

Температурная зависимость коэффициентов уширения линий SO_2 давлением CO_2 в полосе $\nu_1 + \nu_3$

© А.С. Дударёнок, Т.А. Невзорова, Н.Н. Лаврентьева

Институт оптики атмосферы им. В.Е.Зуева СО РАН,
Томск, Россия

e-mail: dudaryon@iao.ru

Поступила в редакцию 28.04.2025 г.

В окончательной редакции 28.04.2025 г.

Принята к публикации 08.06.2025 г.

Получена температурная зависимость уширения линий R -ветви оксида серы давлением углекислого газа в полосе $\nu_1 + \nu_3$. Коэффициенты уширения линий вычислены в диапазоне 150–700 К с использованием полуэмпирического метода, параметры которого найдены в результате анализа экспериментальных данных. Значения температурных показателей рассчитаны с помощью степенного закона.

Ключевые слова: параметры контура линий, уширение линий, температурный показатель, оксид серы, углекислый газ, атмосфера Марса, атмосфера Венеры.

DOI: 10.61011/OS.2025.07.61104.7896-25

1. Введение

Параметры контура (коэффициенты уширения и сдвига) линий оксида серы давлением углекислого газа необходимы для изучения атмосфер Земли и планет земной группы. Первостепенное значение они имеют для мониторинга вулканической активности, особенно на таких планетах как Венера и Марс, так как их атмосферы состоят в основном из углекислого газа (95.3 и 96.5% соответственно) [1–3], а продукты извержения вулканов содержат SO_2 [3–5]. Последние исследования экзопланет предсказывают CO_2 в качестве доминирующей компоненты в их атмосферах [6].

В атмосфере Земли [7] концентрация оксида серы увеличивается благодаря антропогенной деятельности: кроме вулканической активности [8] существенный вклад в загрязнение планеты дают предприятия тяжелой промышленности [9]. Чтобы исследовать эти процессы, необходимо знать не только сами параметры контура (коэффициенты уширения и сдвига линий), но и их распределение в температурных диапазонах земной атмосферы (200–400 К) [10,11], атмосфер Венеры и Марса (150–700 К) [12,13].

На данный момент температурная зависимость уширения линий оксида серы давлением углекислого газа исследовалась только в [14], где с помощью полуэмпирического (ПЭ) метода [15] были рассчитаны данные для диапазона 150–300 К. Параметры полуэмпирической модели были определены, опираясь на экспериментальные данные [16], температурная зависимость была получена с использованием простого степенного закона. Заметим, что в [14] коэффициенты температурной зависимости определены только для 41 перехода в полосе ν_1 .

В нашей работе для анализа температурной зависимости коэффициентов уширения линий $\text{SO}_2\text{--CO}_2$ по полу-

эмпирическому методу вычислены данные при $T = 150, 200, 250, 296, 350, 400, 450, 500, 550, 600, 650, 700$ К для всех переходов R -ветви из работы [17]. Параметры полуэмпирической модели были получены нами ранее в расчетах при комнатной температуре [18,19].

Статья организована следующим образом. В разд. 2 приведены основные положения полуэмпирического метода и модели температурной зависимости. В разд. 3 представлены рассчитанные параметры температурной зависимости, а также сравнение и обсуждение результатов. В последнем разделе подведены итоги и сформулированы перспективы дальнейших исследований.

2. Теоретический подход и детали вычислений

Расчеты коэффициентов уширения линий для системы $\text{SO}_2\text{--CO}_2$ проводились с помощью полуэмпирического метода [15], развитого для случая сильных межмолекулярных взаимодействий. Поскольку молекула SO_2 является полярной асимметричной молекулой с достаточно большим дипольным моментом (1.61 D [20]), а молекула CO_2 — линейная неполярная, имеющая большой квадрупольный момент $4.02 \text{ D}\cdot\text{\AA}$ [21], между ними наблюдается сильное диполь-квадрупольное взаимодействие. Для расчета уровней энергии оксида серы в основном состоянии и в состоянии (101) использовалась модель эффективного гамильтониана, спектроскопические постоянные модели взяты из работ [22–24].

Полуэмпирический метод детально описан в работе [15], в нем используется корректирующий фактор — поправочный множитель к функции эффективности взаимодействий. Для случая $\text{SO}_2\text{--CO}_2$ корректирующий

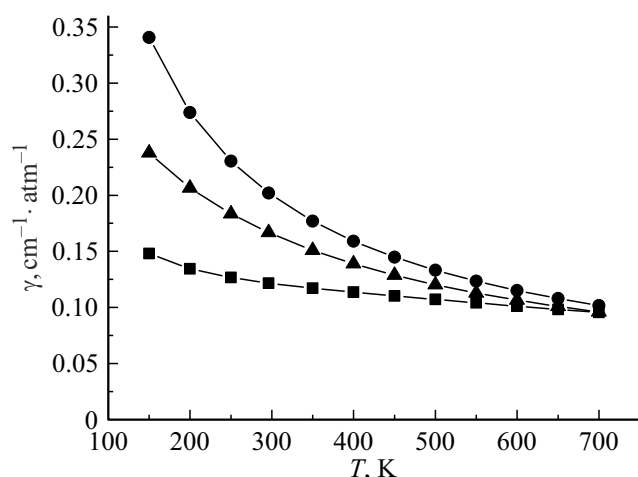


Рис. 1. Вычисленные коэффициенты уширения линий 303 ← 202 (кружки), 311021 ← 301020 (треугольники), 25187 ← 24186 (квадраты) в зависимости от температуры.

фактор выбран в виде трехпараметрического выражения:

$$C(JK_a) = \frac{c_1 + c_3 K_a}{c_2 \sqrt{J + 1}}, \quad (1)$$

где c_1 , c_2 , c_3 — подгоночные параметры [19]. Для определения параметров полуэмпирической модели выбраны полуширины линий R-ветви из работы [17].

При выполнении вычислений учитывались диполь-квадрупольная, квадруполь-квадрупольная, а также индукционная и дисперсионная части межмолекулярного потенциала. Очевидно, что основной вклад в уширение углекислым газом линий оксида серы дает диполь-квадрупольное взаимодействие, тогда как вклады квадруполь-квадрупольного и поляризационного взаимодействий составляют менее 2 и 0.2% соответственно. Необходимые при вычислениях параметры межмолекулярного потенциала взаимодействия молекул оксида серы и диоксида углерода приведены в работе [19].

Для описания температурной зависимости коэффициентов уширения линий $\text{SO}_2\text{—CO}_2$ использовался простой степенной закон, когда зная полуширину линии при опорной температуре и при нескольких других, можно получить коэффициент температурной зависимости (температурный показатель, температурная экспонента), используя выражение

$$\gamma = \gamma_0 \left(\frac{T_0}{T} \right)^N, \quad (2)$$

где γ — коэффициент уширения при температуре T , γ_0 — коэффициент уширения при опорной температуре $T_0 = 296$ К, N — температурный показатель. Значение показателя N очень чувствительно к точности определения полуширин особенно для узких линий: небольшая ошибка в определении величины γ для узкой линии приводит к большим погрешностям величины N . Также

следует заметить, что показатель N не зависит от изменения корректирующего фактора из формулы (1). Используя это свойство, мы можем использовать параметры полуэмпирической модели, определенные при комнатной температуре, для вычисления коэффициентов уширения линий для других значений температуры.

В работе [25] формула (2) в случае уширения линий воды давлением различных буферных газов применяется для температур, начиная с 30 К. Обычно предполагается, что это выражение справедливо для небольшого интервала температуры вблизи $T_0 = 296$ К и перестает работать при низких температурах, когда проявляется ограничение на полуклассический подход, использование которого предполагает справедливость приближения классических траекторий сталкивающихся частиц. Это означает, что рассматриваемая температура (другими словами, кинетическая энергия относительного движения молекул) должна быть достаточно высокой, чтобы разделить поступательные и внутренние степени свободы. В качестве грубого критерия температурного предела обычно используется глубина ϵ изотропного межмолекулярного потенциала (выраженная в кельвинах). Нижний температурный предел обычно не рассматривается как строгий запрет, а скорее, как рекомендация. Если требуются данные для более низкой температуры, то в отсутствие продвинутых квантово-механических расчетов с уточненными поверхностями потенциальной энергии, можно использовать этот подход.

Максимальные значения N (наблюдаемые при низких J) согласуются с так называемыми „резонансными“ вкладами теории Андерсона—Цао—Карната [26]: $N_{\text{res}} = 0.5 + (n - 1)^{-1}$, связанными с ведущими диполь-квадрупольным ($n = 4$, $N_{\text{res}} = 0.83$) и квадруполь—квадрупольным ($n = 5$, $N_{\text{res}} = 0.75$) взаимодействиями в системе сталкивающихся молекул. Детали зависимостей от J для каждого фиксированного K_a дополнительно зависят от кинетических и нерезонансных членов: $N = N_{\text{res}} + N_{\text{kin}} + N_{\text{nres}}$ [27]. Второе слагаемое определяется столкновениями, происходящими с изменением скорости и, как ожидается, будет небольшим для активной молекулы. Последнее происходит из-за нарушения условий резонанса и его значение может быть отрицательным при малых n (например, $n = 4$ в случае уширения линий H_2O воздухом и приводит к получению отрицательных температурных показателей [28]). Анализ, проведенный для систем $\text{N}_2\text{O—N}_2/\text{O}_2$ [29] и для $\text{CH}_3\text{I—N}_2$ [30] свидетельствует в пользу того, что N_{nres} обусловлено скорее диполь-квадрупольными, чем квадруполь-квадрупольными силами.

3. Обсуждение полученных результатов

Для анализа температурной зависимости коэффициентов уширения линий $\text{SO}_2\text{—CO}_2$ по полуэмпирическому

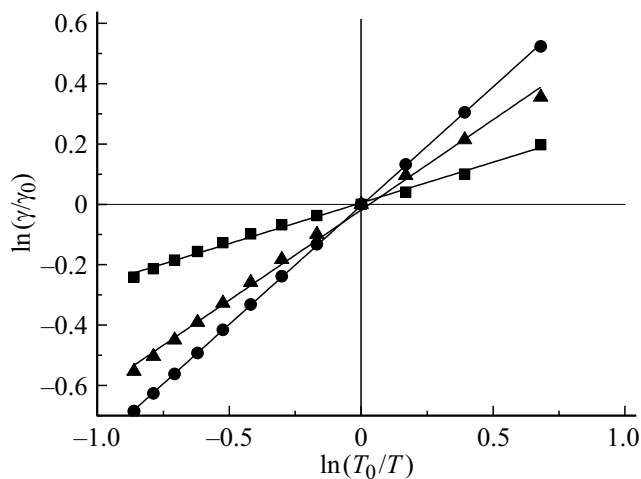


Рис. 2. Линейная регрессия коэффициентов уширения $\text{SO}_2\text{--CO}_2$ в логарифмических координатах для линий $303 \leftarrow 202$ (кружки), $311021 \leftarrow 301020$ (треугольники), $25187 \leftarrow 24186$ (квадраты) в полосе $\nu_1 + \nu_3$ в интервале температур 150–700 К.

методу были вычислены данные при $T = 150, 200, 250, 296, 350, 400, 450, 500, 550, 600, 650, 700$ К для всех переходов в R-ветви перпендикулярной полосы $\nu_1 + \nu_3$ из работы [17]. Значения подгоночных параметров были определены нами в расчетах при комнатной температуре [18,19].

На рис. 1 показаны типичные зависимости полуширин при изменении температуры на примере трех линий — с малым, средним и большим значениями вращательного квантового числа K_a . Видно, что коэффициенты уширения плавно уменьшаются с ростом температуры и сходятся к постоянной величине.

Представим зависимости отношения полуширин линий γ/γ_0 от отношения температур T_0/T в логарифмических координатах для широкого интервала температур, захватывающего температуры атмосфер Земли (200–400 К) [10,11], Венеры (150–700 К) [12] и Марса (150–300 К) [13] (рис. 2). Отрицательные значения по оси абсцисс соответствуют области высоких температур, положительные — области низких температур. Видно, что зависимости на рис. 2 хорошо описываются прямыми линиями, тангенсы угла наклона которых являются температурными показателями (2). Экспоненты N были определены путем подгонки по методу наименьших квадратов.

Вычисленные по формуле (2) показатели N для интервала температур $T = 150\text{--}700$ К, упорядоченные по увеличению частоты перехода, представлены на рис. 3, а, их значения находятся в интервале от 0.255 до 0.791. Полный набор рассчитанных данных может быть запрошен у авторов статьи, частично данные приведены в таблице. Мы рассортировали все переходы на группы с одинаковыми значениями вращательных квантовых чисел K_a от минимального до максималь-

ного, внутри каждой группы упорядочили переходы по увеличению квантового числа J (рис. 3, б), например, число J изменяется от 2 до 68 при $K_a = 0$, от 10 до 59 при $K_a = 10$, от 24 до 45 при $K_a = 18$. Видно, что температурные экспоненты плавно меняются при изменении квантового числа полного углового момента для фиксированного значения K_a . В зависимости от квантового индекса K_a коэффициенты температурной зависимости для полуширин линий варьируют достаточно сильно: например, $N = 0.791$ для полуширины линии $303 \leftarrow 202$, $N = 0.615$ для $311021 \leftarrow 301020$, $N = 0.265$ для $25187 \leftarrow 24186$. По-видимому, минимальные значения показателей для случая больших K_a обуславливаются доминирующим отрицательным вкладом от резонансных столкновений.

При сравнении значений полуширин линий, восстановленных по формуле (2) и вычисленных по полуэмпирическому методу, получили хорошее совпадение результатов для всех температур, в среднем расхождение $\sim 1.0\%$ (рис. 4). Чем больше рассматриваемая температура отличается от опорной, тем больше ошибка восстановления. К примеру, в среднем для всего списка переходов расхождение рассчитанных и восстановленных полуширин при 200 К составляет 1.7%, тогда как при 150 К — 4.0%, при 400 К — 0.4%, при 700 К — 1.6%. Отклонения при 150 и 700 К достигают 15.8 и 6.3% соответственно. При 200 К расхождение более 5% (максимальное 6.8%) имеет место только для 25 (из 621) переходов. Максимальные отклонения возникают для $J = K_a$, $K_a = 8\text{--}14$, когда линии относительно узкие. Для них характерны относительно небольшие значения коэффициента температурной зависимости полуширины и большие значения среднеквадратичного отклонения, полученные при применении метода наименьших квадратов. Отметим, что для случаев больших отклонений зависимости, показанные на рис. 2, не описываются линейной функцией во всем температурном интервале 150–700 К, однако они линейны в ограниченном диапазоне 200–700 К.

В целом для всего списка переходов применение степенного закона достаточно для описания уширения $\text{SO}_2\text{--CO}_2$ в температурном интервале 200–700 К, т.е. для атмосфер Земли и Венеры. Для получения полуширин линий при температурах атмосферы Марса необходимо использовать более сложную модель температурной зависимости. В работах [32,33] были получены разные температурные показатели для разных интервалов температур. В банке данных HITRAN-2016 [34] также были введены четыре температурных диапазона для параметров контура линий, а в HITRAN-2020 [31] используется двойной степенной закон [35]:

$$\gamma = \tilde{c}_1 \left(\frac{T_0}{T} \right)^{N_1} + \tilde{c}_2 \left(\frac{T_0}{T} \right)^{N_2}, \quad (3)$$

где $\tilde{c}_1, \tilde{c}_2, N_1, N_2$ — подгоночные параметры. Как видно, выражение (3) сводится к степенному закону (2) при $\tilde{c}_1 = \gamma_0, \tilde{c}_2 = 0, N_1 = N$.

Коэффициенты температурной зависимости полуширин линий $\text{SO}_2\text{--CO}_2$

ν, cm^{-1}	$J' K'_a K'_c \leftarrow J'' K''_a K''_c$	N	ν, cm^{-1}	$J' K'_a K'_c \leftarrow J'' K''_a K''_c$	N
2501.6868	3 2 1 $\leftarrow$ 2 2 0	0.693(2)	2507.1605	20 16 5 $\leftarrow$ 19 16 4	0.278(11)
2501.7464	3 0 3 $\leftarrow$ 2 0 2	0.791(3)	2507.2635	13 5 8 $\leftarrow$ 12 5 7	0.736(4)
2502.2152	4 3 2 $\leftarrow$ 3 3 1	0.682(5)	2507.2916	16 11 6 $\leftarrow$ 15 11 5	0.521(27)
2502.2977	4 2 3 $\leftarrow$ 3 2 2	0.696(1)	2507.3156	5 20 5 $\leftarrow$ 24 20 4	0.255(13)
2502.8279	5 3 2 $\leftarrow$ 4 3 1	0.685(5)	2507.3571	13 0 13 $\leftarrow$ 12 0 12	0.698(4)
2502.9293	5 2 3 $\leftarrow$ 4 2 2	0.701(1)	2507.4108	14 7 8 $\leftarrow$ 13 7 7	0.721(8)
2503.0802	5 1 4 $\leftarrow$ 4 1 3	0.762(3)	2507.4208	15 9 6 $\leftarrow$ 14 9 5	0.640(20)
2503.1584	6 5 2 $\leftarrow$ 5 5 1	0.738(6)	2507.4283	13 4 9 $\leftarrow$ 12 4 8	0.726(5)
2503.3134	6 4 3 $\leftarrow$ 5 4 2	0.712(8)	2507.4482	17 12, 5 $\leftarrow$ 16 12 4	0.462(27)
2503.4089	6 1 6 $\leftarrow$ 5 1 5	0.742(4)	2507.5661	18 13 6 $\leftarrow$ 17 13 5	0.407(26)
2503.4351	6 3 4 $\leftarrow$ 5 3 3	0.690(4)	2507.5939	13 3 10 $\leftarrow$ 12 3 9	0.719(3)
2503.5099	6 2 5 $\leftarrow$ 5 2 4	0.703(1)	2507.6362	14 6 9 $\leftarrow$ 13 6 8	0.737(2)
2503.5709	7 6 1 $\leftarrow$ 6 6 0	0.740(3)	2507.6454	19 14 5 $\leftarrow$ 18 14 4	0.359(22)
2503.9154	7 4 3 $\leftarrow$ 6 4 2	0.713(8)	2507.7122	5 8 7 1 $\leftarrow$ 14 8 6	0.688(14)
2503.9440	8 7 2 $\leftarrow$ 7 7 1	0.718(10)	2507.7815	4 1 14 $\leftarrow$ 13 1, 13	0.679(2)
2504.0399	7 3 4 $\leftarrow$ 6 3 3	0.694(4)	2507.8303	14 5 10 $\leftarrow$ 13 5 9	0.736(4)
2504.1224	7 0 7 $\leftarrow$ 6 0 6	0.767(4)	2507.8401	17 11 6 $\leftarrow$ 16 11 5	0.526(26)
2504.2779	9 8 1 $\leftarrow$ 8 8, 0	0.677(18)	2507.8456	13 1 12 $\leftarrow$ 12 1, 11	0.731(5)
2504.3239	7 1 6 $\leftarrow$ 6 1 5	0.760(3)	2507.8495	13 2 11 $\leftarrow$ 12 2 10	0.734(2)
2504.3562	8 5 4 $\leftarrow$ 7 5 3	0.737(5)	2507.9950	14 4 11 $\leftarrow$ 13 4 10	0.730(5)
2504.5124	8 4 5 $\leftarrow$ 7 4 4	0.714(7)	2508.0844	14 2 13 $\leftarrow$ 13 2 12	0.699(1)
2504.6358	8 3 6 $\leftarrow$ 7 3 5	0.700(4)	2508.1153	14 3 12 $\leftarrow$ 13 3, 1	0.722(4)
2504.6961	8 2 7 $\leftarrow$ 7 2 6	0.710(1)	2508.1697	23 17 6 $\leftarrow$ 22 17 5	0.272(7)
2504.7578	9 6 3 $\leftarrow$ 8 6 2	0.740(3)	2508.1782	20 14 7 $\leftarrow$ 19 14 6	0.366(22)
2504.8281	11 10 1 $\leftarrow$ 10 10 0	0.560(29)	2508.2137	21 15 6 $\leftarrow$ 20 15 5	0.326(17)
2504.8633	10 8 3 $\leftarrow$ 9 8 2	0.680(17)	2508.2664	16 8 9 $\leftarrow$ 15 8 8	0.689(13)
2504.9476	9 5 4 $\leftarrow$ 8 5 3	0.736(5)	2508.3685	15 0 15 $\leftarrow$ 14 0 14	0.682(2)
2505.1048	9 4 5 $\leftarrow$ 8 4 4	0.716(7)	2508.3833	18 11 8 $\leftarrow$ 17 11 7	0.531(25)
2505.1203	10 7 4 $\leftarrow$ 9 7 3	0.720(9)	2508.3925	15 5 10 $\leftarrow$ 14 5 9	0.737(3)
2505.1527	11 9 2 $\leftarrow$ 10 9 1	0.626(23)	2508.5294	19 12 7 $\leftarrow$ 18 12 6	0.475(26)
2505.2360	9 3 6 $\leftarrow$ 8 3 5	0.704(4)	2508.5645	15 4 11 $\leftarrow$ 14 4 10	0.732(5)
2505.2425	9 0 9 $\leftarrow$ 8 0 8	0.744(5)	2508.5975	25 18 7 $\leftarrow$ 24 18 6	0.265(5)
2505.3437	10 6 5 $\leftarrow$ 9 6 4	0.740(3)	2508.6368	20 13 8 $\leftarrow$ 19 13 7	0.421(24)
2505.3609	14 13 2 $\leftarrow$ 13 13 1	0.374(29)	2508.6818	24 17 8 $\leftarrow$ 23 17 7	0.279(7)
2505.4435	11 8 3 $\leftarrow$ 10 8 2	0.681(16)	2508.7057	21 14 7 $\leftarrow$ 20 14 6	0.374(21)
2505.4608	15 14 1 $\leftarrow$ 14 14 0	0.324(24)	2508.7417	18 10 9 $\leftarrow$ 17 10 8	0.592(22)
2505.5221	16 15 2 $\leftarrow$ 15 15 1	0.283(17)	2508.7525	16 6 11 $\leftarrow$ 15 6 10	0.736(2)
2505.6143	13 11 2 $\leftarrow$ 12 11 1	0.502(30)	2508.7633	15 3 12 $\leftarrow$ 14 3 11	0.725(2)
2505.6501	10 1 10 $\leftarrow$ 9 1 9	0.707(5)	2508.8155	17 8 9 $\leftarrow$ 16 8 8	0.689(13)
2505.6922	10 4 7 $\leftarrow$ 9 4 6	0.718(6)	2508.9212	19 11 8 $\leftarrow$ 18 11 7	0.537(24)
2505.7276	12 9 4 $\leftarrow$ 11 9 3	0.630(22)	2508.9496	16 5 12 $\leftarrow$ 15 5 11	0.738(3)
2505.7867	14 12 3 $\leftarrow$ 13 12 2	0.441(30)	2509.0378	15 2 13 $\leftarrow$ 14 2 12	0.733(3)
2505.8168	10 3 8 $\leftarrow$ 9 3 7	0.709(4)	2509.0670	18 9 10 $\leftarrow$ 17 9 9	0.646(18)
2505.8548	10 2 9 $\leftarrow$ 9 2 8	0.711(1)	2509.0750	17 7 10 $\leftarrow$ 16 7 9	0.720(7)
2505.9244	11 6 5 $\leftarrow$ 10 6 4	0.740(3)	2509.0992	26 18 9 $\leftarrow$ 25 18 8	0.272(5)
2505.9726	13 10 3 $\leftarrow$ 12 10 2	0.570(27)	2509.1181	16 4 13 $\leftarrow$ 15 4 12	0.736(5)
2506.0185	12 8 5 $\leftarrow$ 11 8 4	0.683(16)	2509.1642	21 13 8 $\leftarrow$ 20 13 7	0.428(24)
2506.1787	14 11 4 $\leftarrow$ 13 11 3	0.509(29)	2509.1885	25 17 8 $\leftarrow$ 24 17 7	0.286(7)
2506.2973	13 9 4 $\leftarrow$ 12 9 3	0.633(21)	2509.2289	16 3 14 $\leftarrow$ 15 3 13	0.722(3)
2506.3181	11 0 11 $\leftarrow$ 10 0 10	0.719(5)	2509.2399	24 16 9 $\leftarrow$ 23 16 8	0.309(12)
2506.3458	15 12 3 $\leftarrow$ 14 12 2	0.448(29)	2509.2530	23 15 8 $\leftarrow$ 22 15 7	0.341(17)
2506.4194	11 3 8 $\leftarrow$ 10 3 7	0.713(4)	2509.2798	19 10 9 $\leftarrow$ 18 10 8	0.596(21)
2506.4742	16 13 4 $\leftarrow$ 15 13 3	0.392(27)	2509.3032	17 6 11 $\leftarrow$ 16 6 10	0.735(2)
2506.5000	12 6 7 $\leftarrow$ 11 6 6	0.739(3)	2509.4539	20 11 10 $\leftarrow$ 19 11 9	0.541(23)
2506.5370	14 10 5 $\leftarrow$ 13 10 4	0.576(26)	2509.4632	28 19 10 $\leftarrow$ 27 19 9	0.273(6)
2506.5883	13 8 5 $\leftarrow$ 12 8 4	0.685(15)	2509.5026	17 5 12 $\leftarrow$ 16 5 11	0.739(3)
2506.6272	19 16 3 $\leftarrow$ 18 16 2	0.270(11)	2509.6196	18 7 12 $\leftarrow$ 17 7 11	0.719(7)

Таблица. Продолжение.

ν, cm^{-1}	$J' K'_a K'_c \leftarrow J'' K''_a K''_c$	N	ν, cm^{-1}	$J' K'_a K'_c \leftarrow J'' K''_a K''_c$	N
2506.6343	11 2 9 $\leftarrow$ 10 2 8	0.731(1)	2509.7646	24 15 10 $\leftarrow$ 23 15 9	0.348(16)
2506.6919	12 5 8 $\leftarrow$ 11 5 7	0.736(4)	2509.8083	18 1 18 $\leftarrow$ 17 1 17	0.670(3)
2506.7112	11 1 10 $\leftarrow$ 10 1 9	0.745(4)	2509.8126	20 10 11 $\leftarrow$ 19 10 10	0.599(20)
2506.7293	12 1 12 $\leftarrow$ 11 1 11	0.691(4)	2509.8489	18 6 13 $\leftarrow$ 17 6 12	0.734(3)
2506.7378	15 11 4 $\leftarrow$ 14 11 3	0.515(28)	2509.8982	19 8 11 $\leftarrow$ 18 8 10	0.690(12)
2506.8459	13 7 6 $\leftarrow$ 12 7 5	0.721(8)	2509.9299	17 3 14 $\leftarrow$ 16 3 13	0.728(2)
2506.8529	12 4 $\leftarrow$ 11 4 8	0.724(6)	2509.9491	29 19 10 $\leftarrow$ 28 19 9	0.279(6)
2506.8617	14 9 6 $\leftarrow$ 13 9 5	0.637(21)	2509.9717	17 1 16 $\leftarrow$ 16 1 15	0.706(3)
2506.9772	12 3 10 $\leftarrow$ 11 3 9	0.716(4)	2509.9813	21 11 10 $\leftarrow$ 20 11 9	0.546(23)
2506.9846	12 2 11 $\leftarrow$ 11 2 10	0.706(1)	2510.0498	18 5 14 $\leftarrow$ 17 5 13	0.741(3)
2507.0706	13 6 7 $\leftarrow$ 12 6 6	0.738(3)	2510.0864	28 18 11 $\leftarrow$ 27 18 10	0.285(5)
2507.0961	15 10 5 $\leftarrow$ 14 10 4	0.580(25)	2510.1114	22 12 11 $\leftarrow$ 21 12 10	0.492(23)
2507.1528	14 8 7 $\leftarrow$ 13 8 6	0.687(14)	2510.1384	20 9 12 $\leftarrow$ 19 9, 11	0.650(16)

Примечание: ν — волновое число (HITRAN [31]), $J' K'_a K'_c, J'' K''_a K''_c$ — вращательные квантовые числа верхнего и нижнего состояний соответственно, N — температурный показатель, значение в скобках при N — среднеквадратичное отклонение, определенное при обработке методом наименьших квадратов полуширин линий при разных температурах.

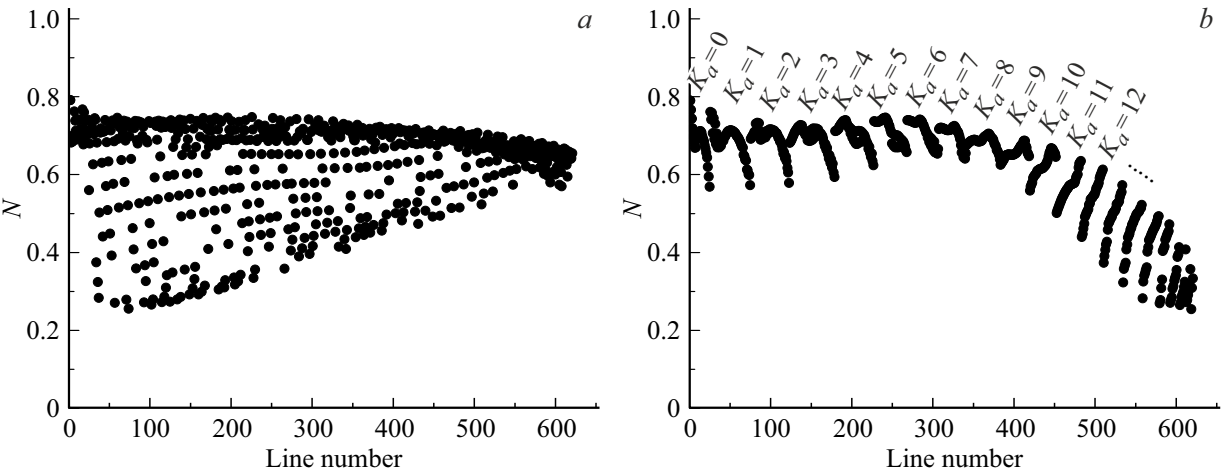


Рис. 3. Рассчитанные температурные показатели для полуширин линий. Пояснения в тексте.

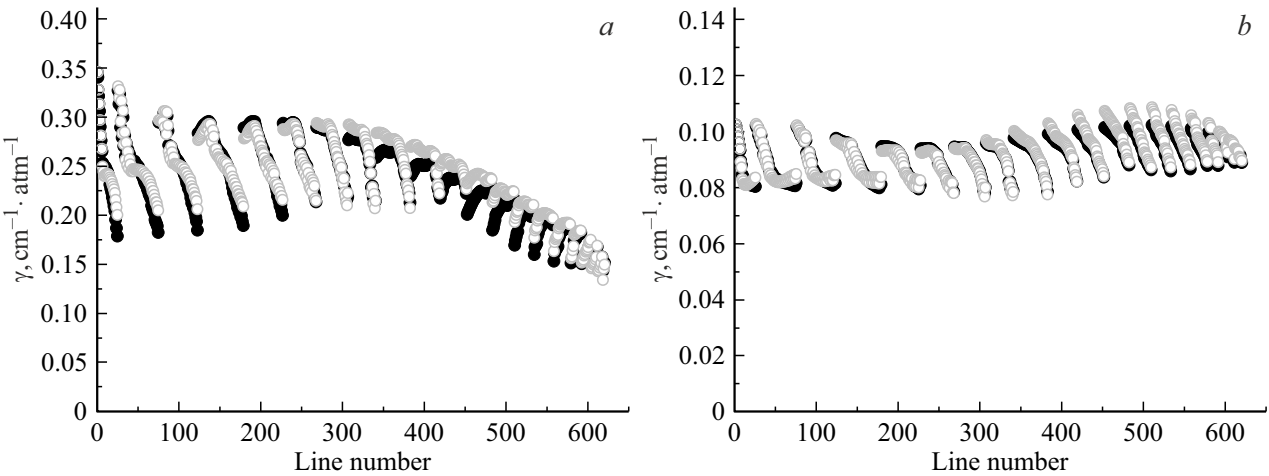


Рис. 4. Вычисленные (заполненные черные кружки) и восстановленные (полые серые кружки) полуширины линий при 150 (а) и 700 К (b).

4. Заключение

В данной работе были вычислены коэффициенты температурной зависимости уширения более 600 линий в диапазоне температур, характерных для атмосфер планет земной группы. Для расчетов использовался степенной закон. В дальнейшем планируется применение двойного степенного закона, где будут подгоняться не два, а четыре параметра. Его использование обеспечит лучшее восстановление полуширин линий SO_2 – CO_2 при низких температурах. Предполагается проведение расчетов для всех переходов полосы $\nu_1 + \nu_3$, представленных в HITRAN. Необходимо подтверждение представленных в работе вычисленных значений при низких температурах высокоточными экспериментальными данными.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках гранта РНФ № 24-22-00170.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] W.S. Adams, T. Dunham. Publ. Astron. Soc. Pac., **44**, 243 (1932). DOI: 10.1086/124235
- [2] D. Grassi, A. Migliorini, L. Montabone, S. Lebonnois, A. Cardes-Moinelo, G. Piccioni, P. Drossart, L.V. Zasova. J. Geophys. Res. (Planets), **115**, 9007 (2010). DOI: 10.1029/2009JE003553
- [3] A.S. Shimolina, R.E. Ernst, H.El Bilali, D.G. Malyshev, V.E. Rozhin, E.G. Antropova. Planet. Space Science, **257**, 106050 (2025). DOI: 10.1016/j.pss.2025.106050
- [4] C. Bezaud, C. Bergh, B. Fegley, J.-P. Maillard, D. Crisp, T. Owen, J.B. Pollack, D. Grinspoon. Geophys. Res. Lett., **20**, 1587 (1993). DOI: 10.1029/93GL01338
- [5] A. Khayat, G. Villanueva, M. Mumma, A. Tokunaga. Icarus, **253**, 130 (2015). DOI: 10.1016/j.icarus.2015.02.028
- [6] F. Forget, J. Leconte. Philosoph. Trans. Royal Soc. A, **372**, 20130084 (2014). DOI: 10.1098/rsta.2013.0084
- [7] П.Н. Антохин, В.Г. Аршинова, М.Ю. Аршинов, Б.Д. Белан, С.Б. Белан, Д.К. Давыдов, Г.А. Ивлев, А.В. Козлов, Т.М. Рассказчикова, Д.Е. Савкин, Д.В. Симоненков, Т.К. Скляднева, Г.Н. Толмачев, А.В. Фофанов. Опт. атм. ок., **37**, 822 (2024). DOI: 10.15372/AOO20241002
- [8] А.А. Черемисин, В.Н. Маричев, П.В. Новиков, Д.А. Бочковский. Вестник КРАУНЦ. Физико-математические науки, **29**, 208 (2019).
- [9] В.Ф. Рапута, Д.В. Симоненков, Б.Д. Белан, Т.В. Ярославцева. Опт. атм. ок., **32**(6), 465 (2019). DOI: 10.15372/AOO20190608
- [10] С.Ф. Абдуллаев, Б.И. Назаров, Т.Х. Салихов, В.А. Маслов. Опт. атм. ок., **25**, 428 (2012).
- [11] В.Н. Маричев. Опт. атм. ок., **26**, 783 (2013).
- [12] S.S. Limaye, S. Lebonnois, A. Mahieux, M. Patzold, S. Bougher, S. Bruinsma, S. Chamberlain, R.T. Clancy, J.-Cl. Gérard, G. Gilli, D. Grassi, R. Haus, M. Herrmann, T. Imamura, E. Kohler, P. Krause, A. Migliorini, Fr. Montmessin, Ch. Pere, M. Persson. Icarus, **294**, 124 (2017). DOI: 10.1016/j.icarus.2017.04.020
- [13] J.H. Shirley, T.H. McConnochie, D.M. Kass, A. Kleinböhl, J.T. Schofield, N.G. Heavens, D.J. McCleese, J. Benson, D.P. Hinson, J.L. Bandfield. Icarus, **251**, 26 (2015). DOI: 10.1016/j.icarus.2014.05.011
- [14] A.S. Dudaryonok, N.N. Lavrentieva. JQSRT, **219**, 360?365 (2018). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.08.022.
- [15] A.D. Bykov, N.N. Lavrentieva, L.N. Sinitisa. Mol. Phys., **102**, 1653 (2004). DOI: 10.1080/00268970410001725765
- [16] G. Ceselin, N. Tasinato, C. Puzzarini, A.P. Charnet, P. Stoppa, S.Giorgianni. JQSRT, **203**, 367 (2017). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.02.018
- [17] Yu.G. Borkov, O.M. Lyulin, T.M. Petrova, A.M. Solodov, A.A. Solodov, V.M. Deichuli, V.I. Perevalov. JQSRT, **225**, 119 (2019). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.12.030
- [18] A. Dudaryonok, T. Nevzorova, N. Lavrentiev, N. Lavrentieva. Proc. SPIE, **12341** (2022). DOI: 10.1117/12.2645079
- [19] Т.А. Невзорова, А.С. Дударёнок, Н.А. Лаврентьев, А.Д. Быков, Н.Н. Лаврентьева. Опт. атм. ок., **36**, 81 (2023). DOI: 10.15372/AOO20230201
- [20] А.А. Раддиг, Б.М. Смирнов. Справочник по атомной и молекулярной физике (Атомиздат, М., 1980).
- [21] C.G. Gray, K.E. Gubbins. Theory of molecular fluids. V. 1: Fundamentals (Clarendon Press, Oxford, 1984).
- [22] H.S.P. Muller, S. Brumken. J. Mol. Spectrosc., **232**, 213 (2005). DOI: 10.1016/j.jms.2005.04.010
- [23] W.J. Lafferty, A.S. Pine, G. Hilpert, R.L. Sams, J.-M. Flaud. J. Mol. Spectrosc., **176**, 280 (1996). DOI: 10.1006/jmsp.1996.0088
- [24] К.К. Шарыбкина, О.В. Наumenko. Опт. атм. ок., **37**, 554 (2024). DOI: 10.15372/AOO20240703
- [25] В.И. Стариков. Опт. атм. ок., **38**, 172 (2025). DOI: 10.15372/AOO20250302
- [26] G. Birnbaum. Adv. Chem. Phys., **12**, 487 (1967).
- [27] J.M. Hartmann, J. Taine, J. Bonamy, B. Labani, D. Robert. J. Chem. Phys., **86**, 144 (1987). DOI: 10.1063/1.452605
- [28] G. Wagner, M. Birk, R.R. Gamache, J.M. Hartmann. JQSRT, **92**, 211 (2005). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2004.07.023
- [29] A. Henry, M. Margottin-Maclou, N. Lacome. J. Mol. Spectrosc., **111**, 291 (1985). DOI: 10.1016/0022-2852(85)90006-2
- [30] A. Dudaryonok, J. Buldyreva, N. Lavrentieva, L. Troitsyna. JQSRT, **277**, 107956 (2022). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107956
- [31] I.E. Gordon, L.S. Rothman, R.J. Hargreaves, R. Hashemi, E.V. Karlovets, F.M. Skinner, E.K. Conway, C. Hill, R.V. Kochanov, Y. Tan, P. Weislo, A.A. Finenko, K. Nelson, P.F. Bernath, M. Birk, V. Boudon, A. Campargue, K.V. Chance, A. Coustenis, B.J. Drouin, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, J.T. Hodges, D. Jacquemart, E.J. Mlawer, A.V. Nikitin, V.I. Perevalov, M. Rotger, J. Tennyson, G.C. Toon, H. Tran, V.G. Tyuterev, E.M. Adkins, A. Baker, A. Barbe, E. Canè, A.G. Császár, A. Dudaryonok, O. Egorov, A.J. Fleisher, H. Fleurbaey, A. Foltynowicz, T. Furtenbacher, J.J. Harrison, J.-M. Hartmann, V.-M. Horneman, X. Huang, T. Karman, J. Karns, S. Kassi, I. Kleiner, V. Kofman, F. Kwabia-Tchana, N.N. Lavrentieva, T.J. Lee, D.A. Long, A.A. Lukashchanskaya, O.M. Lyulin, V.Yu. Makhnev, W. Matt, S.T. Massie, M. Melosso, S.N. Mikhailenko, D. Mondelain, H.S.P. Müller, O.V. Naumenko, A. Perrin, P.L. Polyansky,

- E. Raddaoui, P.L. Raston, Z.D. Reed, M. Rey, C. Richard, R. Tóbiás, I. Sadiek, D.W. Schwenke, E. Starikova, K. Sung, F. Tamassia, S.A. Tashkun, J. Vander Auwera, I.A. Vasilenko, A.A. Vigin, G.L. Villanueva, B. Vispoel, G. Wagner, A. Yachmenev, S.N. Yurchenko. JQSRT, **277**, 107949 (2022). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949
- [32] К.И. Аршинов, О.Н. Крапивная, В.В. Невдах. Опт. атм. ок., **30**, 193 (2017). DOI: 10.15372/AOO20170301
- [33] A.S. Dudaryonok, N.N. Lavrentieva, J.V. Buldyreva. Icarus, **256**, 30 (2015). DOI: 10.1016/j.icarus.2015.04.025
- [34] I.E. Gordon, L.S. Rothman, C. Hill, R.V. Kochanov et al. JQSRT, **203**, 3 (2017). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.06.038
- [35] R.R. Gamache, B. Vispoel. JQSRT, **217**, 440 (2018). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.05.019