

Российская академия наук
Сибирское отделение

ОПТИКА АТМОСФЕРЫ И ОКЕАНА

Том 28, № 4 апрель, 2015

Научный журнал

Основан в январе 1988 года академиком В.Е. Зуевым

Выходит 12 раз в год

Главный редактор

доктор физ.-мат. наук Г.Г. Матвиенко

Заместители главного редактора

доктор физ.-мат. наук Б.Д. Белан,

доктор физ.-мат. наук Ю.Н. Пономарев

Ответственный секретарь

доктор физ.-мат. наук В.А. Погодаев

Редакционная коллегия

Багаев С.Н., академик РАН, Институт лазерной физики (ИЛФ) СО РАН, г. Новосибирск, Россия;

Банах В.А., д.ф.-м.н., Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева (ИОА) СО РАН, г. Томск, Россия;

Белов В.В., д.ф.-м.н., ИОА СО РАН, г. Томск, Россия;

Букин О.А., д.ф.-м.н., Дальневосточная морская академия им. адмирала Г.И. Невельского, г. Владивосток, Россия;

Голицын Г.С., академик РАН, Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова (ИФА) РАН, г. Москва, Россия;

Еланский Н.Ф., чл.-кор. РАН, ИФА РАН, г. Москва, Россия;

Землянов А.А., д.ф.-м.н., ИОА СО РАН, г. Томск, Россия;

Кандидов В.П., д.ф.-м.н., Международный лазерный центр МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия;

Кулмала М. (Kulmala M.), проф., руководитель Отдела атмосферных наук кафедры физики, Университет г. Хельсинки, Финляндия;

Лукин В.П., д.ф.-м.н., ИОА СО РАН, г. Томск, Россия;

Михайлов Г.А., чл.-кор. РАН, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск, Россия;

Павлов В.Е., д.ф.-м.н., Институт водных и экологических проблем СО РАН, г. Барнаул, Россия;

Панченко М.В., д.ф.-м.н., ИОА СО РАН, г. Томск, Россия;

Ражев А.М., д.ф.-м.н., ИЛФ СО РАН, г. Новосибирск, Россия;

Тарасенко В.Ф., д.ф.-м.н., Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия;

Шабанов В.Ф., академик РАН, Красноярский научный центр СО РАН, г. Красноярск, Россия;

Шайн К. (Shine K.P.), член Английской академии наук, королевский профессор метеорологических и климатических наук, Департамент метеорологии, Университет г. Рединга, Великобритания;

Циас Ф. (Ciais P.), проф., научный сотрудник Лаборатории климатических наук и окружающей среды совместного научно-исследовательского подразделения Комиссариата атомной энергии и Национального центра научных исследований (НЦНИ) Франции, г. Жиф-сюр-Иветт, Франция

Совет редколлегии

Борисов Ю.А., к.ф.-м.н., Центральная аэрологическая обсерватория, г. Долгопрудный Московской обл., Россия;

Заворуев В.В., д.б.н., Институт вычислительного моделирования СО РАН, г. Красноярск, Россия;

Ивлев Л.С., д.ф.-м.н., Научно-исследовательский институт физики им. В.А. Фока при СПбГУ, г. Санкт-Петербург, Россия;

Игнатьев А.Б., д.т.н., ГСКБ Концерна ПВО «Алмаз-Антей» им. академика А.А. Расплетина, г. Москва, Россия;

Кабанов М.В., чл.-кор. РАН, Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск, Россия;

Михалев А.В., д.ф.-м.н., Институт солнечно-земной физики СО РАН, г. Иркутск, Россия;

Якубов В.П., д.ф.-м.н., Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Зав. редакцией С.Б. Пономарева

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН

Россия, 634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Адрес редакции: 634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Тел. (382-2) 49-24-31, 49-19-28; факс (382-2) 49-20-86

E-mail: psb@iao.ru

http://www.iao.ru

© Сибирское отделение РАН, 2015

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, 2015

СОДЕРЖАНИЕ

Том 28, № 4 (314), с. 283–374

апрель, 2015 г.

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Лаврентьева Н.Н., Дударёнок А.С., Будырева Ж.В. Расчет коэффициентов уширения линий метилцианида: самоуширение и уширение азотом	285
Климешина Т.Е., Петрова Т.М., Родимова О.Б., Солодов А.А., Солодов А.М. Поглощение CO ₂ в крыльях полос в ближнем ИК-диапазоне	291

ОПТИКА СЛУЧАЙНО-НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД

Лукин И.П. Кольцевая дислокация степени когерентности вихревого бesselева пучка в турбулентной атмосфере	298
Гладких В.А., Мамышев В.П., Одинцов С.Л. Экспериментальные оценки структурной характеристики показателя преломления оптических волн в приземном слое атмосферы	309

ОПТИКА КЛАСТЕРОВ, АЭРОЗОЛЕЙ И ГИДРОЗОЛЕЙ

Гейнц Ю.Э., Землянов А.А., Панина Е.К. Локализованные световые потоки от несферических радиально симметричных диэлектрических микрочастиц	319
Коношонкин А.В., Кустова Н.В., Боровой А.Г. Алгоритм трассировки пучков для задачи рассеяния света на атмосферных ледяных кристаллах. Часть 1. Теоретические основы алгоритма	324
Коношонкин А.В., Кустова Н.В., Боровой А.Г. Алгоритм трассировки пучков для задачи рассеяния света на атмосферных ледяных кристаллах. Часть 2. Сравнение с алгоритмом трассировки лучей	331

ОПТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И БАЗЫ ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ ОБ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

Асанов С.В., Белов В.В., Булыгин А.Д., Гейнц Ю.Э., Дудоров В.В., Землянов А.А., Игнатьев А.Б., Канев Ф.Ю., Колосов В.В., Коняев П.А., Лукин В.П., Матвиенко Г.Г., Морозов В.В., Носов В.В., Пономарев Ю.Н., Пташник И.В., Тарасенков М.В. Оптическая модель земной атмосферы для интенсивного лазерного излучения ближнего и среднего ИК спектральных диапазонов	338
Агеев Б.Г., Пономарев Ю.Н., Чесноков Е.Н. Ослабление излучения терагерцового диапазона водным аэрозолем	346

АППАРАТУРА И МЕТОДЫ ОПТИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Белоплотов Д.В., Ломаев М.И., Тарасенко В.Ф. О природе излучения голубых и зеленых струй в лабораторных разрядах, инициируемых пучком убегающих электронов	349
Иглакова А.Н., Ошлаков В.К., Селезнев Л.В., Тихомиров Б.А. Оптико-акустическая калориметрия фемтосекундных лазерных импульсов	354
Воробьева Л.П., Климкин А.В., Курак А.Н., Макогон М.М., Осипов К.Ю., Пономарев Ю.Н. Дистанционная диагностика ацетона, этилацетата и изопрена в атмосфере	359
Осипов К.Ю., Капитанов В.А., Пономарев Ю.Н., Карапузиков А.И. Разработка и моделирование оптико-акустического газоанализатора с тепловым источником для анализа изотопического отношения углерода	366
Информация	372

CONTENTS

Vol. 28, No. 4 (314), p. 283–374

April 2015

Spectroscopy of ambient medium

- Lavrentieva N.N., Dudaryonok A.S., Buldyreva J.V.** Calculation of methylcyanide line broadening coefficients: self- and nitrogen-broadening 285
- Klimeshina T.E., Petrova T.M., Rodimova O.B., Solodov A.A., Solodov A.M.** CO₂ absorption in band wings 291

Optics of stochastically heterogeneous media

- Lukin I.P.** Ring dislocation of the degree of coherence of a vortex Bessel beam in turbulent atmosphere 298
- Gladkikh V.A., Mamyshev V.P., Odintsov S.L.** Experimental estimates of the structure parameter of the refractive index for optical waves in the surface air layer 309

Optics of clusters, aerosols, and hydrosols

- Geints Yu.E., Zemlyanov A.A., Panina E.K.** Localized light jets from radially symmetric non-spherical dielectric microparticles 319
- Konoshonkin A.V., Kustova N.V., Borovoi A.G.** Beam splitting algorithm for light scattering by atmospheric ice crystals. Part 1. Theory 324
- Konoshonkin A.V., Kustova N.V., Borovoi A.G.** Beam splitting algorithm for light scattering by atmospheric ice crystals. Part 2. Comparison with the ray tracing algorithm 331

Optical models and databases

- Asanov S.V., Belov V.V., Bulygin A.D., Geintz Yu.E., Dudorov V.V., Zemlyanov A.A., Ignat'ev A.B., Kanev F.Yu., Kolosov V.V., Konyaev P.A., Lukin V.P., Matvienko G.G., Morosov V.V., Nosov V.V., Ponomarev Yu.N., Ptashnik I.V., Tarasenko M.V.** Optical model of the Earth's atmosphere for intense laser emission in the near and mid-infrared spectral ranges 338
- Ageev B.G., Ponomarev Yu.N., Chesnokov E.N.** Attenuation of THz radiation by water aerosol 346

Optical instrumentation

- Beloplotov D.V., Lomaev M.I., Tarasenko V.F.** On the nature of radiation of blue and green jets at laboratory discharges initiated by runaway electrons 349
- Iglakova A.N., Oshlakov V.K., Seleznev L.V., Tikhomirov B.A.** Photoacoustic calorimetry of femtosecond laser pulses 354
- Vorob'eva L.P., Klimkin A.V., Kuryak A.N., Makogon M.M., Osipov K.Yu., Ponomarev Yu.N.** Remote diagnostics of acetone, ethyl acetate, and isoprene in the atmosphere 359
- Osipov K.Yu., Kapitanov V.A., Ponomarev Yu.N., Karapuzikov A.I.** Design and modeling of a photo-acoustic gas analyzer with a thermal source for carbon isotope ratio analysis 366
- Information** 372

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 539.194, 593.196.3

Расчет коэффициентов уширения линий метилцианида: самоуширение и уширение азотом

Н.Н. Лаврентьева^{1,2}, А.С. Дударёнок^{1,2}, Ж.В. Булдырева^{3*}

¹Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1, Россия

²Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, Россия

³Institute UTINAM, UMR CNRS 6213, Université de Franche-Comté,
16 route de Gray, 25030 Besançon cedex, France

Поступила в редакцию 22.01.2015 г.

Представлены результаты расчетов полуширин линий молекул метилцианида в случае самоуширения и уширения азотом. Вычисления выполнены при комнатной температуре ($T = 296$ К) для ~1400 линий, вращательные квантовые числа варьируются в пределах: J от 0 до 70 и K от 0 до 10. Для каждой линии рассчитаны температурные показатели, рассмотрена температурная зависимость для условий атмосфер Земли и Титана. Вычисления проводились с использованием полуэмпирического метода, являющегося модификацией ударной теории уширения линий, основанной на привлечении экспериментальных значений параметров контура линий. Полученные величины находятся в хорошем согласии с измеренными данными.

Ключевые слова: уширение линий, молекулы типа симметричного волчка, метилцианид, контур линии, межмолекулярные взаимодействия; line-broadening, symmetric top, methylcyanide, line-contour, intermolecular interactions.

Метилцианид является долгоживущим загрязнителем атмосферы, он важен для изучения физико-химических процессов в тропосфере и стратосфере Земли и Титана. Точные расчеты параметров контура линий метилцианида необходимы для определения профиля его концентрации.

Несмотря на важность изучения полуширин CH_3CN как для земных, так и для астрофизических исследований, имеется небольшое количество работ, в которых приводятся экспериментальные и расчетные данные по уширению линий метилцианида. Измерения коэффициентов самоуширения линий представлены: для микроволновой области в [1], дальней ИК-области – в [2–9], средней ИК-области – в [10], ближней ИК-области – в [11]. В [2, 4–8] описаны результаты расчетов полуширин линий, полученные с помощью метода Андерсона–Цао–Карнатта (АЦК), причем все вычисления дают завышенные результаты ~20%. Превышение расчетных значений связано с применением процедуры прерывания, когда ударный параметр b_0 определяется из решения уравнения $S_2(b_0) = 1$, где $S_2(b)$ – функция прерывания по методу АЦК. Уширение линий CH_3CN давлением N_2 наиболее исследовано в чисто

вращательной полосе поглощения, измеренные значения полуширин даны в [1, 6, 9, 12]. Работа [6] содержит расчетные данные (метод АЦК), в статье [12] приведены результаты вычислений уширения по методу Робера–Бонами, а также расчеты коэффициента температурной зависимости (температурный интервал 235–340 К). Измеренные данные [10] являются самыми многочисленными, представлены полуширины линий для более чем 700 переходов (вращательные квантовые числа $J \leq 48$, $K \leq 10$, полоса ν_4 , P - и R -ветви).

Для расчета полуширин линий молекул симметричного волчка для случаев $\text{CH}_3\text{CN}-\text{CH}_3\text{CN}$ и $\text{CH}_3\text{CN}-\text{N}_2$ применялся полуэмпирический (ПЭ) метод [13], уже зарекомендовавший себя при описании уширения линий молекул типа симметричного волчка [14, 15]. Использование процедуры прерывания в полуэмпирическом методе правомерно для молекул, характеризующихся сильными взаимодействиями, когда расстояние наибольшего сближения меньше параметра прерывания из теории АЦК ($r_c < b_0$, r_c – расстояние наибольшего сближения). В таких условиях прерывание процесса поглощения происходит до того, как траектория становится нелинейной. Взаимодействие двух сильных диполей обеспечивает выполнение этого условия, влияние короткодействующих сил слабо в этом случае и учитывается с помощью корректирующего фактора. Для сильных взаимодействий справедливы следующие допущения:

* Нина Николаевна Лаврентьева (lno@iao.ru); Анна Сергеевна Дударёнок (osip0802@sibmail.com); Жанна Васильевна Булдырева (jeanna.buldyreva@univ-fcomte.fr).

столкновения — бинарные, продолжительность столкновений меньше, чем время между столкновениями, поступательное движение частиц описывается приближением классических траекторий, интерференция линий не учитывается. Детально полуэмпирический метод описан в [13], здесь мы приводим краткое описание.

Согласно общим положениям полуклассической теории полуширина γ_{if} и сдвиг центра линии δ_{if} перехода $i \rightarrow f$ могут быть записаны следующим образом:

$$\gamma_{if} + i\delta_{if} = \frac{n}{c} \sum_p \rho(p) \int_0^\infty v F(v) dv \int_0^\infty b U(i, f, p, b, v) db, \quad (1)$$

где n — плотность возмущающих частиц; $\rho(p)$ — заселенность уровня p ; p — набор квантовых чисел второй (возмущающей) молекулы; v — относительная скорость сталкивающихся молекул; $F(v)$ — функция распределения по скоростям Максвелла; b — прицельное расстояние.

Функция эффективности $U(i, f, p, b, v)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \text{Re} U(i, f, p, b, v) = & 1 - \{1 - S_{2,fp,ip}^{(L)}\} \times \\ & \times \cos[S_{1,fp} - S_{1,ip} + \text{Im} S_{2,fp} - \text{Im} S_{2,ip}] \times \\ & \times \exp\left[-(\text{Re} S_{2,fp} + \text{Re} S_{2,ip} + S_{2,fp,ip}^{(C)})\right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь S_1 и S_2 — выражения первого и второго порядка по теории возмущения; индексы (L) и (C) соответствуют «связным» и «присоединенным» («linked» and «connected») диаграммам теории возмущения. Член первого порядка S_1 отвечает за адиабатический эффект и определяется только изотропной частью потенциала, а S_2 — его анизотропной частью. Обе функции зависят от «классической» траектории относительного движения сталкивающихся молекул.

Выражения (1) и (2) зависят от сил дипольных переходов $D^2(ii'|l)$ и $D^2(ff'|l)$ различных каналов рассеяния $i \rightarrow i'$, $f \rightarrow f'$, связывающих нижние и верхние уровни перехода с другими близко расположенными уровнями. Эти параметры являются квадратом приведенных матричных элементов молекулярных постоянных, таких как дипольный момент или компоненты квадрупольного тензора. Параметры контуров линий в теории АЦК выражаются как

$$\begin{aligned} \gamma_{if} = & A(i, f) + \sum_{i'} D^2(ii'|l) P_l(\omega_{ii'}) + \\ & + \sum_{f'} D^2(ff'|l) P_l(\omega_{ff'}) + \dots, \end{aligned} \quad (3)$$

членами более высоких порядков здесь пренебрегается;

$$\begin{aligned} P_l(\omega) = & \frac{n}{c} \sum_p \rho(p) \sum_{l', p'} A_{ll'} D^2(pp'|l') \times \\ & \times F_{ll'} \left(\frac{2\pi c b_0(p, i, f)}{v} (\omega + \omega_{pp'}) \right) \end{aligned} \quad (4)$$

является функцией эффективности каналов рассеяния $i \rightarrow i'$ или $f \rightarrow f'$ (если заменить $\omega_{ii'}$ и $\omega_{ff'}$ на ω); $A_{ll'}$ — параметры для определенного ll' -типа взаимодействия, $l = 1$ соответствует дипольным переходам и $l = 2$ — квадрупольным переходам в поглощающей молекуле. Выражение

$$A(i, f) = \frac{n}{c} \sum_p \rho(p) \int_0^\infty v F(v) b_0^2(v, p, i, f) dv \quad (5)$$

представляет собой обычное слагаемое теории АЦК, обусловленное прерыванием $(b_0(v, p, i, f))$ — параметр прерывания).

Вероятности переходов $D^2(ii'|l)$ и $D^2(ff'|l)$ относятся к каналам рассеивания $i \rightarrow i'$, $f \rightarrow f'$, они обусловлены только свойствами поглощающей молекулы. Функция эффективности $P_l(\omega_{ii'})$ зависит от межмолекулярного потенциала, траектории относительного движения молекул, уровней энергии и волновых функций буферной молекулы. Как было предложено в [13], функция эффективности $P_l(\omega)$ может быть представлена в виде:

$$P_l(\omega) = P_l^A(\omega) C_l(\omega), \quad (6)$$

где $P_l^A(\omega)$ — функция эффективности в теории АЦК; $C_l(\omega)$ — поправочный фактор, который рассчитывается из подгонки к экспериментальным данным. В то время как функция $P_l^A(\omega)$ определяет все основные вклады в уширение, множитель $C_l(\omega)$ дает небольшую поправку, связанную с учетом некоторых тонких эффектов.

Ранее для расчетов коэффициентов уширения линий метилхлорида применялся корректирующий фактор:

$$C_l = \frac{c_1}{c_2 \sqrt{J} + 1} \cdot \frac{1}{c_3 (J - c_4)^2 + 1}. \quad (7)$$

Поскольку коэффициенты уширения метилхлорида и метилцианида имеют подобные зависимости от вращательных квантовых чисел, в настоящей работе вычисления проводились с использованием фактора (7). В этом выражении параметр c_1 корректирует величину коэффициента уширения, c_2 и c_3 — зависимость от вращательного квантового числа J , c_3 несет ответственность за ширину кривой в районе максимума, c_4 отвечает за перемещение центра максимума. Отметим, что функция C_l не искажает зависимость полуширины от вращательного квантового числа J , а только корректирует ее.

Параметры полуэмпирической модели для обоих уширяющих газов определялись подгонкой к экспериментальным коэффициентам уширения линий [10] с применением метода покоординатного спуска. В случае самоуширения линий метилцианида в подгонке, проводимой отдельно для разных значений квантового числа K , использовались все имеющиеся экспериментальные данные. Для уширения азотом введена прямолинейная зависимость параметров модели от квантового числа K , при этом в подгонке участвовали только данные при $K = 1$ (43 линии) и $K = 7$