

Труды XXVII научной конференции по радиофизике

**СЕКЦИЯ  
«ОБЩАЯ ФИЗИКА»**

Председатель – М.И. Бакунов, секретарь – Е.З. Грибова.  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ БИМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ $\text{CO}_2\text{-CO}_2$ И $\text{CO}_2\text{-Ar}$ В ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ 156–255 ГГц

И.С. Амерханов<sup>1, 2)</sup>, Т.А. Галанина<sup>1)</sup>, А.О. Королева<sup>1)</sup>, Е.А. Серов<sup>1)</sup>,  
М.А. Кошелев<sup>1)</sup>, М.Ю. Третьяков<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> ИИФ РАН

<sup>2)</sup> ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Возрастающие требования к точности описания радиационных и климатических свойств атмосфер экзопланет и планет земной группы приводят к необходимости учета бимолекулярного поглощения. Оно обусловлено парным взаимодействием, приводящим к образованию новых поглощающих объектов – свободных пар, метастабильных и стабильных димеров. Для описания спектров бимолекулярного поглощения представляется перспективным использование численного метода на основе классических траекторий. Высокоточные лабораторные экспериментальные данные необходимы для валидации результатов и развития метода теоретических расчётов.

В настоящее время метод классических траекторий применяется для расчета спектров бимолекулярного поглощения неполярных молекул (например,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  и их смесей с инертными газами). Результаты расчетов демонстрируют хорошее согласие с экспериментальными данными, полученными в мм- и дальнем ИК-диапазонах [1,2]. Ожидается, что в будущем метод классических траекторий будет распространен на случай полярных молекул ( $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ) и позволит рассчитать бимолекулярное поглощение водяного пара, которое вносит существенный вклад в поглощение излучения атмосферой Земли.

Данная работа является продолжением цикла работ [2, 3], целью которых является экспериментальное исследование бимолекулярного поглощения  $\text{CO}_2\text{-CO}_2$  и  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  в мм-диапазоне длин волн. В частности, бимолекулярное поглощение  $\text{CO}_2\text{-CO}_2$  и  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  исследовалось в диапазоне частот 145–255 ГГц при пяти температурах в интервале 268–333 К с помощью резонаторного спектрометра [4]. В качестве источника излучения использовалась лампа обратной волны (ОВ-24). Измерительным элементом спектрометра является открытый резонатор Фабри–Перо. При заполнении его объема поглощающим газом добротность уменьшается, а ширины резонансных кривых увеличиваются. Коэффициент поглощения пропорционален разнице ширин резонансных кривых, когда резонатор заполнен поглощающим ( $\Delta f$ ) и непоглощающим ( $\Delta f_0$ ) газами:

$$\alpha = \frac{2\pi}{c} (\Delta f - \Delta f_0). \quad (1)$$

Коэффициент бимолекулярного поглощения  $\alpha$ , измеряемый в эксперименте, складывается из поглощения, обусловленного взаимодействием молекул  $\text{CO}_2$  друг с другом (собственный континуум) и с молекулами Ar (сторонний континуум):

$$\alpha = \alpha_{\text{CO}_2\text{-CO}_2} + \alpha_{\text{CO}_2\text{-Ar}}. \quad (2)$$

В случае чистого углекислого газа коэффициент поглощения  $\alpha$  определяется только первым членом соотношения (2).

Так как всё наблюдаемое для углекислого газа поглощение является бимолекулярным, его величина пропорциональна произведению концентраций взаимодействующих молекул:

$$\alpha_{X-Y}(f, T, n) = C_{X-Y}(f, T)n_X n_Y, \quad (3)$$

где  $n$  – концентрация молекул,  $f$  – частота,  $T$  – температура,  $C$  – нормированный на концентрации коэффициент поглощения,  $X$  и  $Y$  – молекулы взаимодействующих газов.

Для наглядности представления экспериментальных данных используется спектральная функция, которая определяется как

$$S_{X-Y}(f, T) = C_{X-Y}(f, T) / f^2, \quad (4)$$

что соответствует нормировке на общий для всех типов поглотителей излучения «радиационный член», который в мм-диапазоне эквивалентен квадрату частоты  $f$ .

Спектральные функции экспериментального континуального поглощения чистого  $\text{CO}_2$  и его смеси с  $\text{Ar}$  аппроксимировались функцией, вид которой был эмпирически определен из результатов численных расчетов методом классических траекторий [2]:

$$F(f, T) = a_0(T)(1 - a_1 f^2) + a_2(T) \exp\left(\frac{-(f - a_3)^2}{a_4^2}\right), \quad (5)$$

$$a_{0,2}(T) = b_{0,2} + c_{0,2}T + d_{0,2}T^2.$$

Значения параметров аппроксимации (5), наилучшим образом соответствующие полученным экспериментальным данным, приведены в таблице.

Табл.

	$\text{CO}_2\text{-CO}_2$	$\text{CO}_2\text{-Ar}$
$b_0, 10^{-7}$ см амага <sup>-2</sup>	5.916	0.544
$c_0, 10^{-9}$ см амага <sup>-2</sup> К <sup>-1</sup>	-2.912	-0.1116
$d_0, 10^{-12}$ см амага <sup>-2</sup> К <sup>-2</sup>	3.889	0
$a_1, 10^{-7}$ см амага <sup>-2</sup> ГГц <sup>-2</sup>	0	2.778
$b_2, 10^{-7}$ см амага <sup>-2</sup>	2.683	0.4085
$c_2, 10^{-9}$ см амага <sup>-2</sup> К <sup>-1</sup>	-1.419	-0.1109
$d_2, 10^{-12}$ см амага <sup>-2</sup> К <sup>-2</sup>	1.946	0
$a_3$ , ГГц	0	98.56
$a_4$ , ГГц	190	57.62

Спектральные функции бимолекулярного поглощения чистого углекислого газа и его смеси с аргоном представлены на рис. 1 и 2 соответственно. Символы соответствуют экспериментальным данным, полученным в данной работе в диапазоне частот 156–255 ГГц, и в нашем предыдущем исследовании [3] в диапазоне частот 105–145 ГГц. Сплошные и пунктирные линии – результат аппроксимации экспериментальных данных функцией (5) и результаты расчетов методом классических траекторий при температурах 268 К (темно-синий), 279 К (светло-синий), 296 К (зеленый), 317 К (красный), 333 К (оранжевый), соответственно. Тёмно-зелёным обозначены данные, полученные ранее при комнатной температуре [2]. Неопределенность полученных аппроксимаций (включая статистическую и систематическую погрешность) составляет менее 1.8% и менее 4.4 % для спектральных функций  $\text{CO}_2\text{-CO}_2$  и  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  соответственно.

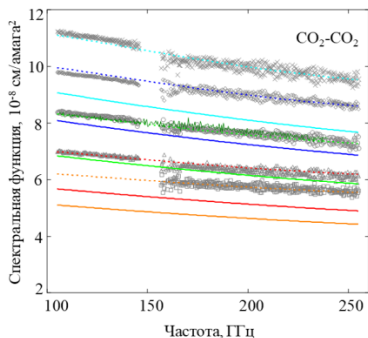


Рис. 1

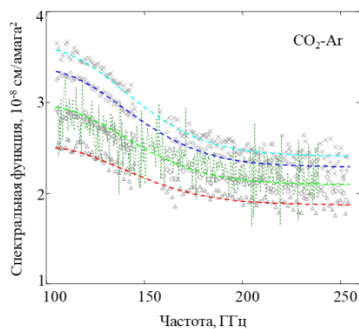


Рис. 2

Полученные данные о бимолекулярном поглощении  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  и  $\text{CO}_2\text{-CO}_2$  согласуются с результатами предыдущих исследований [2, 3]. Отметим, что в результате оптимизации волноводного тракта спектрометра экспериментальные записи спектров  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  получены с большим отношением сигнал/шум по сравнению с [3].

Расчёт воспроизводит частотные и температурные зависимости, наблюдаемые в эксперименте, хотя и отличается по величине на 10% и 20% в случае бимолекулярного поглощения  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  и  $\text{CO}_2\text{-CO}_2$  соответственно, что можно считать хорошим согласием, если брать во внимание сложность исследуемого объекта. Это занижение величины континуума вероятно связано с приближением жёстких мономеров, которое использовалось в расчётах. Согласно расчёту [2], отличие спектральных функций  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  и  $\text{CO}_2\text{-CO}_2$  мм-диапазона длин волн от постоянной величины обуславливается поглощением димерами  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  и  $\text{CO}_2\text{-CO}_2$ . Наблюдение в эксперименте аналогичной расчёту частотной и температурной зависимости говорит о существенном вкладе димеров в наблюдаемое поглощение. Полученные в ходе данной работы спектры представляют практический интерес для задач дистанционного зондирования атмосфер планет Солнечной системы, таких как Марс и Венера, а также экзопланет, которые состоят преимущественно из углекислого газа. В фундаментальном плане данная работа призвана помочь сделать ещё один шаг к теоретически обоснованному и подтвержденному данными лабораторных наблюдений неэмпирическому моделированию континуального поглощения в чистых газах и их смесях.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект 22-17-00041.

- [1] Serov E.A. // J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans. 2020. No. 242. P. 106774.
- [2] Odintsova T. A., et al. // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 2021. Vol. 258. P. 107400.
- [3] Одинцова Т.А. и др. // В кн.: Тр. XXVI научн. конф. по радиофизике. 12–27 мая 2022 г. / Ред. В.В. Матросов – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2022. С. 310.
- [4] Koshelev M.A., et al. // IEEE Trans. Terahertz. Sci. Technol. 2018. Vol. 8. I. 6. P.773.

## **МНОГОУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ МНОГОФОТОННЫХ ПРОЦЕССОВ В АТОМЕ ГЕЛИЯ В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ: УЧЁТ ИОНИЗАЦИИ И ВЫСОКОЭФФЕКТИВНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ ПОДПОРОГОВЫХ ГАРМОНИК**

**И.Р. Хайрулин, В.А. Антонов, М.Ю. Емелин, М.М. Попова,  
Е.В. Грызлова, М.Ю. Рябкин**

*ИИФ РАН*

Появление когерентных источников вакуумного ультрафиолетового и рентгеновского излучения, основанных на генерации гармоник высокого порядка (ГГВП) лазерного поля в газовых средах в режиме туннельной ионизации, на рубеже XX–XXI веков привело к зарождению аттосекундной физики – области науки, посвящённой исследованию и управлению динамикой физических и химических процессов в атомах, молекулах и твёрдых телах на аттосекундных временных масштабах [1].

Основой качественного понимания и теоретического описания процесса ГГВП в туннельном режиме ионизации на микроскопическом уровне стала трёхступенчатая модель перерасеяния [2]. Согласно этой модели, ГГВП протекает в три этапа: ионизация атома под действием интенсивного лазерного поля, ускорение оторванного электрона в поле, и его столкновение с родительским ионом, которое может привести к преобразованию набранной кинетической энергии в высокочастотный фотон. На квантово-механическом языке [3] этому соответствует появление высокочастотной нелинейной поляризации атома вследствие интерференции составляющих волновой функции, соответствующих высвобожденному и связанному электронам атома. Таким образом, в туннельном режиме ионизации важнейшую роль в процессе ГГВП играет динамика оторванного от атома электрона в континууме. Тем не менее, заметную роль также играют и особенности волновой функции связанного валентного электрона, что нашло своё применение в ГГВП-спектроскопии атомов и молекул [4].

Туннельный режим ионизации, соответствующий высокой интенсивности и малой частоте лазерного поля, привлекателен для ГГВП тем, что позволяет генерировать гармоники с энергиями фотонов более 1 кэВ [5]. При этом фазы высоких гармоник в области плато могут быть упорядочены, что позволяет использовать их для формирования аттосекундных импульсов [6]. В то же время, эффективность ГГВП в режиме туннельной ионизации оказывается невысокой, что объясняется, во-первых, распылением свободной части электронного волнового пакета, а во-вторых, рассогласованием фазовых скоростей генерируемых гармоник и лазерного поля, обусловленным, прежде всего, появлением плазмы вследствие ионизации среды. Более того, для генерации гармоник в туннельном режиме, как правило, необходимо использовать дополнительные каскады усиления для лазерного излучения, что значительно снижает частоту повторения импульсов, являющуюся важным параметром с точки зрения достижения высокого отношения сигнал/шум в экспериментах с использованием высоких гармоник.

В связи с этим в последние годы большой интерес вызывает генерация гармоник в многофотонном и промежуточном режимах ионизации [7], которые реализуются при больших частотах и меньших интенсивностях лазерного поля. При этом эффективность генерации гармоник существенно увеличивается вследствие уменьшения как степени распыления свободной части электронного волнового пакета, так и степени ионизации

среды. Более того, при наличии промежуточных многофотонных резонансов с возбуждёнными связанными состояниями атома эффективность генерации гармоник дополнительно возрастает. Однако описание генерации гармоник в многофотонном и промежуточных режимах ионизации представляет собой сложную задачу, так как приближения, используемые при описании ГГВП в туннельном режиме ионизации, становятся неприемлемыми.

В настоящей работе для описания многофотонных процессов в атоме в присутствии лазерного поля была использована модель, предложенная нами в работе [8]. В качестве объекта исследований был выбран наиболее простой многоэлектронный атом – атом He. Данная модель основана на решении нестационарного уравнения Шредингера (НУШ) относительно волновой функции многоэлектронного атома в лазерном поле путём её разложения по стационарным состояниям. При этом в разложении учитываются как связанные состояния атома, так и состояния одноэлектронного континуума. В результате уравнение Шредингера относительно волновой функции атома может быть переписано в виде бесконечной системы связанных уравнений относительно амплитуд возбуждения соответствующих стационарных состояний, для решения которой делаются три приближения. Во-первых, так как в задаче имеется характерная частота, а именно частота лазерного поля, то амплитуды возбуждения связанных состояний представляются в виде разложения в ряд Фурье по гармоникам лазерного поля. Во-вторых, так как для описания особенностей генерации подпороговых гармоник в условиях многофотонных резонансов со связанными состояниями атома можно не учитывать динамику свободной части электронного волнового пакета, то для описания многофотонной ионизации используется метод адиабатического исключения состояний континуума [9], в котором учитываются только те состояния континуума, в которые разрешены дипольные переходы из связанных состояний атома. И в-третьих, в модели пренебрегается влиянием обратных переходов из состояний континуума в связанные состояния на амплитуды возбуждения последних, что оправдывается малой степенью ионизации. С учётом перечисленных приближений система уравнений относительно амплитуд возбуждения стационарных состояний атома сводится к линейной однородной системе уравнений относительно фурье-компонент амплитуд возбуждения связанных состояний, каждая из которых характеризуется своей скоростью ионизации. Эту систему удобно рассматривать в квазиэнергетическом представлении, где каждый номер  $n$  в Фурье-разложении результирующей волновой функции представляет собой набор квазиуровней, энергии которых смещены относительно своего невозмущённого значения на  $n\Omega$ , где  $\Omega$  – энергия фотона лазерного поля. При этом населённость каждого квазиуровня изменяется вследствие ионизации, а также дипольных переходов на другие квазиуровни. Следует отметить, что в этой системе уравнений многоэлектронные свойства атома учитываются в значениях энергий стационарных состояний, а также дипольных моментов переходов между ними, которые могут быть вычислены в результате решения стационарного многоэлектронного уравнения Шредингера, например, многоконфигурационным методом Хартри–Фока [10].

На основе описанной выше модели было исследовано влияние многофотонного возбуждения атома на характер его ионизации. Показано, что резонансы между связанными состояниями (чётной фотонной кратности с дипольно-запрещёнными перехо-

дами и нечётной фотонной кратности с дипольно-разрешёнными переходами) приводят к резкому увеличению степени ионизации атома вследствие заселения соответствующих возбуждённых состояний и последующей быстрой ионизации. Результаты расчётов были сопоставлены с численными решениями НУШ из первых принципов методом операторного расщепления с быстрым преобразованием Фурье [11] в двумерной одноэлектронной модели атома гелия с эффективным потенциалом, позволяющим воспроизвести энергии первых трёх состояний реального атома гелия с нулевым магнитным квантовым числом. Сопоставление показало, что ионизация в условиях резонансов невысокой фотонной кратности с низколежащими возбуждёнными состояниями корректно описывается моделью [8]. Однако в условиях резонансов большей фотонной кратности и резонансов с вышележащими состояниями наблюдаются различия как в степени ионизации атома, так и в значениях частоты лазерного поля, при которых реализуются многофотонные резонансы. Это может быть следствием как недостаточного количества стационарных состояний, учитываемых в проведённых на основе модели [8] расчётах, так и неточностью воспроизведения высоковозбуждённых состояний атома гелия в двумерной модели, использованной при решении НУШ из первых принципов.

Кроме того, показано, что в режиме многофотонной ионизации модель [8] позволяет корректно описывать основные особенности резонансной генерации подпороговых гармоник (частоты которых лежат ниже потенциала ионизации атома), обусловленной многофотонными переходами между связанными состояниями атома. В то же время, генерация гармоник с частотами выше потенциала ионизации атома описывается моделью [8] значительно менее точно, так как для корректного описания их генерации требуется учёт динамики свободной части электронного волнового пакета.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 22-12-00389).

- [1] Krausz F., Ivanov M. // *Rev. Mod. Phys.* 2009. Vol. 81, № 1. P. 163.
- [2] Corkum P.B. // *Phys. Rev. Lett.* 1993. Vol. 71, № 13. P. 1994.
- [3] Lewenstein M., et al. // *Phys. Rev. A.* 1994. Vol. 49, № 3. P. 2117.
- [4] Wörner H.J., et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102, № 10. P. 103901.
- [5] Popmintchev T., et al. // *Science.* 2012. Vol. 336. P. 1287.
- [6] López-Martens R., et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94, № 3. P. 033001.
- [7] Chini M., et al. // *Nature Photon.* 2014. Vol. 8, № 6. P. 437.
- [8] Хайрулин И.П., et al. // *Оптика и спектроскопия.* 2023. Т. 131, № 2. С. 136.
- [9] Parker J., Stroud C.R. // *Phys. Rev. A.* 1990. Vol. 41, № 3. P. 1602.
- [10] Froese-Fischer C., Brage T., Johnsson P. *Computational Atomic Structure: An MCHF Approach.* – Bristol: IOP Publishing, 1997, p. 279.
- [11] Fleck J.A., Morris J.R., Feit M.D. // *Appl. Phys.* 1976. Vol. 10, № 2. P. 129.

## ПОГЛОЩЕНИЕ ВОДЯНОГО ПАРА В БЛИЖНЕМ ИК-ДИАПАЗОНЕ: ЛИНИИ И КОНТИНУУМ

А.О. Королева<sup>1)</sup>, S. Kass<sup>2)</sup>, D. Mondelain<sup>2)</sup>, A. Campargue<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> ИИФ РАН

<sup>2)</sup> Grenoble Alpes University

Окно прозрачности атмосферы 1,25 мкм находится вблизи максимума интенсивности приходящего в атмосферу солнечного излучения и имеет важное значение для ряда атмосферных и астрофизических приложений. Эта работа представляет собой обзор недавних лабораторных измерений резонансных линий и континуума основного поглотителя атмосферы – водяного пара, сделанных в этом окне прозрачности [1–3]. Спектры были записаны с помощью техники резонаторной спектроскопии (CRDS) [4]. Эта техника обеспечивает беспрецедентную чувствительность экспериментальных записей (уровень шума в единицах коэффициента поглощения  $a_{min} \sim 10^{-11} \text{ см}^{-1}$ ), позволяющую измерить как малоинтенсивные линии, так и континуум, имеющий сравнительно малую величину на фоне интенсивного резонансного спектра воды.

Для определения параметров резонансных линий спектр поглощения водяного пара при комнатной температуре зарегистрирован в диапазоне от 8041 до 8633  $\text{см}^{-1}$ . Определены положения и интенсивности более чем 5400 линий шести изотопологов воды ( $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{18}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$ ) в диапазоне интенсивностей  $3.6 \cdot 10^{-30}$ – $1.5 \cdot 10^{-22}$   $\text{см}/\text{молекулу}$ . Идентификация линий выполнена с использованием известных из предшествующих измерений экспериментальных уровней энергии молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  и результатов вариационных расчетов Швенке и Партриджа [5, 6]. Измеренные частоты линий позволили определить энергию 79 неизвестных ранее уровней  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$  и скорректировать 139 известных значений.

На рис. 1 представлены полученные данные [1], предыдущие экспериментальные работы [7, 8] и данные из базы HITRAN2020 [9], широко используемой для атмосферных приложений. Более 1600 линий измерены впервые. Также повышена точность определения частоты на порядок, до  $10^{-4} \text{ см}^{-1}$  (для изолированных линий средней интенсивности), благодаря использованию синтезатора частоты на основе лазерной гребенки [4]. Это позволило обнаружить систематическую ошибку ( $\sim 8 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ ) в значениях частот в [7–9], а также в списке W2020 [10] (он ориентирован на астрофизические приложения и содержит информацию о центральных частотах и интенсивностях  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ) при общем хорошем согласии новых данных с предшествующими. Изме-

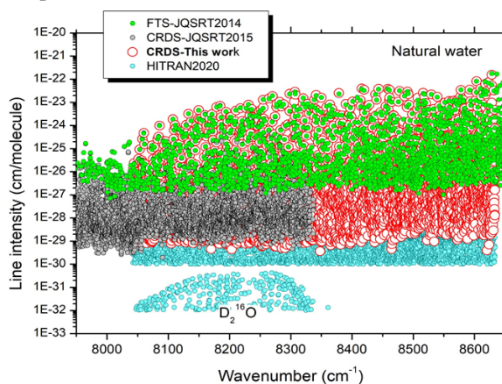


Рис. 1

нения частот в [7–9], а также в списке W2020 [10] (он ориентирован на астрофизические приложения и содержит информацию о центральных частотах и интенсивностях  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ) при общем хорошем согласии новых данных с предшествующими. Изме-



ренные интенсивности линий водяного пара также в целом хорошо согласуются с литературными данными, однако обнаружена переоценка интенсивностей в списке W2020 примерно на 10%.

Полученные данные позволили обнаружить значительное число ошибок и опечаток в HITRAN2020 и W2020. Это выражается в отсутствии наблюдаемых в эксперименте линий в этих списках, а также некорректных значениях параметров линий или их идентификации.

Результатом этой части работы стал список линий, содержащий информацию об определенных на основе экспериментальных данных центральных частотах линий и их интенсивностях вместе с их погрешностями, дополненную соответствующими каждому переходу квантовыми числами. Список доступен в приложении к статье [3].

Вторая часть работы относится к измерению связанного с влажностью континуального поглощения водяного пара  $\alpha_{cont}$ . Оно определяется эмпирически как разница между полным наблюдаемым в эксперименте поглощением и расчетным вкладом резонансных линий. Связанный с влажностью атмосферный континуум складывается из собственного континуума водяного пара  $\alpha_S$  и стороннего континуума водяного пара  $\alpha_F$ , возникающих из-за взаимодействия молекул воды между собой или с молекулами других газов, соответственно. Их характеристиками являются коэффициенты собственного и стороннего континуума  $C_S$  и  $C_F$ , связывающие поглощение с давлениями водяного пара  $P_W$  и стороннего газа  $P_F$  следующим образом:

$$\alpha_{cont} = \alpha_S + \alpha_F = C_S P_W^2 + C_F P_W P_F. \quad (1)$$

Высокочастотная информация об  $\alpha_S$  и  $\alpha_F$  была впервые получена в диапазоне частот 8120–8620 см<sup>-1</sup>. Измерения выполнены для чистого водяного пара, а также для влажных азота, кислорода и воздуха при комнатной температуре в микроокнах прозрачности между линиями воды. Последнее обусловлено тем, что в микроокнах вклад континуума в полное поглощение может быть сопоставимым с вкладом резонансных линий, а неточности параметров линий меньше влияют на результат вычисления континуума. Регистрировались зависимости полного поглощения от давления на фиксированной частоте. Континуум вычислялся по его эмпирическому определению с использованием контура Фойгта для моделирования формы резонансных линий в условиях эксперимента и с их параметрами из HITRAN2020.

Продемонстрированы ожидаемые в соответствии с уравнением (1) зависимости континуума от парциальных давлений атмосферных газов. Это, а также отличное согласие между поглощением, зарегистрированным при повышении и при понижении давления, свидетельствует об отсутствии систематических ошибок при измерении. Результаты определения коэффициентов собственного и стороннего континуума  $C_S$  и  $C_F$  показаны на рисунках 2 и 3. Численные значения коэффициентов континуума представлены в [2, 3].

В спектре собственного континуума водяного пара выявлен пик с центром около 8455 см<sup>-1</sup>, который предварительно интерпретирован как  $|0\rangle\langle 1|2\rangle\langle 1|$  полоса связанных димеров, (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>. Полученные результаты согласуются с предшествующими измерениями на более низких частотах [11] и в основном подтверждают корректность полуэмпирической модели MT\_SKD [12], широко используемой для атмосферных приложений. Кроме того, согласованность результатов измерений в азоте, кислороде и воздухе

(воздушный континуум складывается из азотного и кислородного с учетом их концентраций) – еще одно свидетельство отсутствия систематических ошибок в измерениях.

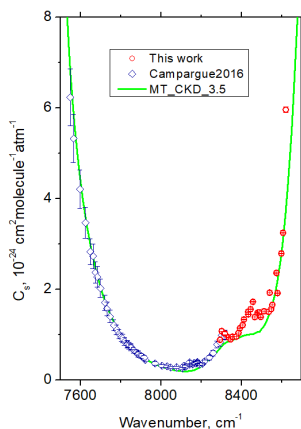


Рис. 2

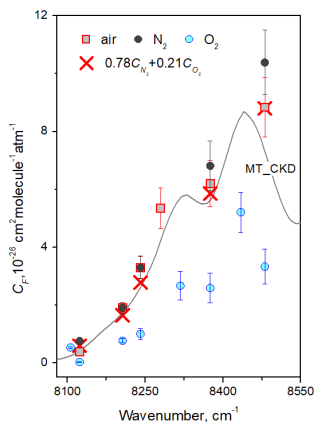


Рис. 3

Полученные новые данные об обоих составляющих поглощения водяного пара являются шагом к физически обоснованному моделированию полного поглощения. Экспериментальные данные о частотах и интенсивностях будут использованы для увеличения точности теоретических расчетов, а данные о континууме – для уточнения модели MT\_CKD и, с развитием теоретических методов расчета поглощения, связанного со столкновительным взаимодействием молекул, для перехода от эмпирического описания континуума к физически обоснованному.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание № 0030-2021-0016).

- [1] Koroleva A., et al. // JQSRT. 2023. Vol. 298. P. 108489.
- [2] Koroleva A., et al. // JQSRT. 2022. Vol. 286. P. 108206.
- [3] Koroleva A., et al. // JQSRT. 2023. Vol. 296. P. 108432.
- [4] Konefał M., et al. // JQSRT. 2020. Vol. 241. P. 106653.
- [5] Partridge H., Schwenke D.W. // J. Chem. Phys. 1995. Vol. 106. P. 4618.
- [6] Schwenke D.W., Partridge H. // J. Chem. Phys. 2000. Vol. 113. P. 6592.
- [7] Régalia L., et al. // JQSRT. 2014. Vol. 136. P. 119.
- [8] Campargue A., et al. // JQSRT. 2015. Vol. 157. P. 135.
- [9] Gordon I., et al. // JQSRT. 2020. Vol. 277. P. 107949.
- [10] Furtenbacher T., et al. // J. Phys. Chem. 2020. Vol. 49. P. 043103.
- [11] Campargue A., et al. // J. Geophys. Res. Atmos. 2016. Vol. 121, № 13. P. 180.
- [12] [https://github.com/AER-RC/MT\\_CKD](https://github.com/AER-RC/MT_CKD)

## О НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ РАСЧЕТНЫХ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ ЛИНИЙ ВОДЯНОГО ПАРА В СУБТГц ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ

Р.И. Овсянников, М.Ю. Третьяков, М.А. Кошелев, Т.А. Галанина

*ИПФ РАН*

Данная работа посвящена оценке неопределенности интенсивностей линий водяного пара в диапазоне частот до 1.75 ТГц. Рассматриваемый спектральный диапазон расположен в малоисследованной области между микроволновым и инфракрасным диапазонами, известной как «терагерцовый провал», измерения в которой затруднены в основном из-за отсутствия хороших источников и приемников излучения (см., напр., обзоры [1, 2]). В эту область попадают линии чисто вращательных переходов молекулы воды. Наиболее точные измерения интенсивностей линий  $\text{H}_2\text{O}$  в этом диапазоне были выполнены с помощью Фурье-спектрометров (см. [3] и приведенные там ссылки). Погрешность измерения для интенсивных линий составляла при этом 3–5%, увеличиваясь до 20–30% для слабых. Расчеты интенсивностей линий методом эффективных гамилтонианов [3–5] предсказывают интенсивности линий с более высокой точностью, но нельзя гарантировать, что эта точность значительно меньше разброса экспериментальных данных, составляющего те же 3–5% (см. рис. 4 и 6 из [4] и рис. 5 из [3]). Для многих спектроскопических приложений требуется более высокая точность.

Альтернативный высокоточный способ расчета интенсивностей линий на основе вариационных расчетов представлен в работе [6], где продемонстрировано среднее отклонение расчетов от известных экспериментов, составляющее для некоторых колебательно-вращательных полос 1–2%. И хотя в работе [7] продемонстрирована точность 0.4%, достигается она не для всех линий.

Означает ли вышесказанное, что интенсивности линий вращательной полосы молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  рассчитываются с погрешностью менее 1%? Чтобы ответить на этот вопрос, в настоящей работе были проанализированы линии поглощения молекулы  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  с интенсивностью более  $10^{-28}$  см/молек, попадающие в диапазон 0–1.75 ТГц. Эти линии соответствуют чисто вращательным переходам в основном колебательном состоянии (000), чисто вращательным переходам в пределах фундаментального изгибного колебательного состояния (010) и его обертоном (020), чисто вращательным переходам в валентных колебательных состояниях растяжения связей (100) и (001) и колебательно-вращательным переходам между этими состояниями. На рис. 1 показана диаграмма рассматриваемого спектра.

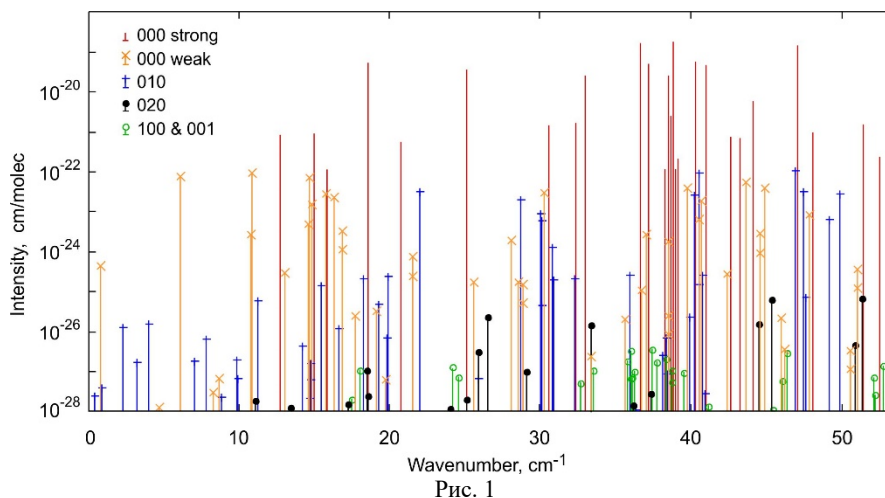


Рис. 1

Интенсивности выбранных линий были взяты из различных общедоступных источников. Они включают в себя информацию из баз данных HITRAN [8, 9], GEISA [10, 11], JPL [12] (эти списки в данной работе будут условно обозначаться как HIT20, GEI15, JPL12, соответственно, используя цифры как указатель года, в котором они были обнародованы) и ExoMol [13, 14]. В базе ExoMol приводятся несколько спектров молекулы воды, полученных вариационными методами: (1) BT2 [15] (BT206); (2) POKAZATEL [16] (POK18); (3) WAT-UV296 [17] (WAT20). Дополнительно использовались результаты двух квантовохимических расчетов интенсивностей линий из работы [18], (Bub11) и (Miz18).

Простейшие рассуждения подсказывают взять среднее арифметическое всех расчетных значений интенсивности для каждой линии как первое приближение наиболее вероятного значения. Для наиболее сильных переходов основного колебательного состояния (рис. 2) вычисленные таким образом отклонения расчетов интенсивностей оказались в основном менее 1%. На рис. 3 представлены переходы в пределах изгибного колебательного состояния  $\nu_2$  с энергией  $\sim 1600$   $\text{cm}^{-1}$ . Видно, что отклонения от среднего заметно больше, чем для основного состояния рис. 2. Наибольшее отклонение демонстрирует расчет JPL12. Фактически он является предшествующей версией более точного расчета GEI15, который был получен таким же методом, но с привлечением новых экспериментальных данных. Наилучшими для состояния  $\nu_2$  представляются данные POK18 и WAT20 с небольшим преимуществом у POK18.

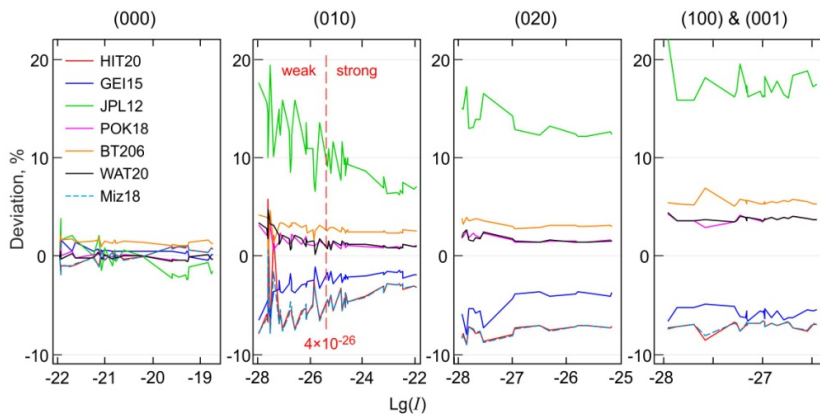


Рис. 2

Рис. 3

Рис. 4

Рис. 5

На рис. 4 показаны переходы в колебательном состоянии  $2\nu_2$  с энергией  $\sim 3200 \text{ см}^{-1}$ , а на рис. 5 переходы в состояниях  $\nu_1$  и  $\nu_3$ . Энергия нижних уровней этих переходов  $\sim 3700 \text{ см}^{-1}$ . На рис. 4 и 5 данные разбиваются на три группы: интенсивности GEI15, Miz18 и HIT20 систематически меньше средних значений на 7–9%, интенсивности JPL12 больше на 12–20%, а BT206, POK18 и WAT20 группируются друг с другом с общим средним отклонением 2–5%. Столь большой разброс данных приводит к ещё более низкой достоверности оценок, основанных на вычислении среднего значения интенсивностей. Интересно, что СКО для всех колебательных состояний похоже, что указывает на то, что вращательная часть в расчетах интенсивных линий учитывается корректно, а ошибка обусловлена только колебательной частью потенциала и соответствующими волновыми функциями.

Можно сказать, что в рассматриваемом диапазоне частот неопределенность расчетной интенсивности вращательных линий молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  в основном колебательном состоянии составляет от 1 до 2% в диапазоне интенсивностей от  $10^{-21}$  до  $10^{-27}$  см/молек, менее 1% для более интенсивных и 5–10% для менее интенсивных линий. Исключение составляет линия на частоте  $0.74 \text{ см}^{-1}$  с интенсивностью  $4.39 \cdot 10^{-25}$  см/молек. Возможно, эта линия относится к так называемым «нестабильным», для которых небольшие вариации в расчётных параметрах приводят к существенным изменениям интенсивности [19]. Действительно, расчеты POK18 и WAT20, хорошо согласующиеся друг с другом во всех остальных случаях (СКО разности составляет 0.6%), отличаются для этой линии почти на 3%. Имеющиеся расчетные и экспериментальные данные показывают, что погрешность интенсивности этой линии лежит в диапазоне от 2 до 5%.

Для сильных (более  $10^{-26}$  см/молек) линий в состоянии  $\nu_2$  неопределенность составляет 2–5% и увеличивается до 5–10% для слабых линий. Для всех линий в состояниях  $2\nu_2$ ,  $\nu_1$  и  $\nu_3$  неопределенность составляет 5–10%.

Отметим, что по оценке HITRAN для основного колебательного состояния неопределенность интенсивности составляет 2–5% для всех линий с интенсивностью более  $10^{-27}$  см/молек. Такая же неопределенность указана для состояния  $v_2$ . Для всех менее интенсивных линий в основном состоянии и линий в остальных рассматриваемых в этой работе колебательных состояниях HITRAN дает погрешность  $\geq 20\%$ . Наши оценки показывают, что большинству этих линий может быть присвоена более высокая (на 1–2 ступени по принятой в HITRAN классификации) категория точности по интенсивности, которая может быть определена для каждой конкретной линии на основании имеющихся данных. Наиболее надежной оценкой наиболее вероятного значения интенсивности линий представляется среднее между расчетами GEI15, POK18 и WAT20.

Авторы благодарят О.Л. Полянского и Н.Ф. Зобова за чтение рукописи и ценные комментарии.

Работа выполнена в рамках проекта РФФ № 22-72-10118. Используемые экспериментальные данные для линий  $\text{H}_2\text{O}$  вблизи 183 и 325 ГГц получены на оборудовании «ЦКП-7» (УНУ №3589084).

- [1] Sizov F., Rogalski A. // Prog. Quantum Electron. 2010. Vol. 34. No. 5. P. 278–347.
- [2] Consolino L., Bartalini S., De Natale P. // J. Infrared Millim. Terahertz Waves. 2017. Vol. 38. No. 11. P. 1289–1315.
- [3] Yu S., et al. // J. Mol. Spectrosc. 2012. Vol. 279. P. 16–25.
- [4] Coudert L.H., et al. // J. Molec. Spectrosc. 2008. Vol. 251. P. 339–357.
- [5] Coudert L.H., Martin-Drumell M.-A., Pirali O. // J. Mol. Spectrosc. 2014. Vol. 303. P. 36–41.
- [6] Schwenke D. W., Partridge H. // J. Chem. Phys. 2000 Vol. 113. P. 6592.
- [7] Lodi L., Tennyson J., Polyansky O.L. // J. Chem. Phys. 2011. Vol. 135. No. 3. P. 034113.
- [8] Gordon I.E., et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. Vol. 277. P. 107949.
- [9] <https://hitran.org/>
- [10] Jacquinet-Husson N., et al. // Journal of Molecular Spectroscopy. 2016. Vol. 327. P. 31–72.
- [11] <https://geisa.aeris-data.fr/#>
- [12] <https://spec.jpl.nasa.gov/ftp/pub/catalog/catdir.html>
- [13] Tennyson J., Yurchenko S.N. // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2012. Vol. 425(1). P. 21–33.
- [14] <https://www.exomol.com/>
- [15] Barber R.J., Tennyson J., Harris G.J., Tolchenov R.N. // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2006. Vol. 368. P. 1087–1094.
- [16] Polyansky O.L., et al. // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2018. Vol. 480. No. 2. P. 2597–2608.
- [17] Conway E.K., et al. // Atmos. Chem. Phys. 2020. Vol. 20. P. 10015–10027.
- [18] Mizus I.I., et al // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. 2018. Vol. 376. P. 20170149.
- [19] Lodi L., Tennyson J. // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer. 2012. Vol. 113. P. 850–858.

**СТИМУЛИРОВАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С  
КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ Hg(Cd)Te/CdHgTe В ОБЛАСТИ 20–24 МКМ ПРИ  
НЕПРЕРЫВНОЙ И 24–31 МКМ ПРИ ИМПУЛЬСНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ НАКАЧКЕ**

А.А. Разова<sup>1, 2)</sup>, А.А. Себина<sup>1)</sup>, Н.Н. Михайлов<sup>3)</sup>, С.А. Дворецкий<sup>3)</sup>, С.В. Морозов<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> ННГУ им. Н.И. Лобачевского

<sup>2)</sup> ИФМ РАН

<sup>3)</sup> ИФП СО РАН

Как известно, гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) Hg(Cd)Te/CdHgTe привлекательны в качестве материала для лазеров среднего инфракрасного (ИК) диапазона. За счет прогресса в области молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) структуры на основе HgCdTe являются высококачественными, что подтверждается недавними исследованиями энергии Урбаха [1]. Наличие квазигиперболического закона дисперсии носителей позволяет подавить оже-процесс, препятствующий излучательной рекомбинации [2]. В том числе и поэтому особое внимание уделяется диапазону длин волн, где на данный момент недоступны квантово-каскадные лазеры (ККЛ). Хорошо известно, в ИК области 20–60 мкм они могут обеспечивать генерацию только на определенных длинах волн, что определяется сильным решеточным поглощением в большинстве полупроводников  $A_3B_5$ , используемых для их создания. Альтернативой могут служить межзонные лазеры на основе Hg(Cd)Te/CdHgTe, еще одним преимуществом которых по сравнению с ККЛ является непрерывная перестройка длины волны. На данный момент стимулированное излучение (СИ) в структурах с КЯ на основе HgCdTe было продемонстрировано за пределами 24 мкм, а именно при 31 мкм [2], однако диапазон между 24 и 31 мкм был покрыт не полностью.

В данной работе исследуются факторы, ограничивающие длину волны генерации СИ в гетероструктурах с КЯ на основе HgCdTe, и проводится оптимизация волноводного слоя CdHgTe для получения генерации в области 24–31 мкм.

Исследуемые структуры были выращены методом МЛЭ на подложках GaAs с ориентации (013). Структуры содержат 50 нм ZnTe-буфер, за которым следует CdTe-буфер толщиной  $D_{\text{буф}}$  и волноводные слои  $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$  с 15 КЯ  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  толщиной  $d$  (см. табл.) [3]. Спектры СИ исследуются с помощью фурье-спектрометра Bruker Vertex 80v в режиме пошагового сканирования. Спектрометр оптически сопряжен с помощью эллиптического зеркала с гелиевым криостатом замкнутого цикла, имеющим возможность перестройки температуры в диапазоне 8–300 К.

Таблица

Номер структуры	$D$ , мкм	$y$	$x$	$d$ , нм
S1	10	0.61	0.065	7.4
S2	10	0.7	0.065	7.9
S3	15	0.6	0.074	7.8
S4	15	0.6	0.074	7.76

На рис. 1 представлены спектры СИ структур S1 и S2 при разных температурах. Видно, что линии СИ структуры S1 с ростом температуры смещаются в коротковолновую область из-за увеличения ширины запрещенной зоны. При этом в структуре S2 температурный сдвиг отсутствует. Расчет радиационных потерь в зависимости от

длины волны показывает, что в области длин волн от 31 до 25 мкм происходит резкое увеличение потерь (показаны на рис. 1 штриховой линией). Таким образом, для структуры S1 с повышением температуры спектр СИ смещается в область с меньшими потерями, и поэтому он наблюдается вплоть до 70 К, в то время как для структуры S2 ситуация противоположная [4].

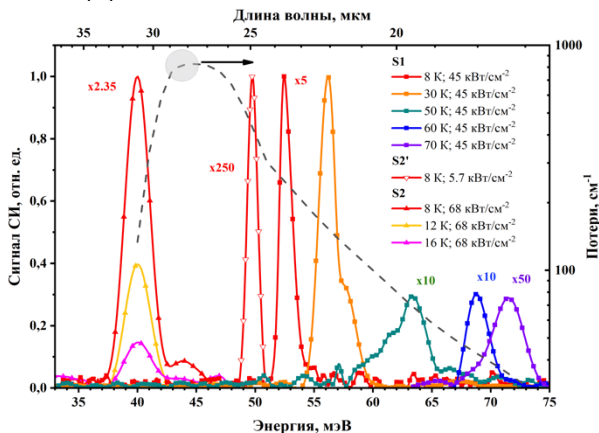


Рис. 1

В структурах существуют незначительные флуктуации параметров по шайбе, что приводит к изменению ширины запрещенной зоны. Благодаря этому из структуры S2 удалось найти образец S2', который обеспечивал СИ при 25 мкм (рис. 1), однако образец, генерирующий излучение в диапазоне от 25 до 31 мкм, не был найден, что также объясняется высокими потерями в этой области спектра.

Рекордная длина волны 31 мкм была получена за счет ограничения проникновения волноводной моды в подложку вблизи остаточных лучей арсенида галлия [2]. В этом диапазоне коэффициент отражения GaAs-подложки значительно возрастает, и подложка обеспечивает все лучшее удержание света в волноводе, когда длина волны увеличивается с 27 до 31 мкм. По-видимому, максимальные потери при 25–31 мкм связаны с утечкой моды в подложку.

Для предотвращения «вытекания» моды в GaAs-подложку толщина буфера CdTe была увеличена с 10 мкм до 15 мкм, благодаря чему в диапазоне длин волн от 25 до 31 мкм удалось уменьшить потери практически на порядок. В результате в оптимизированной структуре S3 удалось получить спектры СИ на длинах волн 27–18 мкм в диапазоне температур от 8 до 72 К (рис. 2).

Из рис. 3, который демонстрирует зависимость отношения модовых потерь к фактору оптического ограничения от длины волны, видно, что модовые потери в области 20–24 мкм отличаются на порядок у структур S4 и S2. Это является одним из факторов, позволяющих получить в структуре S4 генерацию СИ в условиях квазинепрерывного возбуждения на длине волны 24–20 мкм (рис. 4). При этом ширина линии составила менее 0.5 мэВ при интенсивности возбуждения 0.8–3 Вт/см<sup>2</sup>. При импульсной накачке длительность импульса составляет 10 нс и мощность  $P_{\text{имп}} \sim 1000$  Вт/см<sup>2</sup>, тогда как при



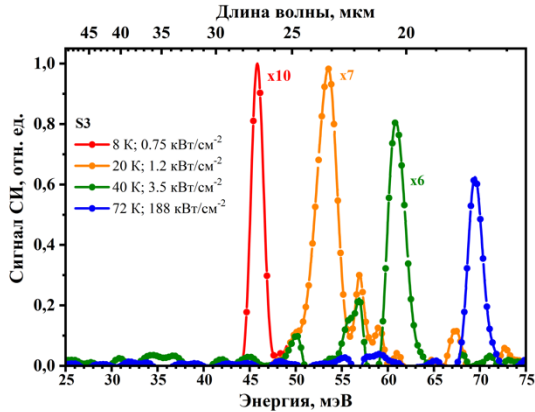


Рис. 2

квазинепрерывной накачке длительность импульса  $\sim 45$  мкс и мощность  $P_{\text{непр}} \sim 3$  Вт/см<sup>2</sup>. Теоретически можно показать, что в структурах с КЯ на основе HgCdTe при концентрациях носителей менее  $10^{11}$  см<sup>-2</sup> процесс оже-рекомбинации не наблюдается, а время жизни носителей составляет около 200 нс. В результате квазинепрерывная накачка в отличие от импульсной позволяет плавно создавать инверсию населенностей, что уменьшает порог наблюдения СИ на три порядка и значительно снижает разогрев носителей.

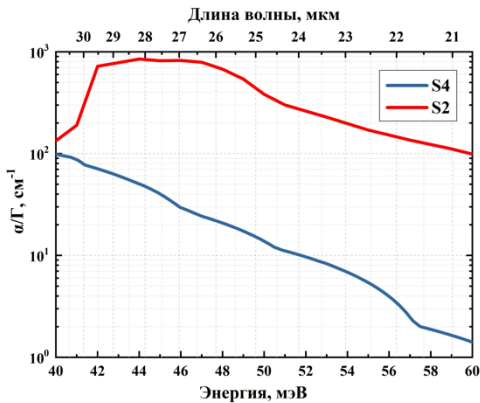


Рис. 3

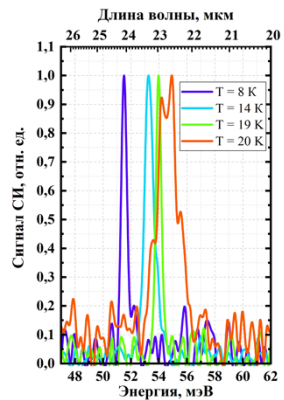


Рис. 4

Таким образом, было продемонстрировано СИ гетероструктур с КЯ Hg(Cd)Te/CdHgTe на длинах волн 31 и 27 мкм при импульсной оптической накачке, которые не используются существующими ККЛ. Оптимизация волноводного слоя привела к уменьшению модовых потерь и, как следствие, к получению СИ в диапазоне 27–

18 мкм при импульсной оптической накачке и 24–20 мкм при непрерывной оптической накачке при перестройке температуры. Уменьшение модовых потерь и использование квазинепрерывной накачки, позволяющей сколь угодно долго накапливать носители на уровнях размерного квантования для получения инверсии населенности, с временем оптического импульса больше излучательного времени межзонного перехода в случае, когда безызлучательные процессы подавлены, позволили добиться столь значительного улучшения по уменьшению порога наблюдения СИ в гетероструктурах с КЯ на основе HgCdTe.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-12-00310).

- [1] Rumyantsev V.V., Razova A.A., Fadeev M.A., Utochkin V.V., Mikhailov N.N., Dvoretzky S.A., Gavrilenko V.I., Morozov S.V. // *Opt. Eng.* 2021. Vol. 60, No. 8. P. 082007.
- [2] Morozov S.V., Rumyantsev V.V., Zholudev M.S., Dubinov A.A., Aleshkin V.Y., Utochkin V.V., Fadeev M.A., Kudryavtsev K.E., Mikhailov N.N., Dvoretzky S.A., Gavrilenko V.I., Teppe F. // *ACS Photonics*. 2021. Vol. 8. P. 3526–3535.
- [3] Mikhailov N.N., Smirnov R.N., Dvoretzky S.A., Sidorov Yu.G., Shvets V.A., Spesivtsev E.V., Rykhlytski S.V. // *Int. J. of Nanotechnology*. 2006. Vol. 3, No. 1. P. 120.
- [4] Rumyantsev V.V., Dubinov A.A., Utochkin V.V., Fadeev M.A., Aleshkin V.Ya., Razova A.A., Mikhailov N. N., Dvoretzky S.A., Gavrilenko V.I., Morozov S.V. // *Applied Physics Letters*. 2022. Vol. 121. P. 182103.

## ФОРМА И ПАРАМЕТРЫ ЛИНИЙ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ КИСЛОРОДА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ ДЛЯ УШИРЕНИЯ ДАВЛЕНИЕМ АЗОТА

А.Ю. Секачева<sup>1,2)</sup>, М.А. Кошелев<sup>1)</sup>, И.Н. Вилков<sup>1)</sup>, Т.А. Галанина<sup>1)</sup>,  
Е.А. Серов<sup>1)</sup>, Д.С. Макаров<sup>1)</sup>, М.Ю. Третьяков<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> ИИФ РАН

<sup>2)</sup> ННГУ им. Н. И. Лобачевского

Миллиметровый спектр кислорода является традиционным для молекулярной спектроскопии объектом исследования, что обусловлено как фундаментальным интересом, так и практической важностью. С практической точки зрения, линии тонкой структуры вращательного спектра кислорода используются для решения задач дистанционного зондирования атмосферы радиометрическими методами. Для анализа радиометрических данных требуются модели распространения электромагнитного излучения в атмосфере. В основе таких моделей лежит высокоточная спектроскопическая информация о форме и параметрах линий поглощения основных атмосферных газов. От точности этой информации зависит интерпретация результатов радиометрических измерений.

Целью данной работы является повышение точности моделирования резонансного поглощения, обусловленного атмосферным кислородом, на основе новых экспериментальных данных.

Исследование формы линий кислорода осуществлялось с помощью спектрометра на основе стабилизированной по частоте лампы обратной волны и радиоакустического детектора сигнала поглощения (РАД-спектрометр), принцип действия которого представлен в работе [1].

Для записи спектров использовалась манипуляция частоты излучения с последующей демодуляцией сигнала спектрометра на частоте модуляции.

Записи пяти линий тонкой структуры кислорода, уширенных давлением азота, были получены при давлениях 0,3–2,9 Торр в интервале температур 235–357 К. Для линии 1- спектры регистрировались также с помощью резонаторного спектрометра при давлениях 500–1500 Торр при комнатной температуре.

Характерная запись линии тонкой структуры, полученная с помощью РАД- спектрометра, приведена на рис. 1. Форму наблюдаемой линии, обусловленную использованием частотной манипуляции, можно представить в виде  $S(f) = F(f + d) - F(f - d)$ , где  $f$  – частота излучения,  $d$  – девиация частоты,  $F(f)$  – форма линии, наблюдаемая при использовании модуляции мощности. Последующий анализ спектра производился с помощью контура Фойгта ( $V_p$ ) и выявил наличие систематических отклонений вблизи центра линии. Использование модифицированного контура Фойгта ( $qSDV_p$ ), учитывающего помимо столкновительной релаксации еще и её

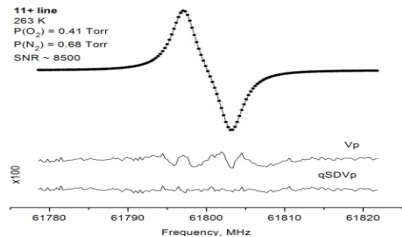


Рис. 1

зависимость от скорости поглощающих молекул (эффект «ветра») в виде квадратичной аппроксимации  $\Gamma(\nu) = \Gamma_0 + \Gamma_2 \left[ (\nu/\bar{\nu})^2 - 3/2 \right]$ , позволил описать спектры с точностью до шумов эксперимента в широком диапазоне давлений, что подтверждает корректность выводов о природе наблюдаемого эффекта.

В результате анализа экспериментальных спектров определены нормированные на давление  $P$  коэффициенты  $\gamma_0 = \Gamma_0/P$  и  $\gamma_2 = \Gamma_2/P$  в зависимости от температуры (см. рис. 2 и рис. 3). Для аппроксимации температурных зависимостей  $\gamma_0(T)$  и  $\gamma_2(T)$  использовалась эмпирическая функция вида  $X(T) = X(296) \left( 296/T \right)^{n_X}$ , которая показала хорошее согласие с экспериментальными зависимостями в исследуемом диапазоне температур. Из графика на рис. 2 видно, что при увеличении температуры параметр  $\gamma_0$  ожидаемым образом уменьшается.

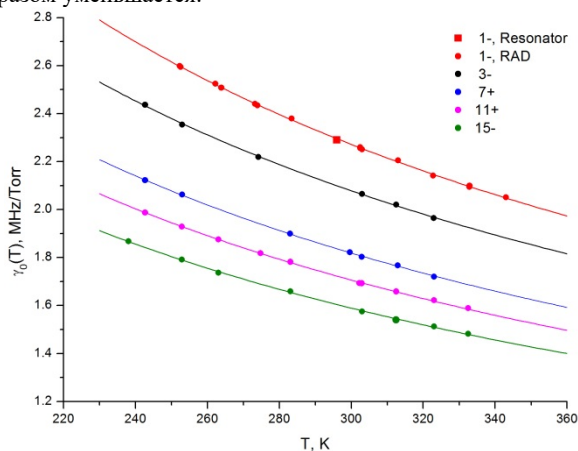


Рис. 2

Поскольку для  $\gamma_2$  эффект слабый, то разброс точек существенно больше, но тенденция его изменения с температурой прослеживается (рис. 3). Важно отметить хорошее согласие результатов, полученных для линии 1- с помощью двух спектрометров при существенно (на 2–3 порядка) отличающихся давлениях, что говорит о минимизации возможных систематических ошибок и повышает достоверность полученной информации.

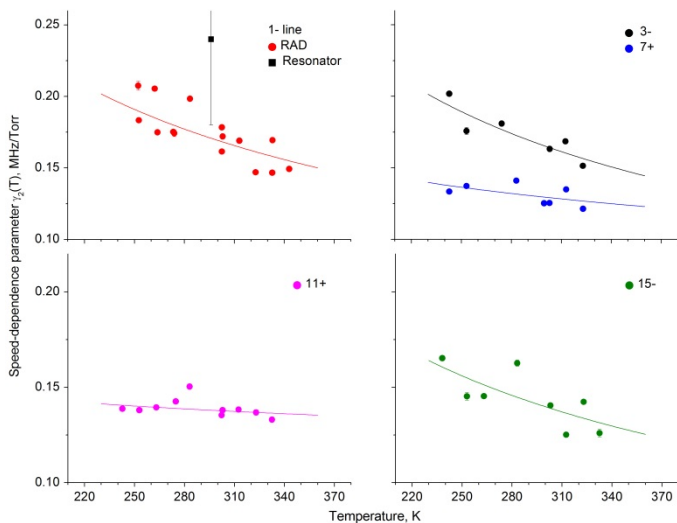


Рис. 3

Полученные экспериментальные данные позволили нам определить зависимость столкновительных параметров линий кислорода не только от температуры, но и от вращательного состояния молекулы. Зависимости для  $\gamma_0$  и  $\gamma_2$  мы аппроксимировали Паде-функцией для удобства использования результатов в моделях атмосферного поглощения. Зависимость температурного показателя  $n_{\gamma_0}$  уменьшается с ростом  $N$  от 0,78 до 0,75 при изменении  $N$  от 1 до 15. Для  $\gamma_2$  измерения менее точные, поэтому трудно сделать вывод о зависимости  $n_{\gamma_2}$  от  $N$ .

Точность новых экспериментальных данных позволила впервые увидеть зависимость центральной частоты линий тонкой структуры кислорода от давления  $f_c = f_0 + p^{N_2} \delta^{N_2}$ , где  $f_0$  – невозмущенная частота перехода,  $f_c$  – наблюдаемая частота перехода. Ранее считалось, что сдвиг  $\delta^{N_2}$  нулевой, но на рис. 4 видно, что при давлении 1 Торр частота систематически сдвигается на 2 кГц, и при атмосферном давлении это становится существенным изменением.

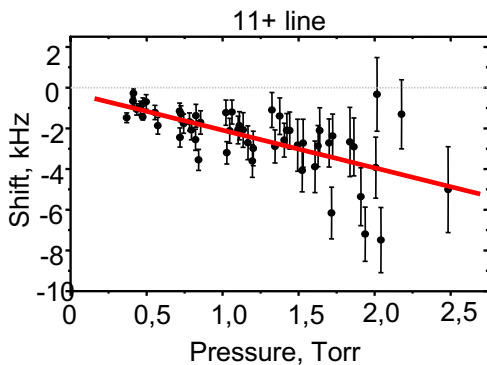


Рис. 4

Табл.

N	$\gamma_0$	$n_{\gamma_0}$	$\gamma_2$	$n_{\gamma_2}$	$\delta_2$
1-	2,296(1)	0,773(4)	0,171(3)	0,66(18)	-1,4(9)
3-	2,100(2)	0,742(8)	0,167(4)	0,74(19)	-4,5(19)
7+	1,837(2)	0,730(7)	0,130(3)	0,29(19)	-3,0(6)
11+	1,723(1)	0,719(4)	0,138(2)	0,10(10)	-1,8(3)
15-	1,605(2)	0,696(7)	0,141(4)	0,60(23)	-1,4(9)

Полученные данные (см. табл.;  $\gamma_{0,2}$  в МГц/Торр,  $\delta_2$  в кГц/Торр) совместно с результатами исследования самоуширения линий тонкой структуры [2] дают важную спектроскопическую информацию для развития моделей атмосферного поглощения излучения миллиметрового диапазона длин волн.

- [1] Третьяков М. Ю., Кошелев М. А., Макаров Д. С., Тонков М. В. // Приборы и техника эксперимента. 2008. № 1. С. 87.  
 [2] Koshelev M.A., et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2023. Vol. 298. P. 108493.

Секция «Общая физика»

Заседание секции проводилось 18 мая 2023 г.  
Председатель – М.И. Бакунов, секретарь – Е.З. Грибова.  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.