

ПАРАМЕТРЫ ЛИНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ КИСЛОРОДА, ИНДУЦИРОВАННЫХ ДАВЛЕНИЕМ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА, В ОБЛАСТИ 13000–13260 CM^{-1}

**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,
fedorova@cosmos.com*

Brown LR, Plymate C. Experimental line parameters of the oxygen A band at 760 nm. J Mol Spectrosc 2000;199:166–79. doi:10.10

Predoi-Cross A, et al. Spectroscopic lineshape study of the self-perturbed oxygen A band. J Mol Spectrosc 2008;248:85–110.

Predoi-Cross A et al. Nitrogen-broadened lineshapes in the oxygen A band: experimental results and theoretical calculations. J Mol Spectrosc 2008;251:159–75.

Drouin BJ et al Multispectrum analysis of the oxygen A-band. J Quant Spectrosc Radiat Transf 2017;86:118–38.

Long DA, et al O2 A band line parameters to support atmospheric remote sensing. J Quant Spectrosc Radiat Transf 2010;111:2021–36.

Robichaud DJ et al. Experimental intensity and lineshape parameters of the oxygen A band using frequency-stabilized cavity ring-down spectroscopy. J Mol Spectrosc 2008;248:1–13.

Long DA et al O2 A band line parameters to support atmospheric remote sensing. Part II: The Rare Isotopologues. J Quant Spectrosc Radiat Transf 2011;112:2527–41.

Robichaud DJ et al High-precision pressure shifting measurement technique using frequency-stabilized cavity ring-down spectroscopy. J Quant Spectrosc Radiat Transf 2008;109:435–44.

Long DA et al Laboratory measurements and theoretical calculations of O2 A band electric quadrupole transitions. Phys Rev A 2009;80:12.

Havey DK et al Ultra-sensitive optical measurements of high-J transitions in the O2 A band. Chem Phys Lett 2009;483:49–54. 10.067.

Payne VH et al Absorption coefficient (ABSCO) tables for the Orbiting Carbon Observatories: Version 5.1.JQSRT 2020;155:1 07217.

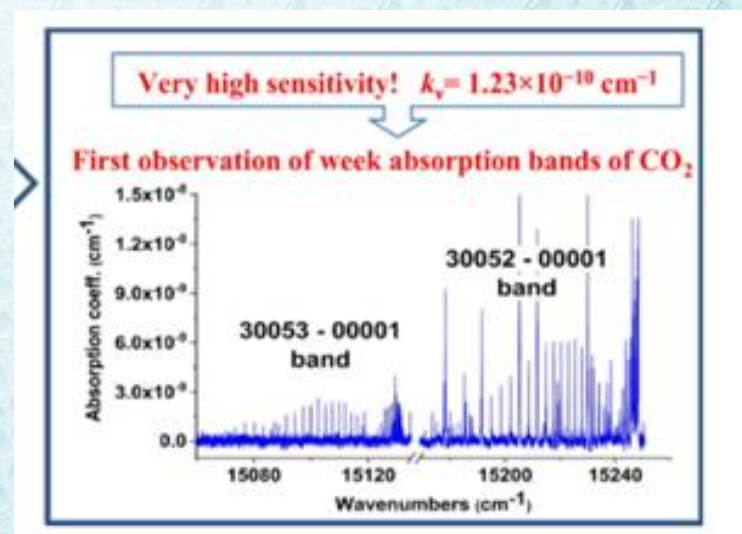
Pope RS et al Collision broadening of rotational transitions in the O2 A band by molecular perturber JQSRT 2000;64:363–77. [https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(99\)00109-0](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(99)00109-0)

Фурье-спектрометр Bruker IFS125 IR



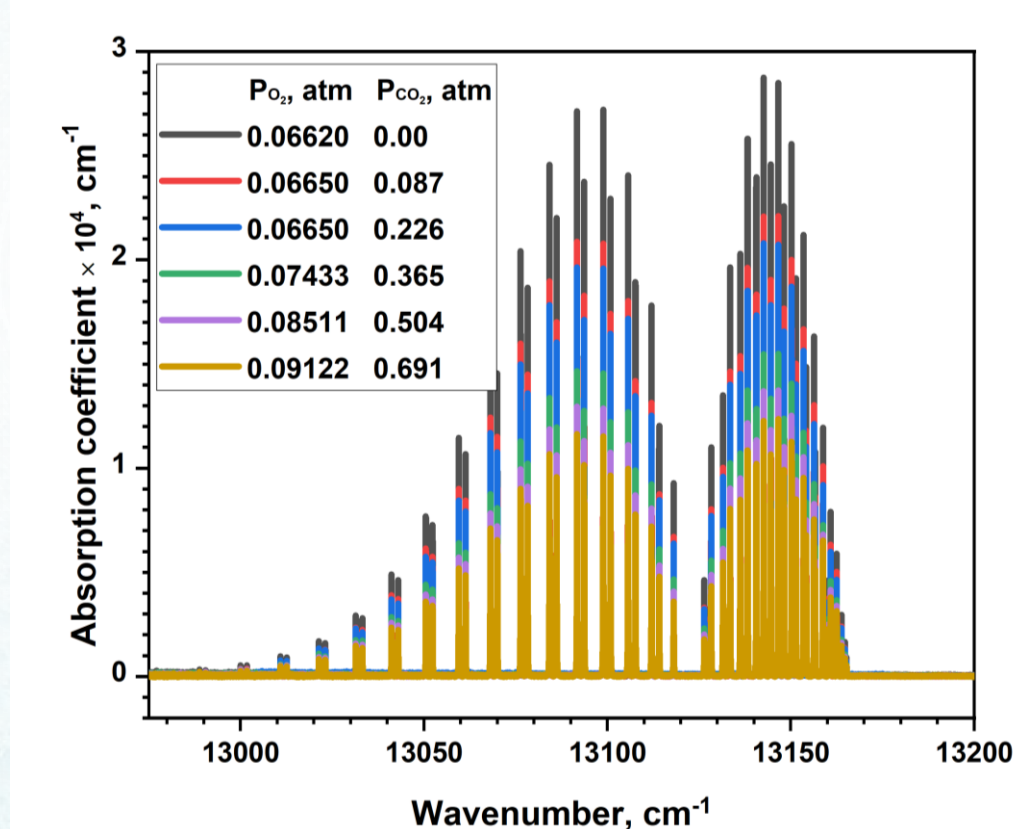
Параметры Фурье-спектрометра
Спектр. разрешение – 0.001 cm^{-1}
Спектр. диапазон – $800\text{-}30000 \text{ cm}^{-1}$
Три оптические многоходовые кюветы
 $L = \text{до } 1200 \text{ м, } 40 \text{ м и } 10 \text{ м}$

Deichuli VM, Petrova TM, Solodov AM,
Solodov AA, Starikov VI. Mol Phys 2023;121:5.
<https://doi.org/10.1080/00268976.2023.2216133>



ЭКСПЕРИМЕНТ

В области $13000\text{--}13200\text{ см}^{-1}$ были выполнены измерения спектров поглощения молекулы кислорода, уширенных давлением CO_2 , с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR [8].



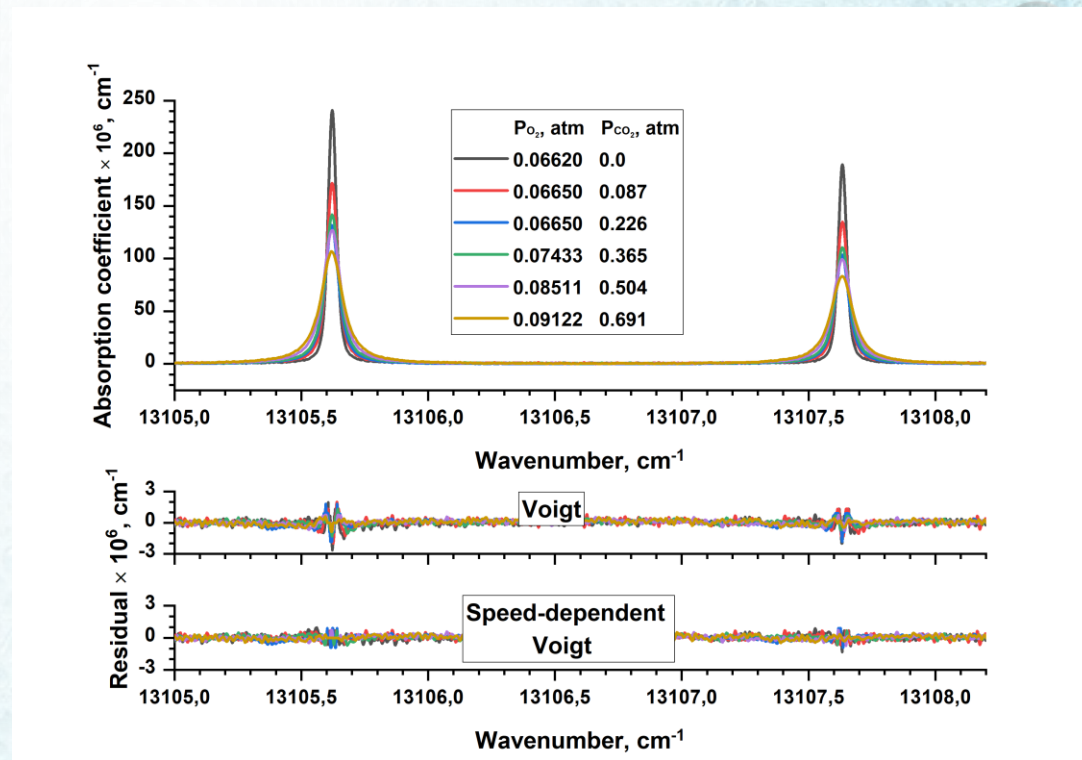
Условия эксперимента

Зарегистрированные спектра поглощения $\text{O}_2\text{-CO}_2$

Spectrum number	Spectral resolution, cm^{-1}	Partial pressure of O_2 , atm	Partial pressure of CO_2 , atm	Temperature, K	Recording duration, h
1	0.011	0.06650(2)	0	297.3(2)	12
2	0.013	0.06620(2)	0.087(1)	297.3(2)	12
3	0.013	0.06650(2)	0.226(1)	297.2(2)	12
4	0.015	0.07433(2)	0.365(1)	297.2(2)	13
5	0.015	0.08511(2)	0.504(1)	296.9(2)	13
6	0.016	0.09122(2)	0.691(1)	297.0(2)	13

Определение параметров линий поглощения кислорода

Использовались две модели формы контура – традиционный контур Фойгта и квадратичный профиль Фойгта, учитывающий зависимость уширения от скоростей сталкивающихся молекул (SDV). В этом профиле учитывается квадратичная зависимость коэффициентов уширения и сдвига от относительной скорости столк. 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, коэф-ты самоуширения и коэф-ты уширения, зависимости полуширины от скоростей, сдвига, индуцированные давлением углекислого газа.



$$\langle S_{SDV}/S_V \rangle = 1.007 \pm 0.003$$

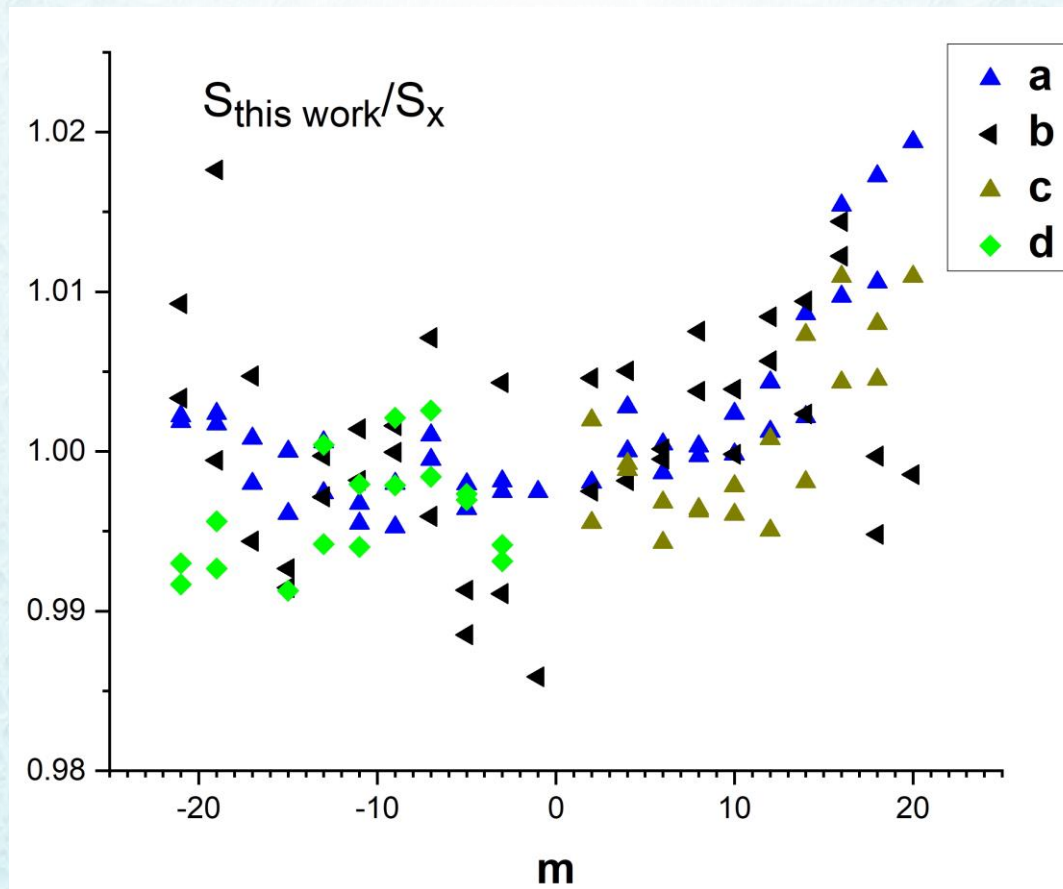
Ngo NH, Lisak D, Tran H, Hartmann J-M. JQSRT 2013;129:89–100

doi:10.1016/j.jqsrt.2013.05.034.

Tran H, Ngo NH, Hartmann J-M. JQSRT 2013;129:199–203. doi:10.1016/j.jqsrt.2013.06.015.

Сравнение интенсивностей линий поглощения O_2

Определены параметры около 40 наиболее сильных линий поглощения $^{16}O_2$ в $13000-13260\text{ cm}^{-1}$

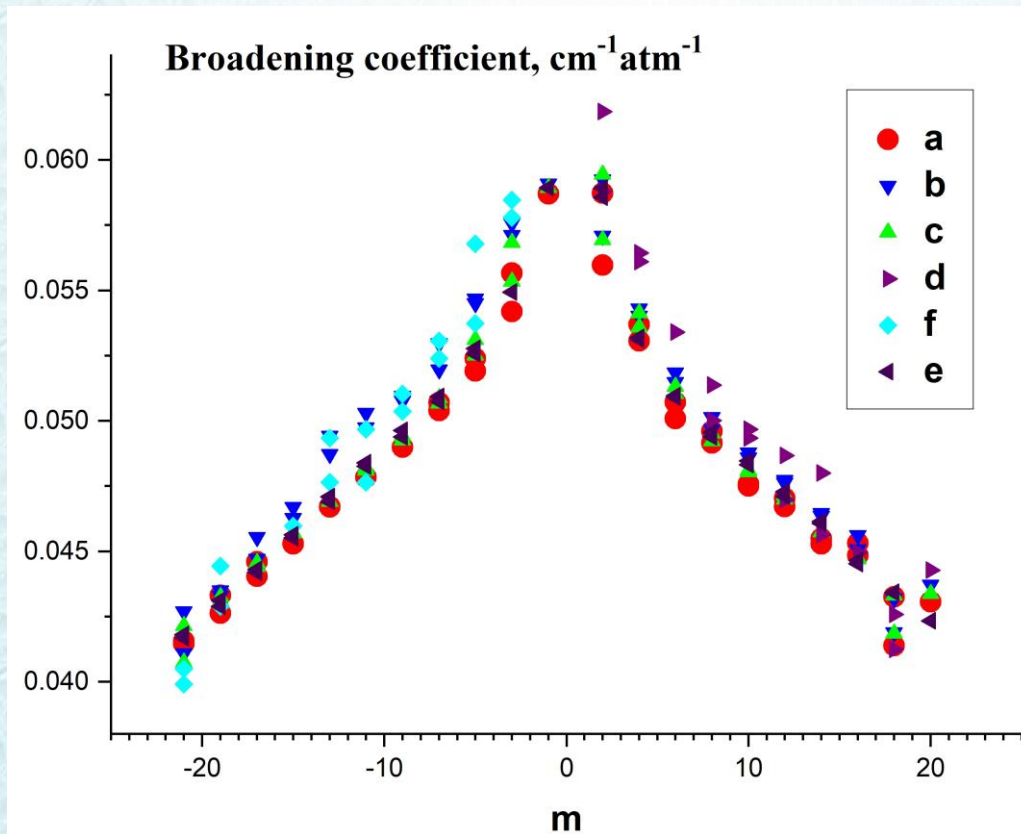


a – HITRAN, b – Predoi-Cross A. et al, c – Long D.A. et al, d – Robichaud D.J. et al .

$$S_{\text{this work}}/S_C = 1.0007 \pm 0.003 \quad S_{\text{this work}}/S_d = 0.996 \pm 0.003$$

$$S_{\text{this work}}/S_b = 1.001 \pm 0.005 \quad S_{\text{this work}}/S_a = 1.001 \pm 0.0007$$

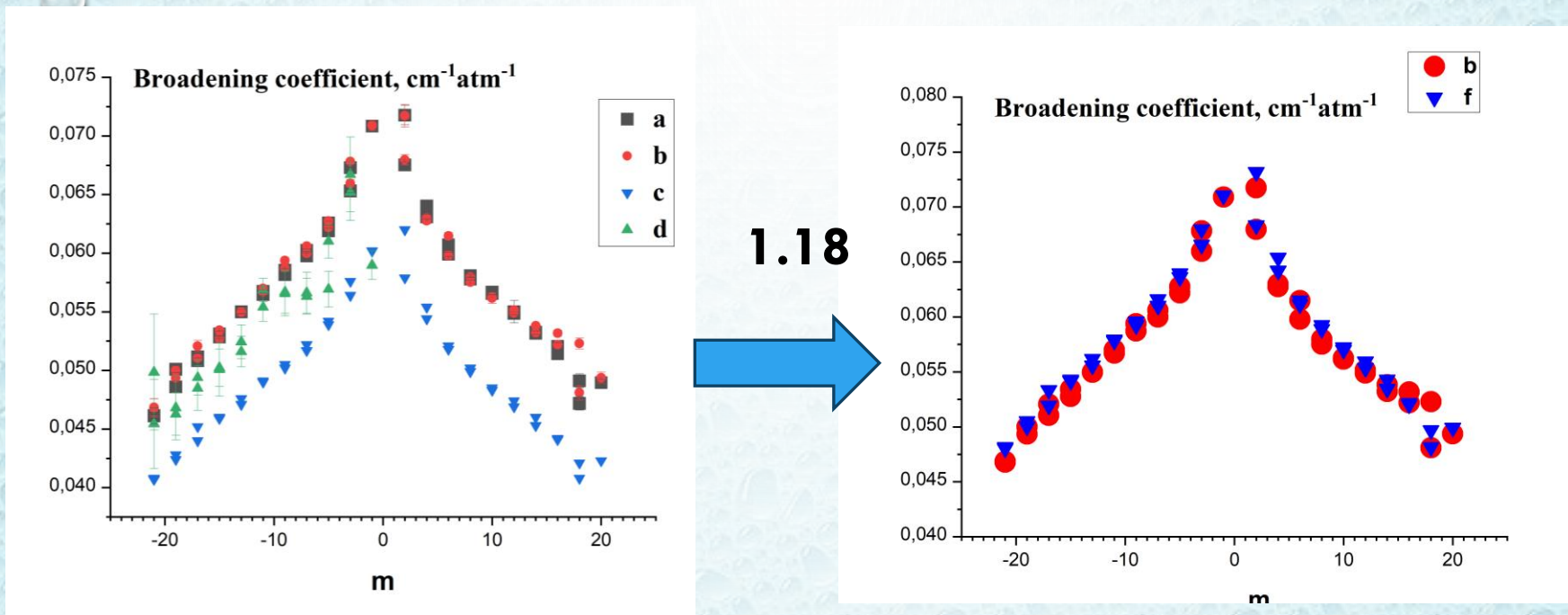
Сравнение коэффициентов самоуширения линий поглощения для O_2



a – данная работа, b – HITRAN, c – Drouin B.J. et al, d – Long D.A. et al, f – Robichaud D.J. et al, e – Predoi-Cross A. et al

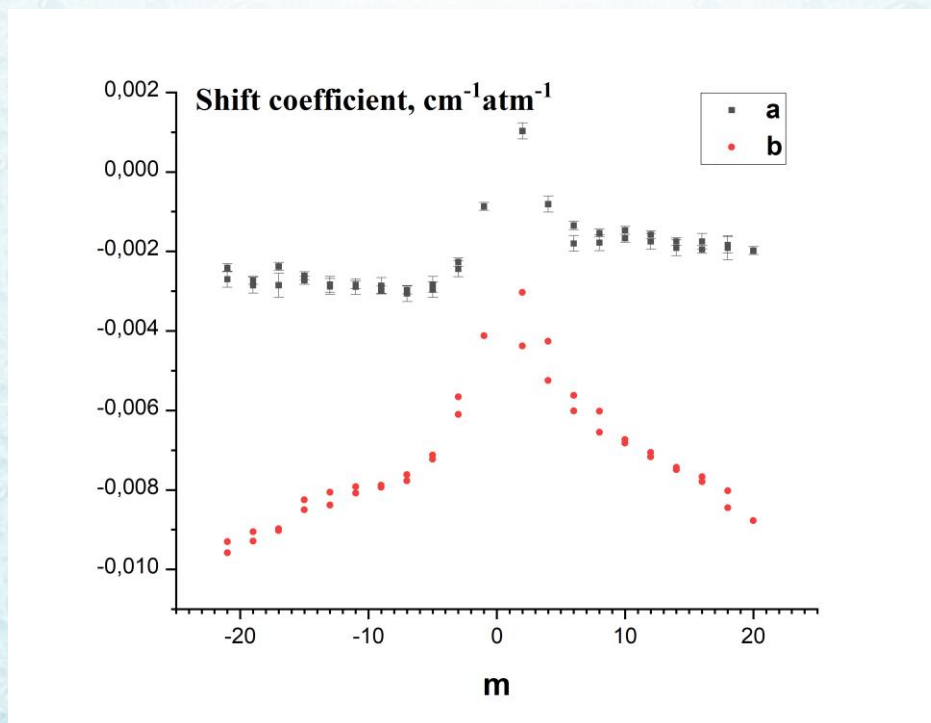
RMS наши измерения – Predoi-Cross A. et al – 1%, для остальных – 3%

Сравнение коэффициентов уширения линий поглощения для O_2



a – данная работа Vпрофиль (CO_2 - буферный газ), **b** – данная работа SDV профиль (CO_2 -буферный газ), **c** – Pore R.S. et al for V профиль (CO_2 -буферный газ). **d** – HITRAN (воздух -буферный газ), **f** -1.18* HITRAN

Сравнение коэффициентов сдвига линий поглощения для O_2



a – данная работа (CO_2 - буферный газ), **b** – HITRAN (воздух – буферный газ)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

• В спектральной области 13000-13260 см⁻¹ были определены параметры наиболее сильных линий поглощения молекулярного кислорода. 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.

• Полученные в работе новые параметры линий поглощения молекулы воды, уширенных давлением углекислого газа, позволят более точно определять концентрацию O₂ углекислотных атмосферах планет,

• Исследование проведено в рамках проекта РФФ (грант № 22-22-00800)