}}\right) < 2$.

Таблица 3

Коэффициенты $c_m^{(n)}$, $d_m^{(n)}$ в формуле (9)

| $I g_n$ | c_m | | | | | d_m | | | |
|---------|----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|------------------|----------------------|----------------------|-----------------------|------------------|
| | c_0 | c_1 | c_2 | c_3 | c_4 | d_0 | d_1 | d_2 | d_3 |
| $I g_1$ | $\frac{133}{42}$ | $\frac{46}{63}$ | $\frac{2}{63}$ | — | — | $\frac{8}{21}$ | $\frac{5}{63}$ | — | — |
| $I g_2$ | $\frac{13031}{3354}$ | $\frac{5323}{5031}$ | $\frac{803}{5031}$ | $\frac{6}{559}$ | — | $\frac{811}{617}$ | $\frac{698}{5031}$ | $\frac{12}{559}$ | — |
| $I g_3$ | $\frac{13}{5}$ | $\frac{91}{225}$ | $\frac{2}{225}$ | — | — | $\frac{11}{45}$ | $\frac{7}{225}$ | — | — |
| $I g_4$ | $\frac{617}{170}$ | $\frac{3737}{3825}$ | $\frac{409}{3825}$ | $\frac{2}{765}$ | — | $\frac{61}{170}$ | $\frac{22}{225}$ | $\frac{7}{765}$ | — |
| $I g_5$ | $\frac{139}{40}$ | $\frac{401}{450}$ | $\frac{83}{900}$ | $\frac{1}{450}$ | — | $\frac{41}{120}$ | $\frac{79}{900}$ | $\frac{7}{900}$ | — |
| $I g_6$ | $\frac{9491}{2385}$ | $\frac{36307}{35775}$ | $\frac{5168}{35775}$ | $\frac{1366}{107325}$ | $\frac{4}{7155}$ | $\frac{8537}{21465}$ | $\frac{3739}{35775}$ | $\frac{1676}{107325}$ | $\frac{2}{1431}$ |
| $I g_7$ | $\frac{31}{10}$ | $\frac{43}{63}$ | $\frac{89}{1575}$ | $\frac{2}{1575}$ | — | $\frac{3}{10}$ | $\frac{4}{63}$ | $\frac{1}{225}$ | — |

В точке $k = 0$ интегралы (6) вычисляются точно:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_n(0) &= \frac{8}{\pi} f_n(0) \int_0^{\infty} x e^{-x^2} dx = \frac{4}{\pi} f_n(0) = 1,273239 f_n(0), \\ \tilde{F}_n(0) &= \frac{4}{\pi} F_n(0) = \frac{4}{n\pi}, \\ \tilde{I}f_n(0) &= \tilde{I}F_n(0) = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Аналогично записываются $\tilde{g}_n(0)$, $\tilde{I}g_n(0)$, $\tilde{G}_n(0)$ и $\tilde{I}G_n(0)$.

Коэффициенты $A_m^{(A)}$, $B_m^{(n)}$ в формулах (12)

| Ig_n | A_m | | | | B_m | | |
|--------|----------------------|-----------------------|-----------------------|------------------------|---------------------|----------------------|-----------------------|
| | A_0 | A_1 | A_2 | A_3 | B_0 | B_1 | B_2 |
| Ig_1 | 6 | $\frac{825}{28}$ | 429 | — | $\frac{2}{3}$ | $\frac{75}{28}$ | 33 |
| Ig_2 | $\frac{6384}{559}$ | $\frac{68244}{559}$ | $\frac{259479}{86}$ | $\frac{19981125}{172}$ | $\frac{2128}{1677}$ | $\frac{6204}{559}$ | $\frac{259479}{1118}$ |
| Ig_3 | $\frac{231}{50}$ | $\frac{429}{25}$ | $\frac{429}{2}$ | — | $\frac{21}{50}$ | $\frac{33}{25}$ | $\frac{143}{10}$ |
| Ig_4 | $\frac{3696}{425}$ | $\frac{59631}{850}$ | $\frac{50193}{34}$ | $\frac{204165}{4}$ | $\frac{336}{425}$ | $\frac{4587}{850}$ | $\frac{16731}{170}$ |
| Ig_5 | $\frac{1617}{200}$ | $\frac{12441}{200}$ | $\frac{1287}{16}$ | $\frac{706095}{16}$ | $\frac{147}{200}$ | $\frac{957}{200}$ | $\frac{429}{5}$ |
| Ig_6 | $\frac{19712}{1325}$ | $\frac{312026}{1325}$ | $\frac{2536391}{318}$ | $\frac{42574545}{106}$ | $\frac{1267}{1325}$ | $\frac{10877}{1325}$ | $\frac{410608}{2385}$ |
| Ig_7 | $\frac{33}{5}$ | $\frac{429}{10}$ | $\frac{11583}{14}$ | — | $\frac{3}{5}$ | $\frac{33}{10}$ | $\frac{3861}{70}$ |

Таблица 5

Функции неадиабатичности, усредненные по распределению Максвелла

| k | $\tilde{I}f_1$ | $\tilde{I}F_1$ | $\tilde{I}f_2$ | $\tilde{I}F_2$ | $\tilde{I}f_3$ | $\tilde{I}F_3$ | \tilde{g}_1 | $\tilde{I}g_1$ | \tilde{G}_1 | $\tilde{I}G_1$ |
|-----|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|---------------|----------------|---------------|----------------|
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1,2732 | 0 | 0,1592 | 0 |
| 0,1 | 0,0298 | 0,0806 | 0,0063 | 0,0061 | 0,0028 | 0,0014 | 1,2694 | 0,0672 | 0,1585 | 0,0096 |
| 0,2 | 0,0796 | 0,2025 | 0,0246 | 0,0228 | 0,0112 | 0,0056 | 1,2584 | 0,1329 | 0,1567 | 0,0189 |
| 0,3 | 0,1544 | 0,3199 | 0,0535 | 0,0472 | 0,0249 | 0,0122 | 1,2409 | 0,1958 | 0,1539 | 0,0276 |
| 0,4 | 0,2366 | 0,4214 | 0,0910 | 0,0766 | 0,0437 | 0,0212 | 1,2179 | 0,2551 | 0,1502 | 0,0358 |
| 0,5 | 0,3192 | 0,5047 | 0,1358 | 0,1088 | 0,0669 | 0,0321 | 1,1902 | 0,3105 | 0,1459 | 0,0432 |
| 0,6 | 0,3980 | 0,5703 | 0,1842 | 0,1421 | 0,0942 | 0,0445 | 1,1587 | 0,3615 | 0,1411 | 0,0499 |
| 0,7 | 0,4703 | 0,6203 | 0,2363 | 0,1751 | 0,1249 | 0,0581 | 1,1242 | 0,4080 | 0,1358 | 0,0559 |
| 0,8 | 0,5349 | 0,6568 | 0,2899 | 0,2069 | 0,1585 | 0,0727 | 1,0874 | 0,4501 | 0,1303 | 0,0612 |
| 0,9 | 0,5913 | 0,6819 | 0,3437 | 0,2369 | 0,1945 | 0,0878 | 1,0489 | 0,4879 | 0,1247 | 0,0658 |
| 1,0 | 0,6394 | 0,6976 | 0,3968 | 0,2646 | 0,2322 | 0,1032 | 1,0092 | 0,5214 | 0,1190 | 0,0697 |
| 1,1 | 0,6796 | 0,7057 | 0,4483 | 0,2898 | 0,2711 | 0,1186 | 0,9687 | 0,5508 | 0,1132 | 0,0730 |
| 1,2 | 0,7124 | 0,7076 | 0,4975 | 0,3123 | 0,3108 | 0,1339 | 0,9281 | 0,5764 | 0,1075 | 0,0758 |
| 1,3 | 0,7383 | 0,7045 | 0,5439 | 0,3322 | 0,3508 | 0,1489 | 0,8874 | 0,5983 | 0,1019 | 0,0781 |
| 1,4 | 0,7580 | 0,6975 | 0,5872 | 0,3495 | 0,3907 | 0,1633 | 0,8471 | 0,6169 | 0,0964 | 0,0799 |
| 1,5 | 0,7723 | 0,6874 | 0,6271 | 0,3642 | 0,4295 | 0,1772 | 0,8074 | 0,6324 | 0,0911 | 0,0813 |
| 1,6 | 0,7817 | 0,6751 | 0,6636 | 0,3765 | 0,4688 | 0,1903 | 0,7683 | 0,6450 | 0,0859 | 0,0823 |
| 1,7 | 0,7868 | 0,6610 | 0,6965 | 0,3866 | 0,5063 | 0,2027 | 0,7303 | 0,6549 | 0,0809 | 0,0829 |
| 1,8 | 0,7883 | 0,6456 | 0,7259 | 0,3946 | 0,5426 | 0,2143 | 0,6934 | 0,6624 | 0,0762 | 0,0833 |
| 1,9 | 0,7865 | 0,6294 | 0,7519 | 0,4007 | 0,5774 | 0,2250 | 0,6575 | 0,6678 | 0,0716 | 0,0834 |
| 2,0 | 0,7821 | 0,6126 | 0,7745 | 0,4051 | 0,6105 | 0,2348 | 0,6229 | 0,6711 | 0,0672 | 0,0833 |
| 2,1 | 0,7754 | 0,5955 | 0,7939 | 0,4079 | 0,6419 | 0,2438 | 0,5895 | 0,6726 | 0,0631 | 0,0829 |
| 2,2 | 0,7668 | 0,5784 | 0,8103 | 0,4094 | 0,6715 | 0,2519 | 0,5575 | 0,6725 | 0,0591 | 0,0824 |

| k | $\tilde{I}f_1$ | $\tilde{I}F_1$ | $\tilde{I}f_2$ | $\tilde{I}F_2$ | $\tilde{I}f_3$ | $\tilde{I}F_3$ | \tilde{g}_1 | $\tilde{I}g_1$ | \tilde{G}_1 | $\tilde{I}G_1$ |
|------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|---------------|----------------|---------------|----------------|
| 2,3 | 0,7566 | 0,5613 | 0,8237 | 0,4095 | 0,6991 | 0,2591 | 0,5268 | 0,6710 | 0,0554 | 0,0817 |
| 2,4 | 0,7452 | 0,5445 | 0,8345 | 0,4096 | 0,7247 | 0,2655 | 0,4974 | 0,6682 | 0,0519 | 0,0809 |
| 2,5 | 0,7327 | 0,5279 | 0,8428 | 0,4067 | 0,7484 | 0,2711 | 0,4693 | 0,6643 | 0,0485 | 0,0800 |
| 2,6 | 0,7195 | 0,5117 | 0,8487 | 0,4039 | 0,7701 | 0,2759 | 0,4425 | 0,6594 | 0,0454 | 0,0790 |
| 2,7 | 0,7056 | 0,4959 | 0,8525 | 0,4004 | 0,7899 | 0,2800 | 0,4170 | 0,6536 | 0,0424 | 0,0779 |
| 2,8 | 0,6913 | 0,4807 | 0,8543 | 0,3963 | 0,8077 | 0,2834 | 0,3927 | 0,6471 | 0,0396 | 0,0767 |
| 2,9 | 0,6767 | 0,4659 | 0,8543 | 0,3917 | 0,8236 | 0,2861 | 0,3697 | 0,6399 | 0,0370 | 0,0755 |
| 3,0 | 0,6619 | 0,4516 | 0,8527 | 0,3865 | 0,8378 | 0,2882 | 0,3479 | 0,6322 | 0,0345 | 0,0742 |
| 3,1 | 0,6471 | 0,4378 | 0,8496 | 0,3811 | 0,8501 | 0,2897 | 0,3272 | 0,6240 | 0,0322 | 0,0730 |
| 3,2 | 0,6323 | 0,4246 | 0,8453 | 0,3753 | 0,8607 | 0,2906 | 0,3076 | 0,6154 | 0,0301 | 0,0716 |
| 3,3 | 0,6175 | 0,4119 | 0,8397 | 0,3692 | 0,8697 | 0,2911 | 0,2891 | 0,6065 | 0,0280 | 0,0703 |
| 3,4 | 0,6030 | 0,3996 | 0,8331 | 0,3630 | 0,8772 | 0,2910 | 0,2716 | 0,5973 | 0,0261 | 0,0690 |
| 3,5 | 0,5886 | 0,3879 | 0,8257 | 0,3567 | 0,8831 | 0,2906 | 0,2550 | 0,5879 | 0,0244 | 0,0677 |
| 3,6 | 0,5745 | 0,3767 | 0,8174 | 0,3502 | 0,8877 | 0,2898 | 0,2394 | 0,5784 | 0,0227 | 0,0663 |
| 3,7 | 0,5606 | 0,3660 | 0,8084 | 0,3437 | 0,8909 | 0,2886 | 0,2247 | 0,5688 | 0,0212 | 0,0650 |
| 3,8 | 0,5471 | 0,3557 | 0,7988 | 0,3371 | 0,8929 | 0,2870 | 0,2108 | 0,5591 | 0,0197 | 0,0637 |
| 3,9 | 0,5338 | 0,3458 | 0,7887 | 0,3306 | 0,8937 | 0,2852 | 0,1978 | 0,5494 | 0,0183 | 0,0624 |
| 4,0 | 0,5210 | 0,3364 | 0,7782 | 0,3240 | 0,8934 | 0,2832 | 0,1855 | 0,5397 | 0,0171 | 0,0611 |
| 4,1 | 0,5084 | 0,3273 | 0,7674 | 0,3176 | 0,8921 | 0,2808 | 0,1739 | 0,5301 | 0,0159 | 0,0599 |
| 4,2 | 0,4962 | 0,3187 | 0,7563 | 0,3111 | 0,8899 | 0,2793 | 0,1630 | 0,5205 | 0,0148 | 0,0586 |
| 4,3 | 0,4844 | 0,3104 | 0,7449 | 0,3048 | 0,8868 | 0,2756 | 0,1528 | 0,5109 | 0,0138 | 0,0574 |
| 4,4 | 0,4729 | 0,3025 | 0,7334 | 0,2986 | 0,8829 | 0,2727 | 0,1432 | 0,5015 | 0,0128 | 0,0562 |
| 4,5 | 0,4618 | 0,2949 | 0,7218 | 0,2924 | 0,8783 | 0,2697 | 0,1342 | 0,4922 | 0,0119 | 0,0550 |
| 4,6 | 0,4511 | 0,2877 | 0,7101 | 0,2864 | 0,8730 | 0,2666 | 0,1257 | 0,4830 | 0,0111 | 0,0539 |
| 4,7 | 0,4406 | 0,2807 | 0,6984 | 0,2805 | 0,8671 | 0,2634 | 0,1177 | 0,4640 | 0,0103 | 0,0528 |
| 4,8 | 0,4306 | 0,2741 | 0,6867 | 0,2747 | 0,8607 | 0,2601 | 0,1102 | 0,4651 | 0,0096 | 0,0517 |
| 4,9 | 0,4208 | 0,2627 | 0,6751 | 0,2690 | 0,8537 | 0,2567 | 0,1032 | 0,4564 | 0,0089 | 0,0506 |
| 5,0 | 0,4114 | 0,2615 | 0,6635 | 0,2635 | 0,8463 | 0,2532 | 0,0967 | 0,4478 | 0,0083 | 0,0496 |
| 5,1 | 0,4023 | 0,2557 | 0,6520 | 0,2581 | 0,8385 | 0,2497 | 0,0905 | 0,4384 | 0,0077 | 0,0486 |
| 5,2 | 0,3936 | 0,2500 | 0,6406 | 0,2529 | 0,8304 | 0,2462 | 0,0847 | 0,4312 | 0,0072 | 0,0476 |
| 5,3 | 0,3851 | 0,2446 | 0,6294 | 0,2477 | 0,8220 | 0,2427 | 0,0793 | 0,4231 | 0,0067 | 0,0467 |
| 5,4 | 0,3769 | 0,2394 | 0,6183 | 0,2428 | 0,8132 | 0,2392 | 0,0742 | 0,4153 | 0,0062 | 0,0458 |
| 5,5 | 0,3690 | 0,2344 | 0,6074 | 0,2379 | 0,8043 | 0,2356 | 0,0694 | 0,4076 | 0,0058 | 0,0449 |
| 5,6 | 0,3614 | 0,2296 | 0,5966 | 0,2332 | 0,7951 | 0,2321 | 0,0650 | 0,4001 | 0,0054 | 0,0440 |
| 5,7 | 0,3540 | 0,2250 | 0,5860 | 0,2286 | 0,7758 | 0,2285 | 0,0608 | 0,3927 | 0,0050 | 0,0431 |
| 5,8 | 0,3469 | 0,2206 | 0,5756 | 0,2241 | 0,7764 | 0,2250 | 0,0569 | 0,3856 | 0,0047 | 0,0423 |
| 5,9 | 0,3400 | 0,2163 | 0,5654 | 0,2198 | 0,7669 | 0,2216 | 0,0533 | 0,3786 | 0,0043 | 0,0415 |
| 6,0 | 0,3334 | 0,2122 | 0,5555 | 0,2156 | 0,7573 | 0,2181 | 0,0498 | 0,3718 | 0,0040 | 0,0407 |
| 6,5 | 0,3034 | 0,1937 | 0,5086 | 0,1964 | 0,7088 | 0,2015 | 0,0357 | 0,3403 | 0,0028 | 0,0372 |
| 7,0 | 0,2788 | 0,1782 | 0,4670 | 0,1798 | 0,6612 | 0,1861 | 0,0256 | 0,3127 | 0,0020 | 0,0341 |
| 7,5 | 0,2565 | 0,1651 | 0,4303 | 0,1656 | 0,6159 | 0,1721 | 0,0183 | 0,2886 | 0,0014 | 0,0315 |
| 8,0 | 0,2380 | 0,1537 | 0,3980 | 0,1533 | 0,5737 | 0,1595 | 0,0131 | 0,2676 | 0,0010 | 0,0292 |
| 8,5 | 0,2220 | 0,1439 | 0,3698 | 0,1426 | 0,5349 | 0,1483 | 0,0094 | 0,2491 | 0,0007 | 0,0272 |
| 9,0 | 0,2080 | 0,1353 | 0,3449 | 0,1334 | 0,4996 | 0,1383 | 0,0067 | 0,2394 | 0,0005 | 0,0254 |
| 9,5 | 0,1958 | 0,1277 | 0,3231 | 0,1252 | 0,4677 | 0,1294 | 0,0048 | 0,2187 | 0,0003 | 0,0239 |
| 10,0 | 0,1849 | 0,1209 | 0,3037 | 0,1180 | 0,4390 | 0,1214 | 0,0035 | 0,2060 | 0,0002 | 0,0226 |
| 11,0 | 0,1666 | 0,1093 | 0,2713 | 0,1059 | 0,3898 | 0,1081 | 0,0018 | 0,1847 | 0,0001 | 0,0203 |
| 12,0 | 0,1517 | 0,0999 | 0,2452 | 0,0961 | 0,3500 | 0,0974 | 0,0009 | 0,1674 | 0,0001 | 0,0184 |

| k | $\tilde{I}f_1$ | $\tilde{I}F_1$ | $\tilde{I}f_2$ | $\tilde{I}F_2$ | $\tilde{I}f_3$ | $\tilde{I}F_3$ | \tilde{g}_1 | $\tilde{I}g_1$ | \tilde{G}_1 | $\tilde{I}G_1$ |
|------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|---------------|----------------|---------------|----------------|
| 13,0 | 0,1393 | 0,0919 | 0,2239 | 0,0881 | 0,3174 | 0,0886 | 0,0005 | 0,1532 | 0,0 | 0,0169 |
| 14,0 | 0,1289 | 0,0852 | 0,2062 | 0,0813 | 0,2905 | 0,0814 | 0,0003 | 0,1413 | 0,0 | 0,0156 |
| 15,0 | 0,1199 | 0,0794 | 0,1911 | 0,0756 | 0,2679 | 0,0753 | 0,0001 | 0,1312 | 0,0 | 0,0145 |
| 16,0 | 0,1122 | 0,0793 | 0,1783 | 0,0706 | 0,2488 | 0,0701 | 0,0001 | 0,1225 | 0,0 | 0,0135 |
| 17,0 | 0,1054 | 0,0699 | 0,1671 | 0,0662 | 0,2323 | 0,0656 | 0,0 | 0,1149 | 0,0 | 0,0127 |
| 18,0 | 0,0994 | 0,0659 | 0,1572 | 0,0624 | 0,2180 | 0,0616 | 0,0 | 0,1082 | 0,0 | 0,0120 |
| 19,0 | 0,0940 | 0,0624 | 0,1485 | 0,0590 | 0,2055 | 0,0582 | 0,0 | 0,1023 | 0,0 | 0,0113 |
| 20,0 | 0,0892 | 0,0592 | 0,1408 | 0,0560 | 0,1944 | 0,0551 | 0,0 | 0,0970 | 0,0 | 0,0107 |
| 22,5 | 0,0791 | 0,0526 | 0,1246 | 0,0496 | 0,1714 | 0,0487 | 0,0 | 0,0859 | 0,0 | 0,0095 |
| 25,0 | 0,0711 | 0,0473 | 0,1118 | 0,0446 | 0,1535 | 0,0436 | 0,0 | 0,0771 | 0,0 | 0,0086 |
| 27,5 | 0,0646 | 0,0430 | 0,1014 | 0,0404 | 0,1390 | 0,0396 | 0,0 | 0,0700 | 0,0 | 0,0078 |
| 30,0 | 0,0592 | 0,0394 | 0,0928 | 0,0370 | 0,1270 | 0,0362 | 0,0 | 0,0641 | 0,0 | 0,0071 |

Примечание. Функции $\tilde{f}_1, \tilde{f}_2, \tilde{f}_3, \tilde{F}_1, \tilde{F}_2, \tilde{F}_3$ приведены в [9].

Для функций $\tilde{I}g_n(k)$ и $\tilde{I}G_n(k)$ также найдены асимптотические оценки при больших значениях аргументов:

$$\tilde{I}g_n(k) \simeq \sum_{m=0}^{L_n} \frac{\tilde{A}_m^{(n)}}{k^{2m+1}} \frac{(2m+1)!!}{2^{3m}},$$

$$\tilde{I}G_n(k) \simeq \sum_{m=0}^{L_n} \frac{\tilde{B}_m^{(n)}}{k^{2m+1}} \frac{(2m+1)!!}{2^{3m}}, \quad (14)$$

аналогичные формулы получены для функций $\tilde{I}f_n(k)$ и $\tilde{I}F_n(k)$. Заметим, что из приведенной асимптотики следует: значения усредненных по скорости функций при больших k близки, так как совпадают первые члены асимптотических рядов (12) и (14) при $m=0$, дающие основной вклад.

В табл. 5 представлены значения наиболее часто используемых в расчетах функций $\tilde{I}f_n(k)$, $\tilde{I}F_n(k)$ ($n=1, \dots, 3$) $\tilde{g}_1(k)$, $\tilde{I}g_1(k)$, $\tilde{G}_1(k)$, $\tilde{I}G_1(k)$. Значения функций $\tilde{f}_n(k)$, $\tilde{F}_n(k)$ приведены в [9].

1. Tejwani G. D. T. // JQSRT. 1988. V. 40. P. 605.
2. Gamache R. R., Davies R. W. // Appl. Opt. 1983. V. 22. P. 4013.
3. Rosenmann L., Hartman J. M., Perrin M. Y., Taine J. // J. Chem. Phys. 1988. V. 88. P. 2999.
4. Gamache R. R., Rothman L. S. // Appl. Opt. 1985. V. 24. P. 1651.
5. Tsao C. J., Curnutte B. // JQSRT. 1962. V. 2. P. 41.
6. Boulet C., Robert D., Galatry L. // J. Chem. Phys. 1976. V. 65. P. 5302.
7. Leavitt R. P. // J. Chem. Phys. 1980. V. 73. P. 5432.
8. Frost B. S. // J. Phys. 1976. V. B9. P. 1001.
9. Cattani M. // J. Chem. Phys. 1970. V. 52. P. 4566.
10. Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. // Интегралы и ряды. Специальные функции. М.: Наука, 1983. 749 с.
11. Градштейн И. С., Рыжик И. М. // Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Изд. 5-с. М.: Наука, 1971. 1400 с.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,
Томск

Поступила в редакцию
5 марта 1991 г.

A. D. Bykov, N. N. Lavrentieva. Calculation of the Resonance Functions in the Theory of Collisional Broadening and Shifts of Spectral Lines.

The resonance functions of the Anderson–Tsao–Curnutte–Frost theory are calculated in the paper for the polarization part of the intermolecular potential. The resonance functions are averaged over relative velocities of collisions, the velocity being of the Maxwellian distribution.