

ПАРАМЕТРЫ ЛИНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ ВОДЫ, ИНДУЦИРОВАННЫХ ДАВЛЕНИЕМ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА, В ИК СПЕКТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

**ДЕЙЧУЛИ В.М.(1), ПЕТРОВА Т.М.(1), СОЛОДОВ А.А.(1),
СОЛОДОВ А.М.(1), ФЕДОРОВА А.А.(2)**

**(1) ИНСТИТУТ ОПТИКИ АТМОСФЕРЫ ИМ. В.Е. ЗУЕВА СО РАН, ТОМСК,
РОССИЯ**

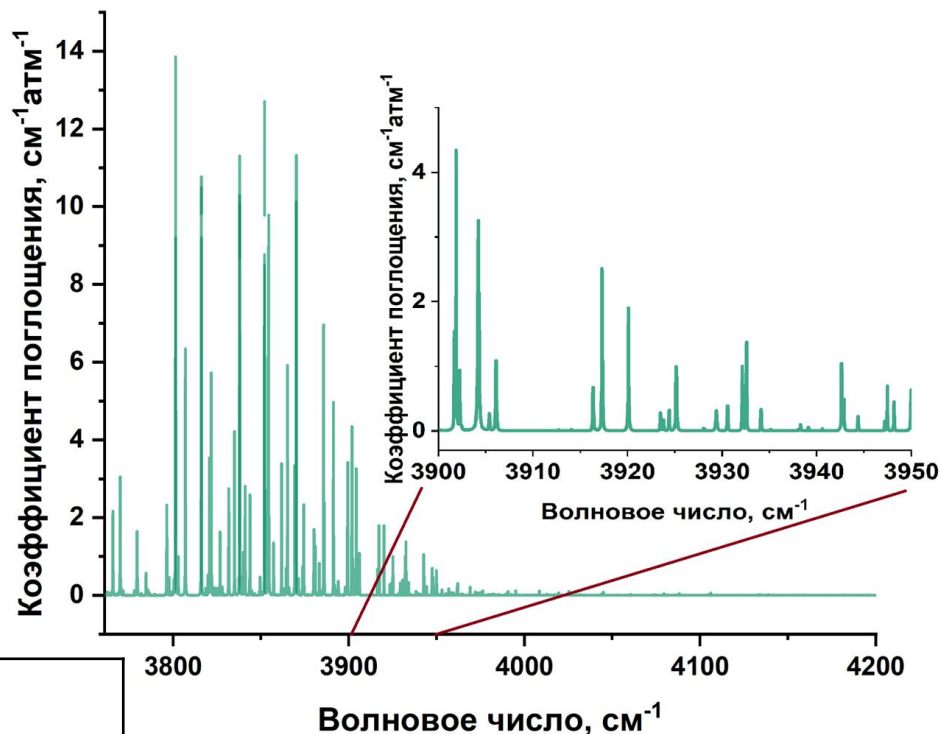
**(2) ИНСТИТУТ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ РАН, МОСКВА,
РОССИЯ**

*e-mail: dvm91@yandex.ru, tanja@iao.ru, solodov@iao.ru, asolodov@iao.ru,
anna.fedorova.2009@gmail.com*

- **ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ГАЗОВ (H_2O , CO_2 , HDO , O_2 , CH_4 И ДР.) В АТМОСФЕРАХ ПЛАНЕТ ПРИМЕНЯЮТСЯ МЕТОДЫ ИК СПЕКТРОСКОПИЯ, ГДЕ В КАЧЕСТВЕ ИСХОДНОЙ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ ИСПОЛЬЗУЮТСЯ БАЗЫ ДАННЫХ HITRAN, GEISA И ДР [1, 2]. ДАННЫЕ БАЗЫ АДАПТИРОВАНЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ. В ОТЛИЧИЕ ОТ ЗЕМЛИ АТМОСФЕРА МАРСА И ВЕНЕРЫ СОСТОЯТ В ОСНОВНОМ ИЗ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА, СОДЕРЖАНИЕ CO_2 ОКОЛО 96%. В СВЯЗИ С ЭТИМ НЕОБХОДИМЫ ДАННЫЕ ДЛЯ УШИРЯЮЩЕГО ГАЗА ТАКОГО, КАК CO_2 .**
- **В НАСТОЯЩЕЕ ВРЕМЯ ИМЕЕТСЯ ВСЕГО НЕСКОЛЬКО РАБОТ, ПОСВЯЩЕННЫХ ИССЛЕДОВАНИЯМ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ ДЛЯ СИСТЕМЫ H_2O – CO_2 [2–7]. ТАК ТОЛЬКО В 2019 ГОДУ БЫЛА ОПУБЛИКОВАНА РАБОТА [3], В КОТОРОЙ ДЛЯ ДВУХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ДИАПАЗОНОВ 2.7 μM ($3060\text{--}4370\text{ CM}^{-1}$) И 6 μM ($1350\text{--}2300\text{ CM}^{-1}$) БЫЛИ ПРОВЕДЕНЫ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ УШИРЕНИЯ И СДВИГА. ДО ЭТОГО БЫЛИ ПРОВЕДЕНЫ ЭКСПЕРИМЕНТЫ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ 2.7 μM [4]. АВТОРАМИ СТАТЬИ БЫЛИ ЗАРЕГИСТРИРОВАНЫ КОЭФФИЦИЕНТЫ УШИРЕНИЯ И СДВИГА В ОБЛАСТИ $10100\text{--}10800\text{ CM}^{-1}$ [7].**
- **ИЗМЕРЕНИЯ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ ВОДЫ БЫЛИ ВЫПОЛНЕНЫ В ИОА СО РАН С ПОМОЩЬЮ ФУРЬЕ-СПЕКТРОМЕТРА BRUKER IFS 125HR [8]. ОПТИЧЕСКАЯ КЮВЕТА ДЛИНОЙ 22 CM РАЗМЕЩАЛАСЬ ВНУТРИ КЮВЕТНОГО ОТДЕЛЕНИЯ СПЕКТРОМЕТРА.**

ЭКСПЕРИМЕНТ

В областях 3760–4200 и 6760–7430 см^{-1} были выполнены измерения спектров поглощения молекулы воды, уширенных давлением CO_2 , с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR [8].



Пример спектра поглощения $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_{2p}$

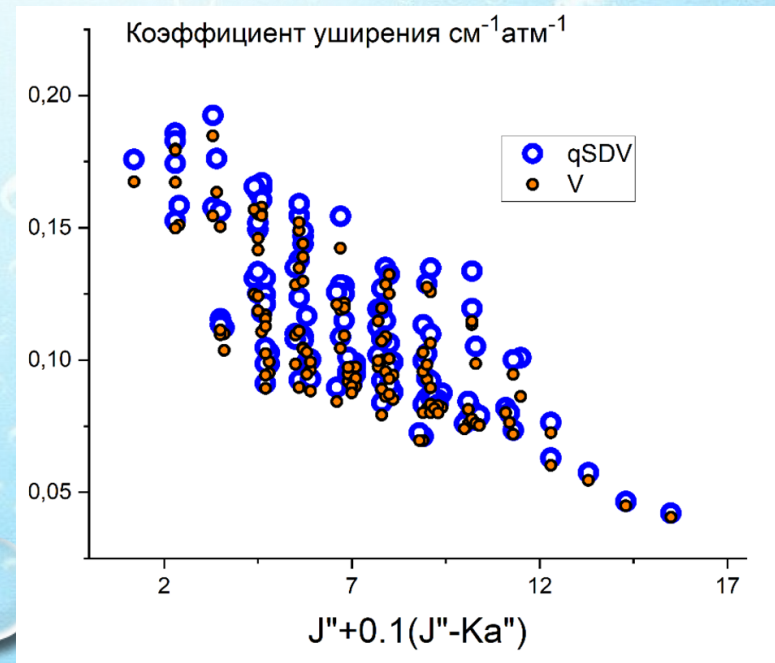
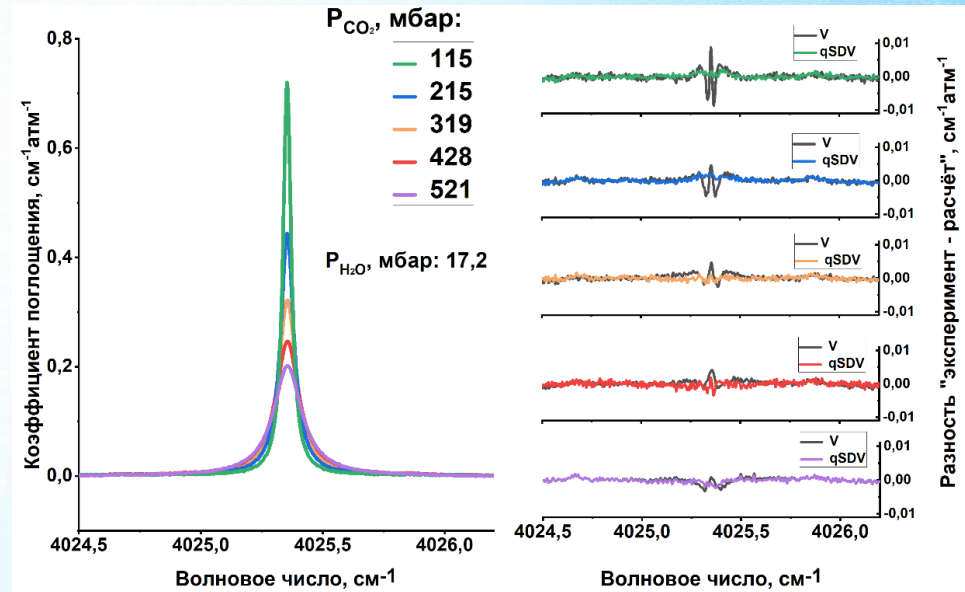
Условия эксперимента

№	Спектр. Разрешение, см^{-1}	Давление H_2O , атм	Давление CO_2 , атм	T, К
1	0.008	0.0167	0.096	296.3
2	0.010	0.0179	0.221	296.3
3	0.010	0.0169	0.315	296.2
4	0.010	0.0186	0.404	296.2
5	0.010	0.0186	0.496	296.4

Определение параметров линий поглощения молекулы воды

Для определения параметров линий поглощения молекулы воды использовались две модели формы контура – традиционный контур Фойгта и квадратичный профиль Фойгта, учитывающий зависимость уширения от скоростей сталкивающихся молекул (qSDV). В этом профиле учитывается квадратичная зависимость коэффициентов уширения и сдвига от относительной скорости сталкивающихся молекул. Для этого с помощью нелинейного метода наименьших квадратов применялась процедура одновременной обработки спектров, зарегистрированных при разных экспериментальных условиях [Щербаков А. П. Оптика атмосферы и океана. 1997. Т.10. N. 8. С. 947–958]. Определялись следующие параметры спектральных линий: положение центра, интенсивность, коэффициенты самоуширения и коэффициенты уширения, зависимости полуширины от скоростей, сдвига, индуцированные давлением углекислого газа.

$$\langle \gamma_{qSDV} / \gamma_V \rangle = 5,2\%.$$



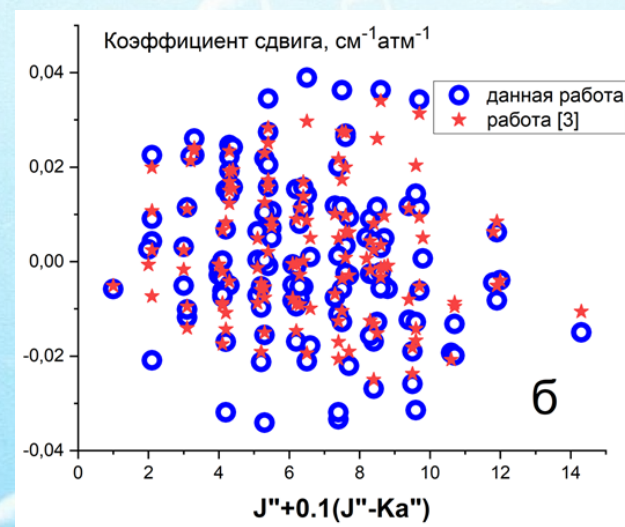
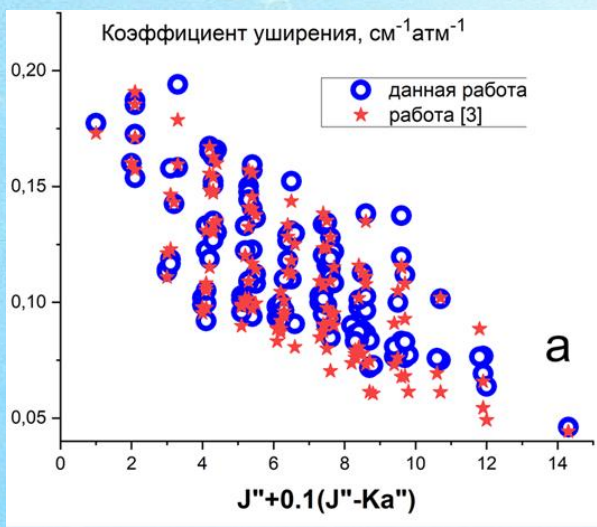
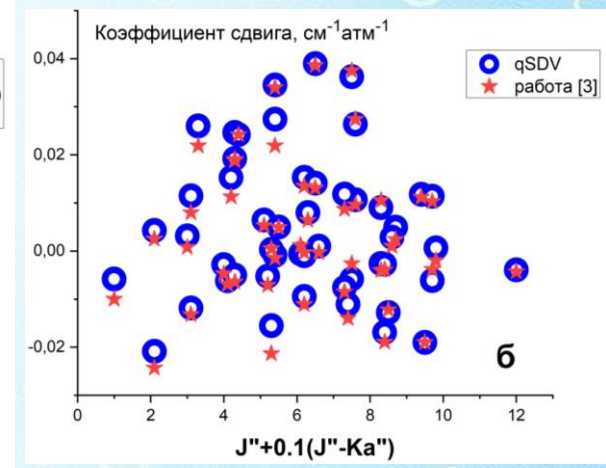
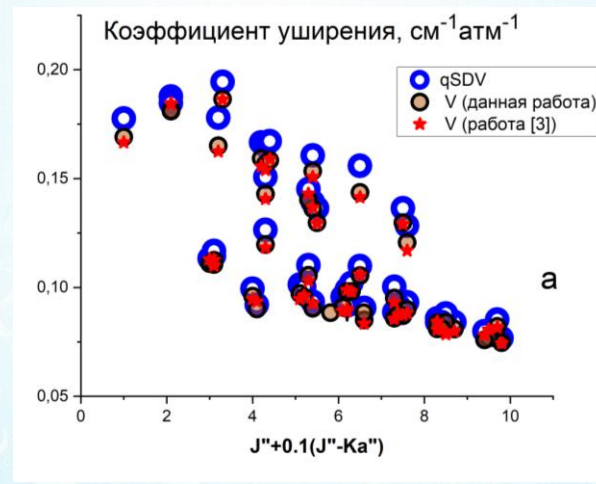
Спектральная область 3760–4200 см⁻¹ (Исследовано 130 линий поглощения H₂O полос ν_1 и ν_3)

Сравнение с экспериментом

$$\langle \gamma_{qSDV_{данная\ работа}} / \gamma_{V[3]} \rangle = 1.04,$$

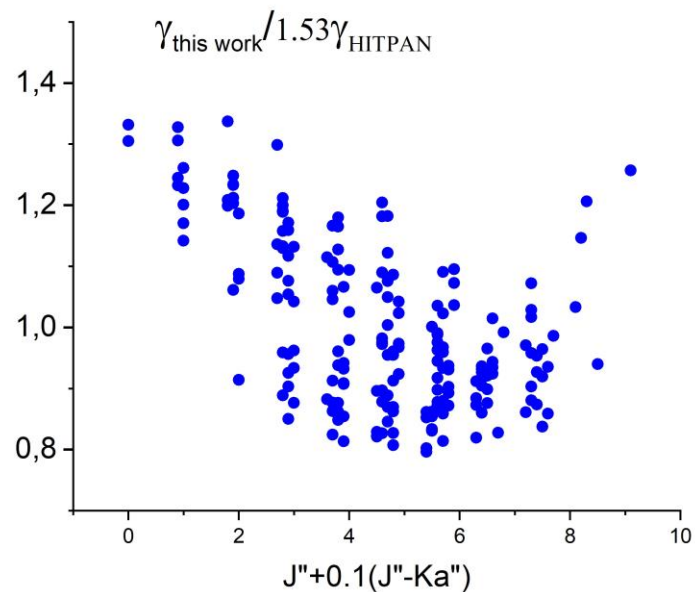
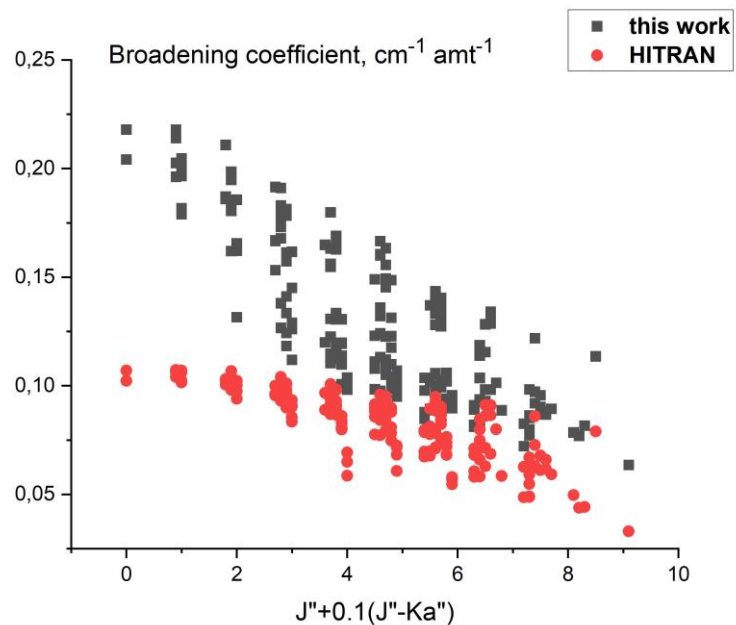
$$\langle \gamma_{V_{данная\ работа}} / \gamma_{V[3]} \rangle = 1.00,$$

$\delta_{данная\ работа} / \delta_{[3]}$ меняется от **-3.31** до **3.89**



Сравнение с расчетом Среднеквадратичное отклонение для коэффициентов уширения составило 0.0086 см⁻¹атм⁻¹, для коэффициентов сдвига – 0.005 см⁻¹атм⁻¹.

- **Спектральная область $6760\text{--}7430\text{ cm}^{-1}$ (Исследовано 170 линий поглощения H_2O полос $\nu_1 + \nu_3$, $2\nu_2 + \nu_3$ и $2\nu_1$)**



Сравнение значений коэффициентов уширения линий поглощения молекулы воды с данными [1]

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- В спектральных областях 3760–4200 и 6760–7430 см⁻¹ были определены параметры наиболее сильных линий поглощения молекулы воды. Полученные с помощью контура Фойгта коэффициенты уширения и сдвига находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными работы [3]. Использование для аппроксимации линий поглощения молекулы H₂O, уширенных давлением CO₂, современных моделей формы контура позволило получить новые высокоточные значения коэффициентов уширения и сдвига, которые описывают спектры на уровне экспериментальной погрешности.
- Показано, что наблюдается отличие коэффициентов уширения линий поглощения молекулы воды, уширенных давлением CO₂, от коэффициентов, приведенных в базе данных HITRAN (уширение воздухом), которое меняется с изменением волнового числа.
- Полученные в работе новые параметры линий поглощения молекулы воды, уширенных давлением углекислого газа, позволят более точно определять концентрацию H₂O в углекислотных атмосферах планет,
- Исследование проведено в рамках проекта РФФ (грант № 22-22-00800)

ЛИТЕРАТУРА

- 1. GORDON E., ROTHMAN L.S., HARGREAVES R.J. ET AL. //J. QUANT. SPECTROSC. RADIAT. TRANSE. 2022.V. 277. P. 107949
- 2. JACQUINET-HUSSON N., ARMANTE R., SCOTT N.A. ET AL //J. MOL. SPECTROSC. 2016. V. 327. P. 31.
- 3. RÉGALIA L., COUSIN E., GAMACHE R.R., VISPOEL B., ROBERT S., THOMAS X. //J. QUANT. SPECTROSC. RADIAT. TRANSE. 2019. V. 231. P. 126
- 4. BROWN L.R., HUMPHREY C.M., GAMACHE R.R. //J. MOL. SPECTROSC. 2007. V. 246 P. 1
- 5. GAMACHE R.R., NESHYBA S.P., PLATEAUX J.J., BARBE A., REGALIA L., POLLACK J.B. //J. MOL. SPECTROSC. 1995. V.170 P. 131
- 6.ЛАВРЕНТЬЕВА Н.Н., ВОРОНИН Б.А., ФЕДОРОВА А.А. СПИСОК ЛИНИЙ H216O ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ АТМОСФЕР ВЕНЕРЫ И МАРСА // ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИИ 2015. Т.118. № 1. С. 11–18.
- 7. BORKOV Y.G., PETROVA T.M., SOLODOV A.M., SOLODOV A.A. // J. MOL. SPECTROSC. 2018. V. 344 P. 39
- 8. PONOMAREV YU.N., SOLODOV A.A., SOLODOV A.M., PETROVA T.M., NAUMENKO O.V.// J. QUANT. SPECTROSC. RADIAT. TRANSE. 2016. V. 177 P. 253