

В.Н. Стройнова

## Расчеты коэффициентов уширения линий поглощения $\text{H}_2\text{O}$ в диапазоне 13550–13950 $\text{см}^{-1}$

Томский политехнический университет

Поступила в редакцию 2.03.2005 г.

Представлены результаты расчетов коэффициентов уширения 164 линий  $\text{H}_2\text{O}$  давлением воздуха, азота, кислорода, собственным давлением. Для расчетов использовался метод Андерсона–Тсао–Карната (АТК), дополненный учетом внутримолекулярных взаимодействий и распределением Максвелла для относительной скорости. Получено хорошее согласие с результатами измерений для всех линий  $\text{H}_2\text{O}$ . Сравнительный анализ результатов расчетов полуширин линий  $\text{H}_2\text{O}$  методами АТК и CRBF показал, что для случая сильных столкновений результаты расчетов обоими методами весьма близки.

### Введение

Определение параметров контура спектральных линий водяного пара в ближней ИК и видимой областях представляет значительный интерес, поскольку поглощение солнечного излучения в этом диапазоне определяет радиационный баланс атмосферы. Ранее в [1,2] проведены оценки вклада слабых линий поглощения  $\text{H}_2\text{O}$  и показано, что вклад слабых линий, обусловленных переходами на высоковозбужденные колебательно-вращательные состояния, может достигать нескольких процентов и должен учитываться при расчетах радиационных потоков в атмосфере.

При зондировании вертикальных профилей концентрации атмосферных газов необходимо знать полуширину линии поглощения с точностью не хуже 5%, поскольку полуширина линий в значительной степени определяет функцию поглощения в данном спектральном диапазоне [3]. Исходная спектроскопическая информация по полуширинам спектральных линий  $\text{H}_2\text{O}$ , используемая для расчетов функции пропускания атмосферы, должна учитывать зависимость коэффициентов уширения от разнообразных внутримолекулярных взаимодействий, от колебательных и вращательных квантовых чисел, температуры, чтобы иметь необходимую степень достоверности.

Существующие в настоящее время спектроскопические банки данных (например, HITRAN [4], linelist Швенке [5]) содержат расчетные значения коэффициентов уширения сотен тысяч линий различных атмосферных газов. В основном это коэффициенты уширения линий, принадлежащих низким колебательно-вращательным полосам молекул. Потребность в расчетных значениях коэффициентов уширения линий  $\text{H}_2\text{O}$ , принадлежащих высоким колебательно-вращательным полосам, в настоящее время удовлетворена не полностью.

В данной статье представлен расчет коэффициентов уширения линий поглощения  $\text{H}_2\text{O}$  полос  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  давлением азота, кислорода,

воздуха, собственным давлением. При расчетах использовался один из вариантов полуклассической ударной теории уширения – метод Андерсона–Тсао–Карната [6], дополненный учетом распределения молекул по скоростям, зависимостью внутримолекулярных характеристик и межмолекулярных параметров поглощающей молекулы от колебательных квантовых чисел [7].

### 1. Теоретический анализ

В рамках полуклассической ударной теории уширения (метод расчета Андерсона–Тсао–Карната (АТК) [6]) полуширина линии поглощения выражается формулой

$$\gamma(i, f) = \frac{n}{c} \sum_j \rho(j) \int_0^\infty F(v) v dv \left[ \frac{b_c^2}{2} + \int_{b_c}^\infty S_2(i, f, b, v) b db \right]. \quad (1)$$

Здесь  $i, f$  – набор колебательных и вращательных квантовых чисел начального и конечного состояний перехода;  $n$  – концентрация возмущающих частиц;  $c$  – скорость света;  $\rho(j)$  – заселенность  $j$ -го уровня возмущающей молекулы;  $F(v)$  – распределение Максвелла для относительной скорости сталкивающихся частиц;  $b_c$  – параметр прерывания;  $S_2(i, f, b, v)$  – функция прерывания Андерсона для столкновения с прицельным параметром  $b$  и относительной скоростью  $v$ . Функция прерывания  $S_2(i, f, b, v)$  определяется электростатической частью межмолекулярного потенциала и содержит информацию об энергетическом спектре, мультипольных моментах и других характеристиках сталкивающихся молекул:

$$S_2(i, f, b, v) = \frac{4}{45} \frac{1}{(hv b^3)^2} \times \sum_j D(jj'|2) \left\{ \sum_{i'} D(i'i' | 1) \varphi(k_{i'i'jj'}) + \sum_{f'} D(ff'|1) \varphi(k_{ff'jj'}) \right\}. \quad (2)$$

В (2) учтено диполь-квадрупольное взаимодействие (рассматривается столкновение молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  с неполярной молекулой) и использованы следующие обозначения:  $D(jj'|2)$  – силы квадрупольных переходов в возмущающей молекуле;  $D(ii'|1)$ ,  $D(ff'|1)$  – силы дипольных переходов в поглощающей молекуле. Резонансная функция  $\varphi(k_{ijj'})$  зависит от параметра  $k_{ijj'}$ , определяемого параметрами столкновения  $b$  и  $v$  и разностью уровней энергии виртуальных переходов в поглощающей и возмущающей молекулах:

$$k_{ijj'} = \frac{2\pi cb}{v}(E_i - E_{i'} + E_j - E_{j'}). \quad (3)$$

Здесь  $E_i - E_{i'}$ ,  $E_j - E_{j'}$  – разность уровней энергии виртуальных переходов в поглощающей и возмущающей молекулах. Резонансный параметр в верхнем состоянии перехода  $k_{ff'j'}$  можно получить, заменив в (3) индекс  $i$  на  $f$ . Анализ формул показывает, что разность  $(E_f - E_{f'})$  (3), влияющая на полуширину линии, зависит от вращательных и центробежных постоянных.

В [7] показано, что изменение вращательных и центробежных постоянных  $\text{H}_2\text{O}$  в высоковозбужденных изгибных состояниях может достигать нескольких десятков раз ( $\Delta k$ -эффект, центробежный эффект). Расчет полуширин линий полосы  $4\nu_2$ , проведенный в приближении, когда уровни энергии верхнего колебательного состояния берутся как для основного, дает погрешность в определении полуширины до 17%. Силы дипольных переходов  $D(ff'|1)$  (2), определяемые в основном средним значением дипольного момента  $\text{H}_2\text{O}$ , существенно влияют на полуширину линий. Расчет полуширин линий полосы  $4\nu_2$ , проведенный в приближении, когда силы линий верхнего колебательного состояния берутся как для основного, приводит к ошибке в определении полуширин линий до 80%. В целом расчеты полуширин по методу АТК показали, что эффекты внутримолекулярной динамики ведут к значительному (до 39%) сужению некоторых линий поглощения  $\text{H}_2\text{O}$  полосы  $5\nu_2$  и должны быть учтены при расчетах полуширин линий, образованных переходами на высоковозбужденные колебательные состояния [7].

В [8] представлены результаты расчетов полуширин линий  $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$  методом quantum Fourier theory (QFT), в [9] проводились расчеты полуширин линий  $\text{H}_2\text{O}$  для случая самоуширения методом АТК. Оба расчета проведены в приближении энергий основного колебательного состояния. Неучет  $\Delta k$ -эффекта, центробежного эффекта при расчетах полуширин [8, 9] привел к расхождению с экспериментальными данными более чем на 20%, что превышает требуемую точность расчетов полуширин, равную 5% [3].

## 2. Результаты и обсуждение

В данной работе рассчитаны коэффициенты уширения линий поглощения  $\text{H}_2\text{O}$  полос  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  давлением азота, кислорода, воздуха,

собственным давлением. Полуширины линий в азоте, кислороде, водяном паре рассчитывались методом АТК с учетом внутримолекулярных взаимодействий и распределения Максвелла для относительной скорости (1)–(3), в воздухе определялись согласно формуле

$$\gamma_{\text{air}} = 0,79\gamma_{\text{N}_2} + 0,21\gamma_{\text{O}_2}. \quad (4)$$

Спектроскопические постоянные молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  получены из решения обратной задачи при диагонализации эффективного вращательного гамилтониана Уотсона с использованием измеренных в [10] уровней энергии. Учет случайных резонансов проведен с использованием коэффициентов смешивания волновых функций молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  [11] при расчете матричных элементов эффективного оператора дипольного момента [12]. Средний дипольный момент молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  для колебательных состояний (301), (221) рассчитан с использованием производных дипольного момента из [13].

Результаты расчетов полуширин линий  $\text{H}_2\text{O}$  давлением воздуха представлены на рис. 1 в сравнении с экспериментальными данными [14].

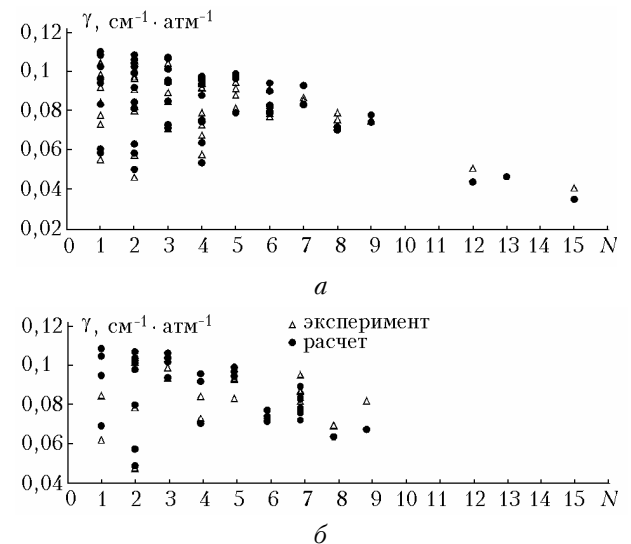


Рис. 1. Коэффициенты уширения линий  $\text{H}_2\text{O}$  полосы  $3\nu_1 + \nu_3$  (а) и  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  (б) при уширении воздухом в зависимости от квантового числа  $N = J + K_a - K_c + 1$

Измерения проведены на спектрометре с лазером на красителе, ошибка измерений составляет  $0,003 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ . Сравнение расчетных и экспериментальных данных показывает, что стандартное отклонение не превышает 15% для 65% измерений. Совпадение расчетных и измеренных значений ухудшается при возрастании квантового числа  $N = J + K_a - K_c + 1$  нижнего состояния перехода, т.е. для линий с большими значениями вращательных квантовых чисел  $J$  и  $K_a$ . На рис. 1 можно видеть существенное сужение линий с большим значением  $N$ .

Результаты расчетов коэффициентов уширения линий  $\text{H}_2\text{O}$  собственным давлением представлены на рис. 2 вместе с измеренными значениями [15].

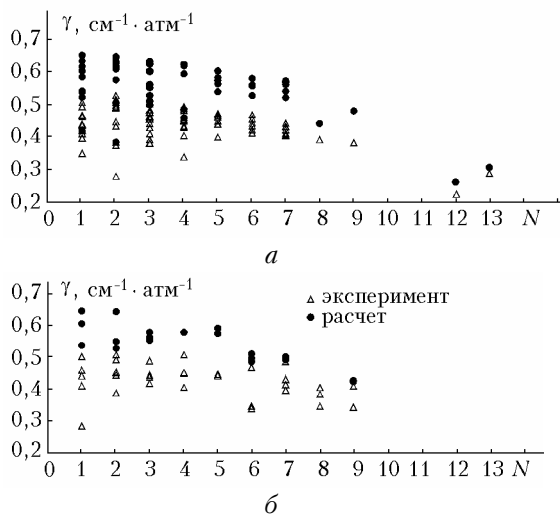


Рис. 2. Коэффициенты уширения линий  $\text{H}_2\text{O}$  полосы  $3\nu_1 + \nu_3$  (а) и  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  (б) при самоуширении в зависимости от квантового числа  $N = J + K_a - K_c + 1$

Ошибка измерений составляет  $0,006 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ , стандартное отклонение расчетных значений полуширины от измеренных не превышает 15% для 50% измерений. Согласие расчетных данных с экспериментальными снижается при возрастании квантового числа  $N = J + K_a - K_c + 1$ , т.е. для линий с большими значениями вращательных квантовых чисел  $J$  и  $K_a$ . Из рис. 2 видно, что полуширина уменьшается с возрастанием  $N$ .

В табл. 1 приведено сравнение средних значений полуширины линии в полосе для измеренных в [14, 15]  $\gamma$ , рассчитанных в данной работе  $\gamma_{\text{АТК}}$  и рассчитанных в [16]  $\gamma_{\text{CRBF}}$  (первая строка – измерение, вторая – расчет по методу АТК, третья – расчет по методу CRBF). Из табл. 1 видно, что средние расчетные и экспериментальные значения весьма близки друг к другу, в случаях уширения азотом и кислородом совпадают в пределах ошибки измерения. Для случая самоуширения согласие между рассчитанными и измеренными средними значениями недостаточно хорошее, что связано, по видимому, с возросшей ошибкой измерения.

Таблица 1

Сравнение средних значений коэффициентов уширения линий  $\text{H}_2\text{O}$  давлением воздуха, азота, кислорода, собственным давлением в полосах  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$

$\gamma_{\text{ср.}}, \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$	Воздух	$\text{N}_2$	$\text{O}_2$	$\text{H}_2\text{O}$
$\gamma(301)$	0,0859	0,0952	0,0583	0,434
$\gamma_{\text{АТК}}(301)$	0,0856	0,0942	0,0544	0,5538
$\gamma_{\text{CRBF}}(301)$		0,0976	0,0579	
$\gamma(221)$	0,0838	0,0903	0,0567	0,423
$\gamma_{\text{АТК}}(221)$	0,0857	0,0943	0,0529	0,5401
$\gamma_{\text{CRBF}}(221)$		0,0934	0,0569	

В [16] представлены результаты расчетов коэффициентов уширения линий  $\text{H}_2\text{O}$  полос  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  модифицированным методом Бонами–Робера (complex Robert–Bonamy formalism –

CRBF). В рамках метода CRBF полуширина определяется выражением [17]:

$$\gamma = \frac{n\bar{v}}{2\pi c} \sum_j \rho(j) \times \int_0^{\infty} 2\pi b db \{1 - \exp[-\text{Re}S_2(b)] \cos[S_1(b) + \text{Im}S_2(b)]\}. \quad (5)$$

Здесь  $\bar{v}$  – средняя тепловая скорость сталкивающихся молекул.

В [16] получено хорошее согласие с экспериментальными данными [14] для полуширин линий  $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}-\text{O}_2$ . Сравнительный анализ особенностей модели CRBF и АТК и рассчитанных значений коэффициентов уширения [16] и данной работы показал следующее.

Во-первых, в рамках метода CRBF учитывается вклад в полуширину линии от изотропной части поляризационных взаимодействий  $S_1(b)$  в явном виде (5). Необходимо отметить, что в рамках метода АТК вклады в полуширину от  $S_1(b)$ ,  $\text{Im}S_2(b)$  также учитываются, но в неявном виде, при определении параметра прерывания  $b_c < b$  в результате решения уравнения прерывания Андерсона:

$$\text{Re}S_2(b) + |\text{Im}S_2(b) + S_1(b)| = 1. \quad (6)$$

Во-вторых, в рамках метода CRBF  $\text{Re}S_2(b)$  (5) содержит вклады в полуширину от электростатических взаимодействий и близкодействующей части потенциала, в отличие от метода АТК, в рамках которого  $S_2(b)$  (2) содержит только электростатические (диполь-квадрупольное для рассматриваемого случая столкновений молекул  $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}-\text{O}_2$ ) взаимодействия.

В методе АТК процедура прерывания (6) и введение параметра прерывания  $b_c$  во многом снимают проблему учета вклада от близкодействующей части потенциала, так как предполагается, что для столкновений с прицельными расстояниями  $b_c < b$  процесс поглощения прерывается и молекула  $\text{H}_2\text{O}$  переходит в другое энергетическое состояние.

Сравнительный анализ вкладов в полуширину от электростатических и близкодействующих сил проведен в [18], где показано, что для случая сильных столкновений (когда сталкивающиеся молекулы имеют большие мультипольные моменты и взаимодействуют на далеких расстояниях) вклад близкодействующей части потенциала пренебрежимо мал. В этом случае результаты расчетов коэффициентов уширения линий поглощения молекул методами АТК и Робера–Бонами должны быть весьма близки.

Результаты сравнения расчетов коэффициентов уширения линий  $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$  методом АТК и CRBF [16] приведены в табл. 2, где  $\gamma_1$  – значение полуширины линии, рассчитанное методом АТК;  $\gamma_2$  – значение полуширины линии, рассчитанное методом CRBF;

$$\Delta = \left| \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1} \right| \times 100\%$$

— стандартное отклонение.

Анализ показывает, что для отдельных линий полос  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  различия могут достигать 2,4–2,7%; для 80% линий полос  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  различия не превышают 1% для .

Т а б л и ц а 2

Сравнение коэффициентов уширения линий  $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$  полос  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$ , рассчитанных методом АТК ( $\gamma_1$ ) и CRBF ( $\gamma_2$ )

$JK_a K_c - J'K'_a K'_c$	$\gamma_1, \text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$	$\gamma_2, \text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$	$\Delta, \%$
$3\nu_1 + \nu_3$			
6 <sub>15</sub> –5 <sub>14</sub>	0,1049	0,102	2,4
6 <sub>25</sub> –5 <sub>24</sub>	0,0925	0,091	1,6
5 <sub>32</sub> –4 <sub>31</sub>	0,0971	0,098	0,9
7 <sub>16</sub> –7 <sub>17</sub>	0,0796	0,081	0,6
5 <sub>23</sub> –4 <sub>22</sub>	0,1080	0,106	1,9
5 <sub>14</sub> –4 <sub>13</sub>	0,1100	0,107	2,7
4 <sub>22</sub> –3 <sub>21</sub>	0,1078	0,107	0,7
4 <sub>13</sub> –3 <sub>12</sub>	0,1118	0,109	0,8
5 <sub>24</sub> –5 <sub>05</sub>	0,0966	0,099	2,4
4 <sub>23</sub> –4 <sub>04</sub>	0,1052	0,107	1,7
3 <sub>21</sub> –2 <sub>20</sub>	0,1070	0,108	0,9
$2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$			
1 <sub>01</sub> –2 <sub>02</sub>	0,1183	0,118	0,5
2 <sub>12</sub> –3 <sub>13</sub>	0,1103	0,110	0,3
3 <sub>13</sub> –4 <sub>14</sub>	0,1068	0,106	0,7
7 <sub>17</sub> –8 <sub>18</sub>	0,0622	0,062	0,3
4 <sub>04</sub> –5 <sub>05</sub>	0,1029	0,101	1,8
2 <sub>21</sub> –3 <sub>22</sub>	0,0999	0,104	0,5
3 <sub>31</sub> –3 <sub>30</sub>	0,0779	0,085	0,7
5 <sub>14</sub> –6 <sub>15</sub>	0,1027	0,100	2,7

В-третьих, расчеты полуширин методом CRBF [16] проведены в приближении средней тепловой скорости (5). В данной работе расчеты полуширин проведены методом АТК с учетом распределения Максвелла для относительной скорости сталкивающихся молекул (1). Известно [19], что приближение средней тепловой скорости вносит в расчеты полуширин линий  $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$  полосы  $\nu_2$  методом АТК ошибку 1–5%.

В целом сравнение коэффициентов уширения линий  $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$  полос  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  (см. табл. 2), рассчитанных разными методами, показывает, что оба метода приводят к близким результатам для случая сильных столкновений. Сравнение средних значений полуширин  $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}-\text{O}_2$ , рассчитанных методами АТК и CRBF, с экспериментальными (см. табл. 1) показывает хорошее согласие.

### З а к л ю ч е н и е

В данной статье рассчитаны коэффициенты уширения 164 линий  $\text{H}_2\text{O}$  полос  $3\nu_1 + \nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$  при уширении азотом, кислородом, собственным давлением. Коэффициенты уширения воздухом определены из расчетных данных по формуле (4). Для расчетов применялся метод АТК, дополненный учетом внутримолекулярных взаимодействий ( $\Delta k$ -эффекта, центробежного эффекта, колебательной зависимостью средних значений дипольного момента, случайных резонансов) и распределения Максвелла для

относительной скорости сталкивающихся молекул.

Статистический анализ и сравнение с экспериментальными данными [14,15] показывают, что полный учет эффектов внутримолекулярной динамики и распределения молекул по скоростям в рамках метода АТК позволяет восстанавливать коэффициенты уширения линий  $\text{H}_2\text{O}$  высоколежащих колебательных полос с точностью, близкой к экспериментальной. Полученные значения полуширин могут быть использованы для расчетов функции пропускания атмосферы.

Автор выражает благодарность д.ф.-м.н. А.Д. Быкову за плодотворные обсуждения и критические замечания.

1. Быков А.Д., Воронин Б.А., Науменко О.В., Синица Л.Н., Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю. Вклад слабых линий поглощения водяного пара в ослабление коротковолнового излучения // Оптика атмосфер. и океана. 1999. Т. 12. № 9. С. 288–293.
2. Воронин Б.А., Чеснокова Т.Ю., Серебренников А.Б. Оценка роли слабых линий поглощения водяного пара в переносе солнечного излучения // Оптика атмосфер. и океана. 2001. Т. 14. № 9. С. 788–791.
3. Gamache R.R., Hartman J.-M., Rosemann L. Collisional broadening of water vapor lines. I. A survey of experimental results // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1994. V. 52. N 3. P. 481–499.
4. Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., Benner D.Chris, Birk M., Brown L.R., Carleer M.R., Chackerian C., Jr., Chance K., Dana V., Devi V.M., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Hartmann J.-M., Jucks K.W., Maki A.G., Mandin J.-Y., Massie S.T., Orphal J., Perrin A., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Tennyson J., Tolchenov R.N., Toth R.A., Vander Auwera J., Varanasi P., Wagner G. The HITRAN 2004 Molecular Spectroscopic Database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2004. (accepted)
5. Partridge H., Schwenke D.W. Determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive «*ab initio*» calculations and experimental data // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 4618–4639.
6. Tsoo C.J., Cornutte B. Line-widths of pressure-broadening spectral lines // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1961. V. 2. P. 41–91.
7. Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Стройнова В.Н.. Анализ влияния колебательного возбуждения на полуширины линий  $\text{H}_2\text{O}$  полос  $\nu_2$  // Оптика и спектроскопия. 1988. Т. 64. С. 517–520.
8. Gamache R.R., Davies R.W. Theoretical calculations of  $\text{N}_2$ -broadened halfwidths of  $\text{H}_2\text{O}$  using quantum transfer Fourier theory // Appl. Opt. 1983. V. 22. P. 4013–4019.
9. Mandin J.-Y., Camy-Peyret C., Flaud J.-M., Chevillard J.-P. Measurements and calculations of self-broadening coefficients of lines belonging to the  $2\nu_2$ ,  $\nu_1$  and  $\nu_3$  bands of  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  // Can. J. Phys. 1982. V. 60. P. 94–101.
10. Mandin J.-Y., Chevillard J.-P., Camy-Peyret C., Flaud J.-M. The high-resolution spectrum of water vapour between 13200 and 16500  $\text{cm}^{-1}$  // J. Mol. Spectrosc. 1986. V. 116. P. 167–190.
11. Bykov A.D., Makushkin Yu.S., Ulenikov O.N. The vibrational analysis of  $\text{H}_2\text{O}$  // J. Mol. Spectrosc. 1983. V. 99. P. 221–227.

12. *Camy-Peyret C., Flaud J.-M.* Molecular spectroscopy: modern research. Academic Press. 1985. V. III. Chapter 2. P. 70–109.
13. *Clough S.A., Beers Y., Klein G.P., et al.* Dipole moment of water from Stark measurements of H<sub>2</sub>O, HDO, D<sub>2</sub>O // J. Chem. Phys. V. 59. P. 2254–2259.
14. *Grossmann B.E., Browell E.V.* Water vapour line broadening and shifting by air, nitrogen, oxygen, and argon in the 720 nm wavelength region // J. Mol. Spectrosc. 1989. V. 138. P. 562–595.
15. *Grossmann B.E., Browell E.V.* Spectroscopy of water vapor in the 720-nm wavelength region: line strengths, self-induced pressure broadenings and shifts, and temperature dependence of linewidths and shifts // J. Mol. Spectrosc. 1989. V. 136. P. 264–294.
16. *Lynch B., Gamache R.R., Neshiba S.P.* N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> induced halfwidths and line shifts of water vapor transitions in the (301)←(000) and (221)←(000) bands // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1998. V. 59. P. 595–613.
17. *Robert D., Bonamy J.* Short range force effects in semiclassical molecular broadening calculations // J. Phys. (Paris). 1979. V. 40. P. 923–943.
18. *Labany B., Bonamy J., Robert D., Hartmann J.-M., Taine J.* Collisional broadening of rotation-vibration lines for asymmetric top molecules. II. Theoretical model for both distant and close collisions // J. Chem. Phys. 1986. V. 84. P. 4256–4267.
19. *Стройнова В.Н.* Численный анализ коэффициентов уширения и сдвига колебательно-вращательных линий водяного пара: Дис. ... к.ф.-м.н. Томск: ИОА СО РАН, 1991. С. 35–39.

***V.N. Stroinoва. Calculation of the broadening coefficient of H<sub>2</sub>O absorption lines in the range of 13550–13950 cm<sup>-1</sup>.***

The calculated broadening coefficients are presented for 164 H<sub>2</sub>O lines broadened by the pressure of air, nitrogen, oxygen, and water vapour. The calculations are made using the Anderson–Tsao–Curnutte technique, supplemented with the intramolecular interactions and Maxwell distribution for the relative velocity. A good agreement with the experimental results is obtained for all H<sub>2</sub>O lines.