

К.А. Аганбекян, О.К. Войцеховская, В.В. Куликов, Н.Н. Трифонова

АБСОЛЮТНЫЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ЛИНИЙ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО КРЫЛА ЧИСТО ВРАЩАТЕЛЬНОЙ ПОЛОСЫ ВОДЯНОГО ПАРА

На автоматизированной спектральной установке, состоящей из многоходовой вакуумной камеры и дифракционного спектрометра, измерены абсолютные значения интенсивностей 117-ти чисто вращательных переходов водяного пара в районе 10–18 мкм.

Полученные величины позволили найти параметры колебательно-вращательного взаимодействия в F -факторе интенсивностей линий по методу наименьших квадратов и предсказать интенсивности линий для всей вращательной полосы H_2O с учетом внутримолекулярных взаимодействий. Анализ точности экстраполяции расчета на более высокие вращательные переходы проведен при сравнении со значениями интенсивностей, измеренных другими авторами.

Введение

Проведенное исследование вращательного спектра водяного пара стимулировано необходимостью количественной оценки селективного, поглощения H_2O в окне прозрачности атмосферы 8–14 мкм. Несмотря на продолжительную дискуссию о природе поглощения водяным паром в этом диапазоне [1–3], корректное разделение селективного и континуального компонентов в поглощении H_2O затруднено из-за практического отсутствия измерений интенсивностей чисто вращательного спектра H_2O .

Традиционно интенсивности линий водяного пара число вращательного спектра рассчитываются в нулевом приближении по модели жесткого асимметричного волчка. Основанием для этой модели служит тот факт, что вектор дипольного момента при чисто вращательном переходе изменяет лишь ориентацию в пространстве, оставаясь постоянным по величине. Однако полного анализа (на достаточно большом статистическом материале) справедливости применяемой модели не проводилось, так как эксперименты по измерению интенсивностей линий в этом районе выполнены в весьма узких спектральных интервалах и для небольшого числа линий [4–7]. Данная работа посвящена рассмотрению этого вопроса.

Описание эксперимента

Измерения проводились на автоматизированной спектральной установке, состоящей из многоходовой вакуумной камеры, работающей по схеме Уайта, и дифракционного спектрометра [8]. Система автоматизации создана на основе мини-ЭВМ «NORD-10» и комплекса аппаратуры, работающего в стандарте КАМАК. Дисперсионным элементом в спектрометре являлись эшелетты с размером рабочей поверхности 200×200 мм² и количеством штрихов 100 (150) штрих/мм. Источником излучения служил глобар, приемником — глубоководохлаждаемый германиевый болометр с чувствительностью $1,7 \cdot 10^{-12}$ Вт · Гц^{-1/2} и площадью $0,7 \times 7,0$ мм².

В целях увеличения диапазона величин измеряемых абсолютных интенсивностей линий эксперименты проводились при температурах 295–344 К, что позволило в широких пределах варьировать содержание паров воды в исследуемой смеси. Кроме того, при высоких температурах заселенность ряда высоких уровней (а следовательно, и интенсивности линий) увеличивалась более чем в три раза по сравнению с нормальными условиями. Длина оптического пути в камере менялась в пределах от 20 до 120 м. Все вышесказанное позволило уверенно измерить 117 линий, абсолютные интенсивности которых в нормальных условиях находятся в пределах $1 \cdot 10^{-5} \leq S \leq 2 \cdot 10^{-1}$ см⁻² · атм⁻¹.

Были записаны серии спектрограмм при парциальных давлениях воды $P_{H_2O} = 0,02 \div 90$ мм рт. ст. Уширяющим газом служил азот. Полное давление смеси составляло величину 740–760 мм рт. ст. При таких условиях полуширины спектральных линий, лежащие в пределах $\gamma_i = 0,03 - 0,1$ см⁻¹, оказываются сравнимыми с полушириной аппаратной функции спектрометра $\Delta\nu_A = 0,06 - 0,12$ см⁻¹. Соблюдение этого условия необходимо для достижения приемлемой точности нахождения спектральных параметров линий.

Обработка спектров осуществлялась методом минимизации с учетом аппаратной функции спектрометра [9]. Основная идея метода состоит в том, что минимизируется функционал U , являющийся невязкой наблюдаемой τ_n и некоторой синтезируемой (истинной τ_n) функций пропускания

$$U = \int_{\nu_1}^{\nu_2} \left[\tau_n(\nu) - \int_{\delta}^{\tau} \tau_n(\nu) \tau(\nu - \nu') d\nu' \right]^2 d\nu, \quad (1)$$

где ν_1 и ν_2 — границы исследуемого спектрального интервала; δ — область, где аппаратная функция $\tau(\nu - \nu')$ отлична от нуля.

Для исследования аппаратной функции проводилась регистрация линий генерации лазера и линий поглощения с известными параметрами. Ее форма хорошо описывается гауссовой кривой и, нормированная к единице, имеет вид

$$\tau(\nu - \nu') = \left(\frac{\Delta\nu^2 \pi}{\ln 2} \right)^{-1/2} \exp \left[- \ln 2 \left(\frac{\nu - \nu'}{\Delta\nu} \right)^2 \right]. \quad (2)$$

Истинная функция пропускания τ_n определяется совокупностью спектроскопических параметров линий поглощения, находящихся в исследуемом интервале, а также величиной континуального фона. Форма контура линий предполагалась лоренцевской.

Минимум функционала (1) находился итерационным методом Ньютона, в котором искомыми параметрами являлись абсолютная интенсивность, полуширина, положение центров линий, а также ширина аппаратной функции и параметры континуального фона.

Погрешность определения абсолютных интенсивностей линий определялась ошибками регистрации τ_n , неточным знанием концентрации H_2O , температуры среды и ошибками математической обработки. Как показали оценки, наибольший вклад в результирующую ошибку вносит погрешность определения концентрации воды. В нашем случае использовался абсорбционный влагомер «Волна-1М», который измеряет относительную влажность (в %) с абсолютной точностью до 1,5%. Например, при относительной 30%-ной влажности относительная ошибка концентрации порядка 5%. Температура в камере поддерживалась с точностью $\pm 0,5$ К, что при пересчете относительной влажности в абсолютную составляет 3%. Как показали результаты обработки, среднеквадратическое отклонение при отклонении абсолютных интенсивностей линий из серии спектрограмм варьировало в пределах 4–12%, что значительно превышает оценку погрешности, полученной из матрицы ковариаций при обработке одной спектрограммы (так как в нее не входит погрешность определения влажности). Достоверность величин интенсивности оказалась заметно выше достоверности определения полуширин, что обуславливается высокой корреляцией ошибок нахождения ширины аппаратной функции и ширины линий. Из общего числа зарегистрированных линий выбраны для дальнейшей теоретической обработки 117 линий, погрешности которых не превышали 20%.

Теоретическая обработка спектра

Формула для интенсивности линии чисто вращательного спектра имеет вид

$$S_{R''R'} = \frac{8\pi^3 n_0}{3hcQ} g_{R''} \exp - (E_{R''}/kT) |\langle R'' | M_z | R' \rangle|^2 [1 - \exp - (\nu_{R''R'}/kT)], \quad (3)$$

где h , π , c , k , n_0 — известные константы; Q — статистическая сумма; $E_{R''}$ — энергия нижнего вращательного состояния; $\nu_{R''R'}$ — центр линии; T — температура.

Матричный элемент дипольного момента определяется соотношением:

$$|\langle R'' | M_z | R' \rangle|^2 = |\mu_0|^2 \cdot {}_0 \langle R'' | \Phi(Z_g) | R' \rangle_0 \cdot F,$$

где μ_0 — постоянный дипольный момент; ${}_0 \langle R'' | \Phi(Z_g) | R' \rangle_0$ — матричный элемент направляющих косинусов в базисе волновых функций жесткого асимметричного волчка; F — фактор учета внутримолекулярных взаимодействий.

Наиболее подробно влияние внутримолекулярных взаимодействий на интенсивности линий чисто вращательного спектра H_2O рассмотрено в работе [10], в которой предложено следующее выражение для F -фактора:

$$F = (1 + \alpha_0 + \alpha_x C_{px} + \alpha_y C_{py} + \alpha_z C_{pz} + \alpha_{xy} C_{pxy})^2. \quad (4)$$

Для вывода этой формулы использовался математический аппарат матричной теории возмущений (ТВ), причем авторы ограничились первым порядком ТВ. Параметры $\{\alpha_i\}$ — спектроскопические характеристики всей вращательной полосы; коэффициенты $\{C_{pa}\}$ являются функциями вращательных квантовых чисел и рассчитываются на ЭВМ на основе программы [14].

Достаточный объем данных позволяет провести статистическую обработку спектра, решить обратную спектроскопическую задачу и найти параметры F -фактора. Определение численных значений проводилось стандартным методом наименьших квадратов [11]. В табл. 1 приведены значения найденных параметров и их относительная погрешность при 95%-ном доверительном интервале. Макси-

малое значение коэффициента корреляционной матрицы составляло 0,066, что говорит о статистической достоверности найденных значений.

Таблица 1

Значения параметров F -фактора для вращательной полосы H_2O

Параметр	Значение	(σ^2)
$1 + \alpha_0$	$9,925817 \cdot 10^{-1}$	$\pm 1,05 \cdot 10^{-3}$
α_x	$-2,386665 \cdot 10^{-4}$	$\pm 1,3 \cdot 10^{-8}$
α_y	$6,30666 \cdot 10^{-4}$	$\pm 1,8 \cdot 10^{-8}$
α_z	$3,09646 \cdot 10^{-3}$	$\pm 4,56 \cdot 10^{-7}$
α_{xy}	$6,827075 \cdot 10^{-4}$	$\pm 4,3 \cdot 10^{-8}$

Отдельно обсудим роль параметра α_0 , являющегося фактически поправкой к величине μ_0 . Трудность выбора значения μ_0 обусловлена вариациями этой величины [12]; нами использовалось значение $\mu_0 = (1,85 \pm 0,01)$ Дебай, рекомендованное [13]. Малое значение параметра α_0 характеризует используемое значение как близкое к истинному.

Анализ значений ошибок, ковариационной матрицы и дисперсии позволяет сделать вывод о хорошей физической обоснованности применяемой модели F -фактора. Малое значение относительной погрешности σ^2 , равное $4,46 \cdot 10^{-3}$, дает возможность считать экспериментальные значения интенсивностей линий достоверными.

Результаты работы приведены в табл. 2, где ν – центр линии; $J', K'_A, K'_C, J'', K''_A, K''_C$ – квантовая идентификация; $S_{\text{экс}}$ – экспериментальные значения интенсивностей; $S_{\text{расч}}$ – расчет с найденными параметрами F -фактора; относительное отклонение $\delta_1 = \left| \frac{S_{\text{экс}} - S_{\text{расч}}}{S_{\text{экс}}} \right| \cdot 100\%$; $S[15]$ – данные атласа

GEISA; $\delta_2 = \left| \frac{S_{\text{экс}} - S[15]}{S_{\text{экс}}} \right| \cdot 100\%$. Средние значения $\bar{\delta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{117} \delta_i}{117} = 9\%$, $\bar{\delta}_2 = 10\%$; максимальные и мини-

мальные отклонения имеют следующие величины: $\delta_{1\text{max}} = 43\%$; $\delta_{1\text{min}} = 1\%$, $\delta_{2\text{max}} = 38\%$; $\delta_{2\text{min}} = 1\%$. Отметим, что величина фактора для приведенных в табл. 2 линий изменяется в диапазоне $0,594 \div 1,2$, что говорит о необходимости учета этой величины в расчетах интенсивностей линий.

Анализ предсказательной способности полученных значений F -фактора

С полученными параметрами F -фактора проведен расчет чисто вращательной полосы водяного пара и выполнено сравнение с имеющимися в литературе данными [4, 6, 7].

Следует отметить, что авторы [4, 6] извлекали значения интенсивности из измеренных функций пропускания несколькими способами, что приводит к разбросу в экспериментальных значениях для одного и того же перехода. Для сравнения в данной работе выбирались значения, наилучшим образом согласующиеся с нашими расчетами.

В работе [4] измерено 8 линий, из них максимальное расхождение $\delta = \left| \frac{S_{\text{экс}} - S_{\text{расч}}}{S_{\text{экс}}} \right| = 13\%$ отмечается для линии $12_{5,8} \leftarrow 11_{2,9}$ ($\nu = 584,7071 \text{ см}^{-1}$; $\delta = 6,5\%$). Эта линия измерялась среди других в работе [6], и, как следует из табл. 3, полученное в работе [6] значение интенсивности полностью совпадает с нашим расчетным.

Для линии $6_{6,1} \leftarrow 5_{3,2}$ ($\nu = 536,2458 \text{ см}^{-1}$) наблюдается расхождение между результатами эксперимента в [4, 6], рассчитанное нами значение является средним между ними. Среднее отклонение с данными работы [6] составляет $\bar{\delta} = 14,5\%$.

Для линии $6_{6,0} \leftarrow 5_{3,3}$ ($\nu = 541,0907 \text{ см}^{-1}$) при совпадении экспериментальных значений, полученных в разных работах, согласие с нашим расчетом полное.

Таблица 2

Экспериментальные и расчетные значения интенсивностей линий
 чисто вращательного спектра водяного пара ($T=300$ К,
 $S[\text{см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}] \times 10^3, \nu[\text{см}^{-1}]$)

ν	$J' K'_A K'_C$	\leftarrow	$J'' K''_A K''_C$	$S_{\text{экс}}$	$S_{\text{расч}}$	$\delta_1\%$	S [15]	$\delta_2\%$
567,2149	7 6 1		6 3 4	61,0	61,18	0	60,62	1
569,2554	8 6 3		7 3 4	69,7	69,11	1	70,26	1
571,2853	13 4 9		12 3 10	17,2	17,92	4	16,86	2
576,1157	11 2 9		10 1 10	177,6	166,4	6	159,3	10
580,5372	14 3 9		10 0 10	54,2	55,58	3	52,93	2
581,1332	9 6 4		8 3 5	27,7	20,88	25	20,57	26
584,7077	12 5 8		11 2 9	44,3	48,02	8	41,81	6
591,6971	9 5 4		8 2 7	194,6	196,3	2	100,5	4
592,0542	10 6 5		9 3 6	49,1	47,9	2	44,9	9
594,9525	8 6 2		7 3 5	23,9	22,42	6	21,93	8
600,1035	12 4 9		11 1 10	71,5	68,0	5	62,85	12
604,4471	11 6 6		10 3 7	9,19	10,32	12	9,05	2
612,9502	7 5 3		6 0 6	5,09	5,74	13	5,56	9
616,0728	9 4 5		8 1 8	38,1	43,28	14	43,62	14
620,5794	12 6 7		11 3 8	14,8	16,43	11	13,54	9
625,2681	9 6 3		8 3 6	52,4	53,03	1	50,78	3
626,3206	13 5 9		12 2 10	5,02	5,14	2	4,50	10
632,7662	14 4 10		13 3 11	1,97	1,49	24	1,38	30
633,0888	12 2 10		11 1 11	22,9	20,84	9	19,75	14
635,3985	12 3 10		11 0 11	72,3	62,61	13	59,19	18
637,0335	7 7 1		6 4 2	2,96	3,06	3	2,98	1
638,0891	7 7 0		6 4 3	9,33	8,93	4	2,00	2
639,9737	13 3 10		12 2 11	20,5	21,56	5	18,07	8
642,2299	13 6 8		12 3 9	1,67	2,27	36	1,43	12
644,3218	10 5 5		9 2 8	16,4	15,09	8	14,36	12
651,5758	13 4 10		12 1 11	7,21	7,19	0	6,59	9
659,2320	10 6 4		9 3 7	10,7	10,61	1	9,90	7
659,4530	8 7 2		7 4 3	17,8	14,61	18	14,45	19
662,9466	8 7 1		7 4 4	5,94	4,83	19	4,85	18
668,9236	8 5 4		7 0 7	13,7	14,34	5	13,76	0
670,1100	14 6 9		13 3 10	2,07	2,22	7	1,74	16

продолжение табл. 2

ν	$J' K'_A K'_C$	\leftarrow	$J'' K''_A K''_C$	$S_{\text{вк}}$	$S_{\text{рас}}$	$\delta_1\%$	$S [15]$	$\delta_2\%$
671,3560	14 5 10		13 2 11	4,54	4,28	6	3,75	17
678,8078	9 7 3		8 4 4	4,92	4,57	7	4,57	7
687,8796	9 7 2		8 4 5	13,8	13,92	1	13,78	0
689,0380	13 2 11		12 1 12	26,3	21,44	18	20,1	24
690,2226	13 3 11		12 0 12	9,35	7,15	24	6,7	28
693,1149	15 4 11		14 3 12	1,30	1,06	18	0,97	25
694,1121	10 7 4		9 4 5	10,0	9,64	4	9,5	5
696,2409	10 4 6		9 1 9	3,76	3,97	6	4,1	9
697,0711	14 3 11		13 2 12	2,40	2,06	14	1,89	21
697,9186	11 6 5		10 3 8	13,4	14,79	10	1,36	1
703,7127	14 4 11		13 1 12	7,68	6,22	19	5,65	26
705,3613	11 5 6		10 2 9	15,5	14,16	9	14,23	8
707,3981	8 6 3		7 1 6	6,57	6,85	4	6,72	2
713,4833	10 7 3		9 4 6	3,18	3,28	3	3,17	0
713,7935	12 7 6		11 4 7	2,88	2,91	1	2,62	9
729,2060	8 8 1		7 5 2	2,11	2,04	3	1,97	7
729,3942	8 8 0		7 5 3	0,700	0,692	1	0,659	6
730,5447	14 7 8		13 4 9	0,444	0,554	25	0,416	6
730,9170	9 5 5		8 0 8	2,52	2,84	13	2,75	9
740,5685	11 7 4		10 4 7	5,88	5,49	7	5,17	12
742,4297	12 6 6		11 3 9	1,68	1,77	5	1,62	3
744,2092	14 2 12		13 1 13	2,33	2,24	4	2,07	11
744,8146	14 3 12		13 0 13	6,91	6,73	3	6,22	10
748,3998	9 6 4		8 1 7	2,00	2,30	15	2,18	9
752,2665	15 3 12		14 2 13	1,73	1,63	6	1,48	14
753,8920	9 8 2		8 5 3	0,891	0,932	5	0,915	3
754,6379	9 8 1		8 5 4	2,82	2,85	1	2,76	2
755,9628	15 4 12		14 1 13	0,568	0,546	4	0,492	14
767,2598	16 5 12		15 2 13	0,219	0,237	8	0,205	7
768,9412	7 6 1		6 1 6	0,490	0,369	25	0,456	8
770,0735	12 7 5		11 4 8	0,759	0,829	9	0,750	1
775,5519	12 5 7		11 2 10	1,19	1,12	6	1,16	3
776,9858	10 8 3		9 5 4	2,35	2,28	3	2,25	4
779,3028	10 8 2		9 5 5	0,764	0,777	2	0,754	1
784,4583	11 4 7		10 1 10	3,05	2,88	6	2,99	2

продолжение табл. 2

v	$J' K'_A K'_C$	\leftarrow	$J'' K''_A K''_C$	$S_{экс}$	$S_{расч}$	$\delta_1\%$	$S [15]$	$\delta_2\%$
793,9095	13 6 7		12 3 10	1,44	1,45	1	1,37	4
795,8936	10 6 5		9 1 8	3,79	4,57	21	4,33	14
797,5554	11 8 4		10 5 5	0,461	0,458	0	0,449	2
798,5495	10 5 6		9 0 9	3,78	3,92	4	3,88	3
798,7589	15 2 13		14 1 14	1,76	1,93	10	1,76	0
802,9859	13 7 6		12 4 9	0,946	0,915	3	0,806	15
803,5480	11 8 3		10 5 6	1,53	1,42	7	1,36	11
808,0362	16 4 13		15 1 4	0,322	0,395	23	0,359	9
808,2804	8 7 2		7 2 5	0,428	0,548	28	0,465	9
813,8215	9 9 1		8 6 2	0,135	0,124	8	0,116	14
813,8559	9 9 0		8 6 3	0,404	0,368	9	0,35	13
814,5190	12 8 5		11 5 6	0,726	0,667	8	0,643	11
825,1675	8 6 2		7 1 7	0,165	0,182	10	0,191	16
827,6716	9 7 3		8 2 6	0,358	0,350	2	0,299	16
835,5487	14 8 7		13 5 8	0,086	0,100	16	0,087	2
839,8695	10 9 2		9 6 3	0,439	0,439	0	0,422	4
839,9626	10 9 1		9 6 4	0,146	0,145	1	0,141	3
849,5779	11 6 6		10 1 9	0,685	0,739	8	0,714	4
852,4262	10 7 4		9 2 7	1,14	1,22	7	1,06	6
852,9099	16 3 14		15 0 15	0,439	0,508	16	0,457	4
853,3695	14 6 8		13 3 11	0,081	0,101	25	0,102	26
854,5850	13 5 8		12 2 11	0,736	0,658	11	0,707	4
858,5440	17 3 14		16 2 15	0,094	0,087	7	0,076	19
864,9559	11 9 3		10 6 4	0,113	0,103	9	0,100	11
865,4468	11 9 2		10 6 5	0,297	0,308	4	0,301	2
871,2537	11 5 7		10 0 10	0,494	0,492	0	0,509	3
878,5331	12 4 8		11 1 11	0,238	0,223	6	0,224	6
883,0706	15 7 8		14 4 11	0,058	0,064	10	0,056	2
883,8450	11 7 5		10 2 8	0,214	0,306	43	0,274	28
887,2211	9 6 3		8 1 8	0,387	0,482	25	0,472	22
888,6429	12 9 4		11 6 5	0,178	0,163	8	0,158	11
890,0934	12 9 3		11 6 6	0,05	0,054	8	0,053	6
891,3019	10 10 1		9 7 2	0,046	0,053	15	0,051	12
906,2298	17 2 15		16 1 16	0,127	0,123	3	0,108	14
906,2847	17 3 15		16 0 16	0,042	0,041	2	0,036	14

продолжение табл.2

ν	$J' \quad K'_A \quad K'_C$	\leftarrow	$J'' \quad K''_A \quad K''_C$	$S_{\text{экс}}$	$S_{\text{расч}}$	$\delta_1\%$	$S [15]$	$\delta_2\%$
908,9538	12 6 7		11 1 10	0,791	0,833	5	0,842	6
913,9772	13 9 4		12 6 7	0,074	0,070	5	0,067	9
918,4764	11 10 1		10 7 4	0,056	0,055	2	0,054	3
921,3933	15 6 9		14 3 12	0,069	0,050	28	0,054	21
922,1361	12 7 6		11 2 9	0,400	0,485	21	0,453	13
924,9882	9 7 2		8 2 7	0,188	0,187	1	0,248	32
941,0394	14 5 9		13 2 12	0,036	0,038	6	0,041	15
944,8568	12 10 3		11 7 4	0,055	0,033	40	0,034	38
948,2635	12 5 8		11 0 11	0,479	0,474	1	0,519	8
955,2532	10 6 4		9 1 9	0,096	0,097	1	0,095	1
959,2268	18 3 16		17 0 17	0,026	0,027	4	0,024	9
966,8683	13 7 7		12 2 10	0,094	0,064	32	0,062	33
971,3639	10 8 3		9 3 6	0,089	0,080	10	0,079	11
973,4868	13 6 8		12 1 11	0,089	0,085	4	0,092	3
975,9436	13 4 9		12 1 12	0,137	0,155	13	0,143	5
984,1125	11 8 4		10 3 7	0,032	0,032	14	0,030	18

Таблица 3

Сравнение измеренных и рассчитанных интенсивностей линий
 ($T = 300 \text{ K}$, $S[\text{см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}] \times 10^2$, $\nu[\text{см}^{-1}]$)

ν	$J' \quad K'_A \quad K'_C$	\leftarrow	$J'' \quad K''_A \quad K''_C$	[4]	[6]	Наш расчет
536,2458	6 6	1	\leftarrow 5 3 2	3,28	2,85	3,047
541,0907	6 6	0	\leftarrow 5 3 3	1,08	1,10	1,077
584,7071	12 5	8	\leftarrow 11 2 9	4,26	4,82	4,8

В работе [7] методом диодной лазерной спектроскопии измерены 13 линий вращательного спектра H_2O , образованных переходами с высоких вращательных состояний ($J \sim 10 \div 20$). Для 12 линий согласие с нашим расчетом хорошее, $\delta=6,5\%$. Исключение составляет линия $11_{7,4} \leftarrow 10_{2,9}$ ($\nu = 1293,6343 \text{ см}^{-1}$), для которой $\delta = 35\%$.

В целом предсказательная способность найденных параметров F -фактора достаточно высока, и рассчитанные в данной работе значения интенсивностей линий всей вращательной полосы могут использоваться для дальнейших исследований спектров водяного пара.

1. Hinderling J., Sicrist M.W., Kneubühl F.K. — *Infrared Physics*, 1985, v. 25, №1/2, p. 491–496.
2. Furashov N.I., Katkov V.Yu. — *Int. J. Infrared and Millimeter Waves*, 1985, v. 6, № 8, p. 751–764.
3. Несмелова Л.И., Творогов С.Д., Родимова О.Б. Контур спектральной линии и межмолекулярное взаимодействие. — Новосибирск: Наука, 1986. — 215 с.
4. Fridovich B. — *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 1971, v. 11, p. 1605–1610.
5. Saiedy F. — *Quart. Roy. Meteorol. Sos.*, 1961, v. 87, p. 578–581.
6. Izatt J.R., Sakai H., Benedict W.S. — *J. Opt. Soc. Amer.*, 1969, v. 59, № 1, p. 19–27.
7. Eng R.S., Mantz A.W. — *J. Mol. Spectrosc.*, 1979, v. 75, № 3, p. 388–399.
8. Аганбекян К.А., Зражевский А.Ю., Соколов А.В., Строганов И.Л. — *Радиотехника и электроника*, 1975, т. 20, № 6, с. 1155.
9. Осипов В.М., Борисова Н.Ф., Шереметьева Т.А. — *Оптика и спектроскопия*, 1975, т. 39, вып. 3, с. 458.
10. Войцеховская О.К., Ипполитов И.И., Макушкин Ю.С. — *Оптика и спектроскопия*, 1972, т. 33, вып. 1, с. 78–83.
11. Albritton D.L., Scheltekopf A.L., Zare R.N. — In: *Molecular Spectroscopy: Modern Research.*, N.Y.: Acad. Press., 1976, v. 11, ch. 1, p. 1–67.
12. Осипов О.А., Минкин В.И. *Справочник по дипольным моментам.* — М.: Высшая школа, 1965. — 263 с.
13. *Handbook of Chemistry and Physics*, 1981–1982. A Ready-Reference book CRS PRESS of Chemical and Physical Data/Ed. R.S. Weast, Ph. D., M.J. Aste, Ph. D., 1982. — 2000 p.
14. Войцеховская О.К., Макушкин Ю.С., Трифонова Н.Н., Черепанов В.И. Программа расчета центров и интенсивностей колебательно-вращательных линий молекул типа асимметричного волчка. ГосФАП, 1986, № П004348. — 64 с.
15. Chedin A., Husson N., Scott N.A. et al. The GEISA data bank: 1984 version. — Laboratoire de Meteorol. Dynamique du CNRS, 1986.

Институт радиотехники и электроники
АН СССР, Москва
Институт оптики атмосферы
СО АН СССР, Томск

Поступила в редакцию
7 апреля 1988 г.

К.А. Аганбекян, О.К. Войцеховская, В.В. Куликов, Н.Н. Трифонова.
 H_2O Pure Rotational Band Absolute Line Intensities in High-Frequency Wing.

Absolute intensity values for 117 pure rotational transitions of H_2O in the 10–18 μm region were measured using a computerized setup consisting of a multipass absorption cell and a diffraction spectrometer. The data obtained allowed estimation of the vibration-rotational interaction parameters in the line intensity F -factor by the least-squares fitting and prediction of the line intensities for the entire H_2O rotational band. The calculated results extrapolated to higher excited rotational transitions were then compared with the line intensities observed by other authors to show good agreement.