

Российская академия наук  
Сибирское отделение

# ОПТИКА АТМОСФЕРЫ И ОКЕАНА

Том 28, № 8 август, 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, № 8 (319), с. 673–760

август, 2015 г.

## СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

- Дударёнок А.С., Лаврентьева Н.Н., Ма Q. Метод средних частот для расчета полуширин линий молекул типа асимметричного волчка ..... 675

## ОПТИКА КЛАСТЕРОВ, АЭРОЗОЛЕЙ И ГИДРОЗОЛЕЙ

- Лужецкая А.П., Поддубный В.А., Цибуштанова Т.В. Полуэмпирические статистические модели влияния атмосферного аэрозоля на возмущения потоков коротковолновой солнечной радиации по данным фотометрических измерений ..... 682
- Сакерин С.М., Кабанов Д.М. Мелко- и грубодисперсные компоненты аэрозольной оптической толщи атмосферы в морских и полярных районах ..... 690
- Щелканов Н.Н. Сравнение однопараметрических и двухпараметрических моделей аэрозольного ослабления для экспериментальных данных аридной зоны Казахстана ..... 698

## ДИСТАНЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ АТМОСФЕРЫ, ГИДРОСФЕРЫ И ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ

- Ионов Д.В., Тимофеев Ю.М., Поберовский А.В. Спектроскопические измерения содержания  $O_3$  и  $NO_2$  в атмосфере: коррекция наземного метода и результаты сопоставления с данными спутниковых измерений ..... 704

## АТМОСФЕРНАЯ РАДИАЦИЯ, ОПТИЧЕСКАЯ ПОГОДА И КЛИМАТ

- Тартаковский В.А., Крутиков В.А., Волков Ю.В., Черedyкo Н.Н. Классификация климата путем анализа фазы температурных рядов ..... 711
- Михалев А.В., Подлесный С.В., Костылева Н.В., Комарова Е.С. Оптические характеристики ночного неба в Восточной Сибири после падения Челябинского метеорита. II. Собственное излучение верхней атмосферы Земли ..... 718
- Селегей Т.С., Филоненко Н.Н., Ленковская Т.Н. О методике определения метеорологического потенциала загрязнения атмосферы ..... 725
- Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Давыдов Д.К., Козлов А.В., Козлов А.С., Аршинова В.Г. Нуклеационные всплески в атмосфере бореальной зоны Западной Сибири. Часть II. Скорости образования и роста наночастиц ..... 730

## АППАРАТУРА И МЕТОДЫ ОПТИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

- Коняев П.А., Ботыгина Н.Н., Антошкин Л.В., Емалеев О.Н., Лукин В.П. Об измерении структурной характеристики показателя преломления атмосферы пассивными оптическими методами ..... 738
- Смалихо И.Н., Банах В.А., Holzäpfel F., Rahm S. Оценивание параметров самолетных вихрей из массива радиальных скоростей, измеренных когерентным доплеровским лидаром ..... 742
- Шерстобитов М.В., Цвык Р.Ш., Лобода Е.Л. Анализ последовательности термограмм при определении частоты вращения факела ..... 751
- Петров Д.В., Матросов И.И., Сединкин Д.О., Тихомиров А.А. Эффективный спектральный прибор для спектроскопии комбинационного рассеяния света ..... 756

## CONTENTS

Vol. 28, No. 8 (319), p. 673–760

August, 2015

### Spectroscopy of ambient medium

- Dudaryonok A.S., Lavrentieva N.N., Ma Q.** Averaged energy difference method of calculation of asymmetric top line broadening ..... 675

### Optics of clusters, aerosols, and hydrosols

- Luzhetskaya A.P., Poddubnyi V.A., Tsipushtanova T.V.** Semi empirical statistical models of the influence of atmospheric aerosol on perturbation of fluxes of short-wave solar radiation from data of photometrical measurements ..... 682
- Sakerin S.M., Kabanov D.M.** Finely and coarsely dispersed components of atmospheric aerosol optical depth in maritime and polar regions ..... 690
- Shchelkanov N.N.** Comparison of one-parametrical and two-parametrical models of aerosol extinction for experimental data of an arid zone of Kazakhstan ..... 698

### Remote sensing of atmosphere, hydrosphere, and underlying surface

- Ionov D.V., Timofeyev Yu.M., Poberovskii A.V.** Spectroscopic measurements of  $O_3$  and  $NO_2$  atmospheric content: Improvements to ground-based method and comparison with the data of satellite observations ..... 704

### Atmospheric radiation, optical weather, and climate

- Tartakovsky V.A., Krutikov V.A., Volkov Yu.V., Cheredko N.N.** Climate classification by analysis of the phases of temperature series ..... 711
- Mikhalev A.V., Podlesny C.V., Kostyleva N.V., Komarova E.S.** Optical characteristics of the night sky over Eastern Siberia after the Chelyabinsk meteorite fall. II. Airglow ..... 718
- Selegei T.S., Filonenko N.N., Lenkovskaya T.N.** On the method of determining meteorological air pollution potential ..... 725
- Arshinov M.Yu., Belan B.D., Davydov D.K., Kozlov A.V., Kozlov A.S., Arshinova V.G.** Nucleation bursts in the atmosphere over boreal zone in West Siberia. Part II. Formation and growth rates of nanoparticles ..... 730

### Optical instrumentation

- Konyaev P.A., Botygina N.N., Antoshkin L.V., Emaleev O.N., Lukin V.P.** About measurement of the structure characteristic of atmospheric refractive index by passive optical methods ..... 738
- Smalikho I.N., Banakh V.A., Holzäpfel F., Rahm S.** Estimation of aircraft wake vortex parameters from array of radial velocities measured by a coherent Doppler lidar ..... 742
- Sherstobitov M.V., Tsvyk R.Sh., Loboda E.L.** Processing sequence of thermograms in determining rotation frequency of the torch ..... 751
- Petrov D.V., Matrosov I.I., Sedinkin D.O., Tikhomirov A.A.** Effective spectral device for Raman spectroscopy ..... 756

## Метод средних частот для расчета полуширин линий молекул типа асимметричного волчка

А.С. Дударёнок<sup>1</sup>, Н.Н. Лаврентьева<sup>1</sup>, Q. Ma<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН  
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1, Россия

<sup>2</sup>Институт космических исследований Годдарда,  
Кафедра прикладной физики, Колумбийский университет  
10025, г. Нью-Йорк, Бродвей, 2880, США

Поступила в редакцию 19.02.2014 г.

Представлен новый метод оценки коэффициентов уширения колебательно-вращательных линий молекул типа асимметричного волчка. Метод позволяет получить значения полуширин линий на основе небольшого количества эмпирических данных, не прибегая к сложным вычислениям. На основе анализа экспериментальных данных получена зависимость средних частот от колебательных квантовых чисел. Подход протестирован на примере расчета полуширин линий молекул типа асимметричного волчка  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{HDO}$ . Проведено сравнение рассчитанных параметров контура линий с экспериментальными данными в различных полосах поглощения.

**Ключевые слова:** метод средних частот, столкновительный переход, коэффициент уширения линии; the averaged energy difference method, collisional transition, line broadening coefficient.

### Введение

В настоящее время для вычислений ударных параметров контура колебательно-вращательных линий используются несколько методов, к числу которых относятся различные модификации метода Робера—Бонами (РБ) [1, 2] и некоторые полуэмпирические (ПЭ) методы [3, 4]. Полученные по наиболее часто применяемому формализму Робера—Бонами расчетные значения демонстрируют хорошее согласие с экспериментальными данными [5]. Теория РБ не содержит процедуры прерывания, характерной для многих методик, она включает действующее на близких расстояниях атом-атомное взаимодействие и более реалистично описывает межмолекулярную динамику, так как учитывает искривление траекторий. Именно с этим связаны значительные затраты времени при вычислениях по методу Робера—Бонами. Кроме того, Ma, Tipping и Boulet [2] указали на ошибки, допущенные в формализме Робера—Бонами при получении основных соотношений для полуширины и сдвига линии, обусловленные использованием теоремы о связанных диаграммах. Однако устранение указанных ошибок не привело к улучшению сходимости расчетных и экспериментальных значений параметров по сравнению с методом РБ.

В настоящей статье мы предлагаем новый метод расчета столкновительных полуширин линий молекул типа асимметричного волчка — метод средних частот — и рассматриваем его апробацию на примере вычисления коэффициентов уширения линий молекул данного типа в случае столкновений:  $\text{H}_2\text{O}$ — $\text{N}_2$ ,  $\text{HDO}$ —воздух.

### 1. Основные соотношения метода

Предлагаемый метод основан на оценке вкладов столкновительных переходов в полуширину спектральной линии. Идея заключается в том, что из всей расчетной схемы выделяется совокупность величин, которые отражают влияние буферной частицы на внутреннее состояние поглощающей молекулы и из них компонуется параметр, который в дальнейшем будем называть средней частотой столкновительных переходов. Под столкновительными переходами понимаем все возможные переходы с определенного энергетического уровня, обусловленные столкновениями.

Полуширина линии (соответствующей переходу  $i \rightarrow f$ ) в полуклассической ударной теории при условии прямолинейного приближения траектории относительного движения сталкивающихся молекул имеет следующий вид [6]:

$$\gamma_{if} = \frac{n_2}{c} \sum_{i_2} \rho(i_2) \int_0^\infty dv v f(v) \int_0^\infty db b \text{Re} S(b), \quad (1)$$

\* Анна Сергеевна Дударёнок (osip0802@sibmail.com);  
Нина Николаевна Лаврентьева (lnn@iao.ru); Qiancheng Ma (qma@giss.nasa.gov).

где  $n_2$  — число молекул буферного газа в единице объема;  $c$  — скорость света;  $\rho(i_2)$  — заселенность уровня  $i_2$  уширяющей молекулы;  $v$  — относительная скорость сталкивающихся молекул;  $f(v)$  — функция распределения Максвелла;  $b$  — прицельный параметр;  $S(b)$  — функция эффективности. Функция  $S(b)$  может быть представлена в виде ряда теории возмущения по межмолекулярному потенциалу. Член первого порядка является мнимым и не дает вклада в уширение линий. Член второго порядка  $S_2(b)$  состоит из трех слагаемых:

$$S_2(b) = S_{2i}^{outer}(b) + S_{2f}^{outer}(b) + S_2^{middle}(b). \quad (2)$$

По сравнению с  $\text{Re}(S_{2i}^{outer}(b) + S_{2f}^{outer}(b))$  вклад от  $\text{Re}(S_2^{middle}(b))$  в  $\text{Re}(S_2(b))$  незначителен. Входящая в (2) сумма  $S_{2i}^{outer}$  и  $S_{2f}^{outer}$  записывается в следующем виде:

$$S_{2i}^{outer} + S_{2f}^{outer} = \sum_{l_1 l_2} \frac{a_{l_1 l_2}}{(\hbar v b^{l_1 + l_2})^2} \sum_{i_2} D^2(i_2 i'_2 | l_2) \times \\ \times \left\{ \sum_i D^2(i i' | l_1) \phi_{l_1 l_2}(k_{i i' i_2 i'_2}) + \sum_{f'} D^2(f f' | l_1) \phi_{l_1 l_2}(k_{f f' i_2 i'_2}) \right\}. \quad (3)$$

Здесь  $D^2(i i' | l_1)$ ,  $D^2(f f' | l_1)$  — силы переходов поглощающей молекулы, относящиеся к каналам рассеяния  $i \rightarrow i'$  и  $f \rightarrow f'$ ;  $\hbar$  — постоянная Планка;  $a_{l_1 l_2}$  — числовые коэффициенты, которые выбираются так, чтобы  $\text{Re} \phi_{l_1 l_2}(0) = 1$ ;

$$\phi_{l_1 l_2}(k_{i i' i_2 i'_2}) = -\frac{1}{a_{l_1 l_2} \hbar^2} \times \\ \times \sum_{q_1 q_2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^t dt' e^{i k_{i i' i_2 i'_2} \frac{(t-t')v}{2\pi c b}} C_{l_1 l_2}^{q_1 q_2}(t) C_{l_1 l_2}^{q_1 q_2}(t'), \quad (4)$$

где  $C_{l_1 l_2}^{q_1 q_2}(t)$  — коэффициенты разложения оператора межмолекулярного потенциала по сферическим компонентам  $2^l$ -польных моментов молекул;  $q_1 = 0, \pm 1, \dots, \pm l_1$ ,  $q_2 = 0, \pm 1, \dots, \pm l_2$ ;  $C_{l_1 l_2}^{q_1 q_2}(t)$  зависят от расстояния между молекулами, взаимной ориентации и, следовательно, от времени. Функция  $\phi_{l_1 l_2}(k_{i i' i_2 i'_2})$  называется резонансной функцией, ее действительная часть соответствует полуширине, а мнимая — сдвигу линий. Параметр  $k_{i i' i_2 i'_2}$  зависит от частот столкновительных переходов и определяется следующей формулой:

$$k_{i i' i_2 i'_2} = \frac{2\pi c b}{v} (\omega_{i i'} + \omega_{i_2 i'_2}). \quad (5)$$

Для расчета полуширины линии берется действительная часть резонансной функции:  $\text{Re} \phi_{l_1 l_2}(k_{i i' i_2 i'_2}) \equiv f(\omega_{i i'})$ . Тогда выражение в фигурных скобках из (3) запишется как

$$\left\{ \sum_i D^2(i i' | l_1) f(\omega_{i i'}) + \sum_{f'} D^2(f f' | l_1) f(\omega_{f f'}) \right\}. \quad (6)$$

В него входят частоты переходов  $\omega_{i i'}$ ,  $\omega_{f f'}$  для каналов рассеяния  $i \rightarrow i'$ ,  $f \rightarrow f'$ , матричные элементы дипольного ( $l_1 = 1$ ), квадрупольного ( $l_1 = 2$ ) момен-

тов столкновительных переходов  $D^2(i i' | l_1)$ ,  $D^2(f f' | l_1)$  и резонансные функции  $f(\omega_{i i'})$ ,  $f(\omega_{f f'})$ . Произведение под знаком суммы в выражении (6) определяет вклад канала рассеяния  $i \rightarrow i'$  или  $f \rightarrow f'$  в величину полуширины линии.

На рис. 1 приведена схема вращательных уровней энергии молекулы воды. Стрелками отмечены столкновительные переходы с начального  $i$  и конечного  $f$  уровней на уровни  $i'$ ,  $f'$ , соответствующие дипольным правилам отбора. Толщина столбиков пропорциональна величине вкладов каналов рассеяния в полуширину линии. Заштрихованные столбики относятся к переходам на вышерасположенные (относительно  $i$  и  $f$ ) уровни энергии, темные — на нижерасположенные уровни.

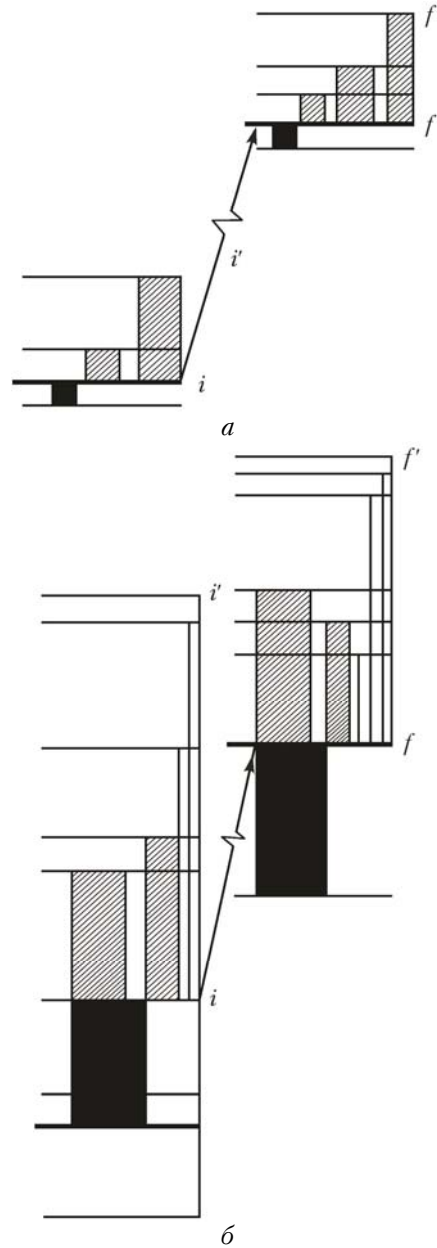


Рис. 1. Схема вращательных уровней поглощающей молекулы воды для случаев малых (а) и больших (б) значений вращательного квантового числа  $J$