

Ударное самоуширение линий перехода 10^00-00^01 молекулы CO_2 : аппроксимация температурной зависимости

К.И. Аршинов, В.В. Бобровский, О.Н. Крапивная, В.Н. Шут

Институт технической акустики НАН Беларуси, Витебск

E-mail: itaaki@yandex.ru

Температурную зависимость коэффициентов ударного самоуширения спектральных линий CO_2 получают используя результаты измерений ненасыщенных коэффициентов поглощений (КП) при давлении, обеспечивающем лоренцевский контур линий. Аналитически эту зависимость принято представлять в виде

$$\gamma(T) = \gamma(T_0) \cdot (T_0/T)^n, \quad (1)$$

где T_0 – реперная температура, равная 296 К или 300 К. Значения n , приводимые в различных экспериментальных и теоретических работах, находятся в диапазоне от 0.35 до 1.0. Анализ экспериментальных результатов показывает, что показатель степени в формуле типа (1) зависит от выбора температурного диапазона и реперной температуры в этом диапазоне. Этот вывод качественно согласуется с результатами недавних работ [1, 2], в которых также была получена и отмечается сильная зависимость показателя степени от выбранного температурного диапазона. В упомянутых работах предлагается рассматривать несколько зависимостей типа (1) для диапазонов температур, соответствующих, например, условиям атмосфер разных планет, и для каждой зависимости выбирать свои значения параметров $\{T_0, n\}$. Однако, авторы этих работ не обосновывают выбор значений реперных температур и не объясняют причин получения разных показателей степени n .

Обычно величину γ экспериментально определяют или непосредственно, измеряя форму контура линии поглощения с помощью перестраиваемого источника излучения [3], или, измеряя КП на одной, например, центральной частоте линии поглощения [4]. Для линий перехода 10^00-00^01 задача облегчается тем, что в качестве зондирующего излучения можно использовать резонансное излучение стабилизированного по максимуму контура CO_2 -лазера, перестраиваемого по линиям этих же переходов. На основании экспериментально измеренных коэффициентов поглощений $\{\alpha_{\text{CO}_2i}\}$ при фиксированных температурах в диапазоне давлений CO_2 5–30 Тор, когда контур линий определяется эффектом Доплера и столкновениями молекул CO_2 между собой (контур Фойгта), для спектральных линий колебательного перехода 10^00-00^01 были рассчитаны значения γ в температурном диапазоне 300–700 К [4]. В качестве примера рассмотрим функцию $\gamma(T)$ для линии $R(34)$ перехо-

да $10^{00}\text{-}00^01$ CO_2 (см. рис.1). Видно, что функция $\gamma(T)$ имеет крутой и пологий участки и может быть описана формулой с двумя показателями степени n_1, n_2 и температурой T_c

$$\gamma(T) = [\gamma(T_c)](T_c/T)^n, \quad \text{где } n = \begin{cases} n_1, & \text{при } T < T_c \\ n_2, & \text{при } T > T_c \end{cases}. \quad (2)$$

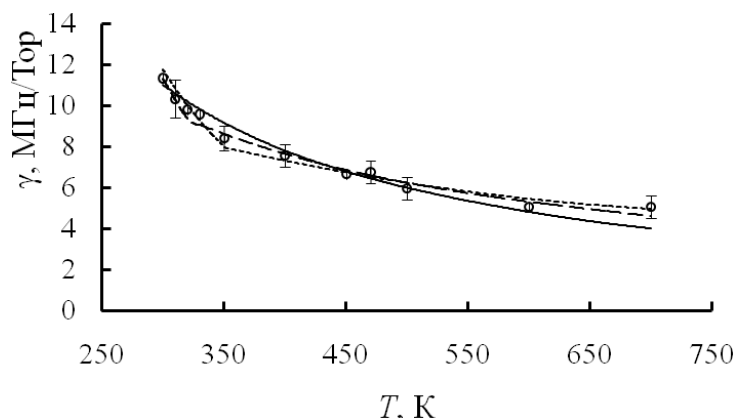


Рис.1. Температурная зависимость коэффициента столкновительного самоуширения $\gamma(T)$ спектральной линии R(34) перехода $10^{00}\text{-}00^01$ CO_2
 ○ – эксперимент

Аппроксимация экспериментальных данных функцией с двумя показателями степени согласуется с известными представлениями об изменении механизма взаимодействия сталкивающихся молекул CO_2 при изменении температуры газа [5]. При низких температурах и меньших скоростях молекул возрастает роль дальнедействующих мультипольных сил притяжения. Действие этих сил может приводить к различным ориентационным эффектам, к образованию кластеров из молекул CO_2 , появлению наведенных электрических моментов. Соответственно, при низких температурах функция $\gamma(T)$ имеет показатель степени n_1 . При высоких температурах и больших скоростях сталкивающихся молекул основную роль играют близкодействующие силы отталкивания и температурная зависимость $\gamma(T)$ имеет свой показатель степени n_2 . Реперная температура T_c разделяет два диапазона температур, в которых преобладают разные механизмы межмолекулярного взаимодействия.

На рис.1 сплошной линией показана обычно используемая зависимость (1) с одним показателем степени n и заданной реперной температурой $T_0 = 300$ К

$$\gamma(T) = 11.02 \cdot (300/T)^{1.201}. \quad (3)$$

Для получения функции $\gamma(T)$ вида (2) использовались экспериментальные данные из всего температурного диапазона и методом наименьших квадратов совместно были определены все искомые параметры $\{n_1, n_2, \gamma(T_C), T_C\}$: $T_C = (321 \pm 30.5)$ К, $\gamma(T_C) = (9.302 \pm 0.62)$ МГц/торр, $n = n_1 = (2.897 \pm 0.004)$ при $T < T_C$, $n = n_2 = (0.906 \pm 0.024)$ при $T > T_C$ (вид штриховой линии $\cdots\cdots$ на рис.1). Погрешности искомых параметров рассчитывались на базе формализма расчета ковариационных матриц [6]. Следует отметить, что ранее нами использовался иной подход для расчетов коэффициента ударного самоуширения вида (2) [4] (вид на рис.1 — — —). Пологий и крутой участки зависимости $\gamma(T)$ рассматривались отдельно. Используя значения $\{\gamma_i\}$, например, на крутом участке, определялись три параметра $\{n_1, \gamma(T_C), T_C\}$. Затем полученные значения двух параметров $\{\gamma(T_C), T_C\}$ и экспериментальные коэффициенты $\{\gamma_i\}$ другого участка использовались для вычисления четвертого параметра n_2 . Более достоверная аппроксимация экспериментальных данных модельными функциями (2) и (3) определялась по величине коэффициента аппроксимации R^2

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (\gamma_i - \hat{\gamma}_i)^2}{\sum (\gamma_i - \bar{\gamma})^2}, \quad (4)$$

где γ_i – i -е значение экспериментально наблюдаемой функции, $\hat{\gamma}_i$ – i -е значение модельной функции, $\bar{\gamma}$ – среднее значение наблюдаемых данных. Из предлагаемых модельных функций более правдоподобна та функция, для которой коэффициент аппроксимации (4) более близок к 1. Для линии $R(34)$ коэффициент $R^2 = 0.950$ соответствует зависимости (3). В случае расчетов относящихся к формуле (2) получаем $R^2 = 0.975$ (при раздельном рассмотрении двух участков) и $R^2 = 0.981$ (при рассмотрении всего температурного диапазона). Следовательно, используя экспериментальные данные для всего температурного диапазона, методом наименьших квадратов получено наиболее точное выражение (2), которое описывает температурную зависимость $\gamma(T)$.

1. Huang X., Gamache R.R., Freedman R.S., et al. // JQSRT. 2014. V.147. P.134–144.
2. Latouroux J., Gamache R.R., Laraia A.L., et al. // JQSRT. 2012. V.113. P.1536–1546.
3. Андреев С.Н., Очкин В.Н., Савинов С.Ю. // Квант. электр. 2002. Т.32, №7. С.647–653.
4. Аришинов К.И., Крапивная О.Н., Невдах В.В. // Опт. атм. и ок. 2017. Т. 30, № 3. С.193–197.
5. Невдах В.В., Орлов Л.Н., Лешенюк Н.С. // ЖПС.2003. Т. 70, № 2. С.246–253.
6. Мудров В.И., Кушко В.Л. Методы обработки измерений // М.: Радио и связь, 1983. 304с.