

О.К. Войцеховская, С.В. Кузнецов, С.В. Сапожников, Н.Н. Трифонова, М.Р. Черкасов

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ПО МОЛЕКУЛЯРНОМУ ПОГЛОЩЕНИЮ ИЗЛУЧЕНИЯ СО₂-ЛАЗЕРА

Сообщается о создании информационной системы (ИС) по обеспечению исследований газовых сред с помощью СО₂-лазера абсолютными значениями коэффициентов поглощения атмосферных и примесных газов. Помимо характеристик излучающих переходов СО₂-лазера, ИС содержит базу данных по параметрам спектральных линий поглощения, сформированную на основе расчетов по оригинальным методикам. Значительное внимание уделено оценке достоверности занесенной информации и проведено сравнение с независимыми экспериментальными данными.

Введение

При интерпретации результатов метода многочастотного зондирования необходимо априорное знание абсолютных значений спектральных коэффициентов поглощения каждой газовой компоненты для решения системы уравнений:

$$\{\alpha_{\nu_i} + \delta\alpha_{\nu_i}\}_m = \left\{ \sum_{j=1}^N ((\kappa_{\nu_{ij}} + \delta\kappa_{\nu_{ij}}) \cdot (\rho_i + \delta\rho_i)) \right\}_m,$$

где ρ_j , κ_{ν_j} — концентрация и массовый коэффициент поглощения, $j = 1, \dots, N$, N — число газов в воздушной среде, учитываемых в расчете; $i = 1, \dots, m$, m — число длин волн, на которых производятся измерения; α_{ν_i} — измеряемый коэффициент поглощения; $\delta\alpha_{\nu_i}$, $\delta\kappa_{\nu_j}$, $\delta\rho_i$ — погрешности.

Обычно используются лабораторные измерения коэффициентов поглощения (КП) отдельных газов. Ряд работ, посвященных экспериментальному определению спектральных характеристик поглощения отдельными газами излучения СО₂-лазера, весьма широк, но между результатами различных авторов существуют значительные расхождения, объясняемые трудностями точной регистрации количества поглощающего вещества и измерения интенсивностей излучения.

В данной статье сделана попытка провести строгие расчеты абсолютных значений коэффициентов поглощения атмосферных и примесных газов на основе созданных в ИОА СО АН СССР баз данных по параметрам спектральных линий поглощения. В результате подготовлена проблемно-ориентированная информационно-поисковая система (ИПС) «Разбег», предназначенная для просмотра параметров спектральных линий атмосферных и примесных газов в диапазоне 9–11 мкм, попадающих в заданную область перестройки длин волн излучения СО₂-лазера, и выбора наиболее оптимальной длины волны ОКГ для зондирования конкретной примеси. ИПС содержит следующие базы данных (БД):

- характеристики линий излучения ОКГ на пяти изотопических модификациях углекислого газа [1];
- базу данных по параметрам спектральных линий атмосферных и примесных газов.

Формирование первой базы данных трудностей не представляет и задание атрибутов поиска заключается или в квантовой идентификации перехода СО₂-лазера, или указании длины волны излучения ОКГ в микронах. Основные трудности заключаются в формировании второй информационной компоненты ИПС, а именно БД по параметрам спектральных линий (ПСЛ). База данных по параметрам спектральных линий представляет собой совокупность записей одинаковой длины. Запись содержит ПСЛ одной спектральной линии — центр, интенсивность, полуширину, квантовую идентификацию и т.д. В ИПС «Разбег» включена база рекомендованных значений ПСЛ, принципы и критерии формирования которой обсуждались ранее [2, 3].

При проведении расчетов центров и интенсивностей колебательно-вращательных (КВ) линий и формировании соответствующих баз данных использовались методики, подробно описанные в [2]. В табл. 1 приведены ссылки на источники исходных данных, использованных в расчетах вышеупомянутых параметров линий. Добавим лишь, что в спектре поглощения ОCS в заданный район попадают пять колебательных полос, но известна лишь интегральная интенсивность полосы $2\nu_2$.

Нами определена производная дипольного момента ОCS второго порядка и в гармоническом приближении рассчитаны интегральные интенсивности остальных полос $03^10 \leftarrow 01^10$; $04^20 \leftarrow 02^20$; $04^00 \leftarrow 2^00$; $12^00 \leftarrow 10^00$.

Характеристики колебательных полос газов

Молекула	Центр полосы (см ⁻¹) ν_0	Квантовая идентификация полосы	Интегральная интенсивность $S_{\nu, \nu}$ (атм ⁻¹ · см ⁻¹)	Частотные границы полосы		Число линий	Литература
				ν_{\min} (см ⁻¹)	ν_{\max} (см ⁻¹)		
1	2	3	4	5	6	7	8
H ₂ ¹⁶ O	0,0	000—000	—	800,7149	1198,5678	216	[8]
	1594,00	010—000	257,3	839,644	1198,5266	120	[9]
¹³ C ¹⁶ O ₂	913,425	00011—10001	1,917 · 10 ⁻⁴	864,3066	949,5381	56	
¹² C ¹⁶ O ₂	917,647	10011—20001	2,490 · 10 ⁻⁵	878,7133	945,3592	43	
¹² C ¹⁶ O ₂	927,156	01111—11101	1,046 · 10 ⁻³	868,9911	963,4634	137	[26]
¹² C ¹⁶ O ₂	941,698	10012—20002	3,461 · 10 ⁻⁵	903,4837	973,4982	46	
¹² C ¹⁶ O ₂	960,959	00011—10001	1,711 · 10 ⁻²	886,3767	1001,3052	75	
¹² C ¹⁶ O ¹⁷ O	963,986	00011—10001	1,120 · 10 ⁻⁵	937,5717	984,8698	53	
¹² C ¹⁶ O ¹⁸ O	966,269	00011—10001	4,482 · 10 ⁻⁵	928,7305	992,6507	86	
¹³ C ¹⁶ O ₂	1017,659	00011—10002	1,345 · 10 ⁻⁴	967,6066	1049,5704	54	
¹³ C ¹⁶ O ₂	1023,701	01111—11102	2,291 · 10 ⁻⁵	990,4520	1048,5472	72	
¹² C ¹⁶ O ₂	1043,640	10011—20002	3,984 · 10 ⁻⁵	1002,7651	1074,6674	47	
¹² C ¹⁶ O ₂	1063,735	00011—10002	2,428 · 10 ⁻²	988,8178	1084,6356	53	
¹² C ¹⁶ O ₂	1064,475	10012—20003	8,068 · 10 ⁻⁵	1016,7574	1084,0220	40	
¹² C ¹⁶ O ₂	1066,242	11112—21103	7,819 · 10 ⁻⁶	1044,7623	1084,6693	38	
¹² C ¹⁶ O ¹⁷ O	1067,72	00001—10002	1,594 · 10 ⁻⁵	1038,5826	1090,9159	64	
¹² C ¹⁶ O ₂	1071,542	01111—11102	1,912 · 10 ⁻³	1010,1800	1084,5289	102	
¹² C ¹⁶ O ¹⁸ O	1072,687	00011—10002	8,964 · 10 ⁻⁵	1031,1031	1102,3183	98	
¹² C ¹⁶ O ₂	1074,250	02211—12202	7,79410	1031,4165	1084,529	64	
	698,3414	020—010	1,028	550,9645	884,0983	5209	
	700,9330	010—000	15,05	503,2347	210,7256	6889	
¹⁶ O ₃	1007,6514	101—100	1,491	968,5841	1057,1318	2424	[27]
	1042,0846	001—000	216,4	858,9830	1133,877	3044	
	1103,1332	100—000	1,305	921,7469	1134,027	1363	
	938,853	0000—1000	0,0514	868,9931	991,1517	147	[28]
	1055,6244	0001—0200	0,007203	982,8614	1092,985	132	
¹⁴ N ₂ ¹⁶ O	1160,298	0310—0110	0,6464	1095,1988	1232,730	432	[29]
	1168,133	0200—0000	7,003	1098,1939	1248,183	180	
	1033,2640	1200—1000	0,19883	1003,6856	1075,3379	179	[30]
	1047,0420	0200—0000	10,0	1005,3916	1109,2276	257	
¹⁶ O ¹² C ³² S	1052,9443	0310—0110	3,1678	1015,2204	1103,5337	550	[31]
	1057,7857	0400—0200	0,4884	1027,5482	1099,6798	177	[32]
	1058,2312	0420—0220	0,505	1026,7871	1095,8385	398	
³² S ¹⁶ O ₂	1151,713	100—000	89,0424	960,7884	1199,997	6652	[33]
							[34]
H ₂ ³² S	1182,577	010—000	2,05	895,8660	1199,957	401	[35]
H ¹⁴ N ¹⁶ O ₃	879,1082	ν_5		891,0013	951,9149	17482	[36]
	896,4187	ν_9		891,0007	956,9182	21998	
¹² C ¹⁹ F ₂ ³⁵ Cl ₂	923,2395	ν_6	292,0	904,8279	941,3651	20776	[25]
¹⁴ NH ₃	789,537	0200—0100	5,85	790,007	1211,9150		
	950,2778	0100—0000	547,8	791,7270	1210,2829		[27]

Теоретический подход к расчету полуширин линий изложен в [4]. В качестве уширяющей компоненты рассматривался сухой воздух и полуширины линий находились по формуле

$$\gamma_{взл} = 0,79\gamma_{N_2} + 0,21\gamma_{O_2}.$$

Расчеты проводились при значениях молекулярных констант, рекомендуемых в [5–7]. Сопоставление с экспериментальными данными показало, что в среднем описанная методика позволяет получать результаты с погрешностью не более +10%, хотя в отдельных случаях погрешность достигает +30%.

Анализ достоверности информационных компонент системы по коэффициентам поглощения газов

Оценка точности расчетов ПСЛ проводилась при разработке физических моделей и алгоритмов расчета ПСЛ. Но в задаче газоанализа, независимо от математического аппарата интерпретации эксперимента, необходимой исходной информацией являются абсолютные значения коэффициентов поглощения (КП) на конкретных спектральных частотах. Поэтому особую роль играет сравнение экспериментальных значений КП с расчетными на основе данных по ПСЛ. В табл. 2–3 приводятся значения КП для двух основных полос генерации CO₂-лазера, рассчитанные для лоренцовского контура линии с максимальным значением частоты смещения в 10 см⁻¹.

Рассмотрим точность приводимых коэффициентов поглощения и вклады газовых компонентов атмосферы в ослабление излучения в районе 9–11 мкм.

Таблица 2

Расчетные данные по коэффициентам поглощения (K_v , атм⁻¹ · см⁻¹, $T = 296$ К) для полосы 0001–1000 генерации CO₂-лазера

Частота (см ⁻¹)	Линия CO ₂ -лазера	K_v (расч.)			
		N ₂ O	H ₂ S	H ₂ O	O ₃
1	2	3	4	5	6
916,5834	P48	1,80 · 10 ⁻⁴	3,12 · 10 ⁻⁸	9,90 · 10 ⁻⁷	1,74 · 10 ⁻⁵
918,7197	P46	1,40 · 10 ⁻³	6,71 · 10 ⁻⁸	1,72 · 10 ⁻⁵	2,36 · 10 ⁻⁵
920,8303	P44	4,95 · 10 ⁻⁴	2,30 · 10 ⁻⁷	6,62 · 10 ⁻⁶	4,71 · 10 ⁻⁵
922,9153	P42	2,66 · 10 ⁻⁴	8,24 · 10 ⁻⁶	1,29 · 10 ⁻⁵	6,00 · 10 ⁻⁵
924,9749	P40	1,21 · 10 ⁻³	4,99 · 10 ⁻⁷	7,10 · 10 ⁻⁴	7,97 · 10 ⁻⁵
927,0091	P38	9,59 · 10 ⁻⁴	1,19 · 10 ⁻⁷	1,59 · 10 ⁻⁶	4,14 · 10 ⁻⁵
929,0182	P36	2,84 · 10 ⁻⁴	7,20 · 10 ⁻⁸	9,31 · 10 ⁻⁵	5,33 · 10 ⁻⁵
931,0022	P34	4,71 · 10 ⁻⁴	1,22 · 10 ⁻⁷	1,13 · 10 ⁻⁶	6,26 · 10 ⁻⁵
932,9611	P32	2,37 · 10 ⁻³	2,48 · 10 ⁻⁷	2,48 · 10 ⁻⁷	9,42 · 10 ⁻⁵
934,8952	P30	2,60 · 10 ⁻⁴	1,65 · 10 ⁻⁶	1,34 · 10 ⁻⁷	1,37 · 10 ⁻⁴
936,8045	P28	9,97 · 10 ⁻⁵	1,83 · 10 ⁻⁶	8,65 · 10 ⁻⁷	1,85 · 10 ⁻⁴
938,6890	P26	2,32 · 10 ⁻⁵	7,90 · 10 ⁻⁶	3,53 · 10 ⁻⁷	1,43 · 10 ⁻⁴
940,5488	P24	6,51 · 10 ⁻⁴	1,82 · 10 ⁻⁶	2,42 · 10 ⁻⁶	6,04 · 10 ⁻⁵
942,3841	P22	2,69 · 10 ⁻⁴	3,70 · 10 ⁻⁷	6,87 · 10 ⁻⁷	8,73 · 10 ⁻⁵
944,1948	P20	2,48 · 10 ⁻⁴	2,33 · 10 ⁻⁷	3,63 · 10 ⁻⁶	7,70 · 10 ⁻⁵
945,9810	P18	4,84 · 10 ⁻⁴	2,32 · 10 ⁻⁷	2,44 · 10 ⁻⁶	1,86 · 10 ⁻⁴
947,7427	P16	2,32 · 10 ⁻³	3,61 · 10 ⁻⁷	2,61 · 10 ⁻⁵	3,78 · 10 ⁻⁴
949,4800	P14	1,93 · 10 ⁻³	8,68 · 10 ⁻⁷	4,97 · 10 ⁻⁶	2,50 · 10 ⁻⁴
951,1930	P12	5,91 · 10 ⁻⁴	9,15 · 10 ⁻⁶	1,21 · 10 ⁻⁶	3,96 · 10 ⁻⁴
952,8816	P10	3,99 · 10 ⁻⁴	5,87 · 10 ⁻⁶	4,96 · 10 ⁻⁶	1,40 · 10 ⁻⁴
954,5458	P8	4,51 · 10 ⁻⁴	1,11 · 10 ⁻⁵	5,54 · 10 ⁻⁶	2,26 · 10 ⁻⁴
956,1857	P6	8,24 · 10 ⁻⁴	5,61 · 10 ⁻⁶	3,57 · 10 ⁻⁶	5,39 · 10 ⁻⁴
957,8012	P4	2,52 · 10 ⁻³	7,22 · 10 ⁻⁷	9,08 · 10 ⁻⁷	1,11 · 10 ⁻³
959,3924	P2	2,42 · 10 ⁻³	5,31 · 10 ⁻⁷	1,95 · 10 ⁻⁵	1,66 · 10 ⁻³
961,7336	R0	4,71 · 10 ⁻⁴	8,51 · 10 ⁻⁷	4,41 · 10 ⁻⁶	1,52 · 10 ⁻³
963,2638	R2	2,56 · 10 ⁻⁴	2,11 · 10 ⁻⁶	3,62 · 10 ⁻⁷	3,55 · 10 ⁻³
964,7697	R4	1,74 · 10 ⁻⁴	3,01 · 10 ⁻⁵	6,02 · 10 ⁻⁷	2,36 · 10 ⁻³
966,2511	R6	1,35 · 10 ⁻⁴	1,31 · 10 ⁻⁵	5,37 · 10 ⁻⁶	3,23 · 10 ⁻³
967,7079	R8	1,13 · 10 ⁻⁴	7,92 · 10 ⁻⁵	1,91 · 10 ⁻⁶	7,15 · 10 ⁻³
969,3281	R10	4,60 · 10 ⁻⁴	2,11 · 10 ⁻⁶	1,00 · 10 ⁻⁶	4,94 · 10 ⁻³

1	2	3	4	5	6
970,5479	R12	$8,50 \cdot 10^{-5}$	$1,02 \cdot 10^{-6}$	$7,44 \cdot 10^{-5}$	$1,19 \cdot 10^{-2}$
971,9310	R14	$7,10 \cdot 10^{-5}$	$6,97 \cdot 10^{-7}$	$1,02 \cdot 10^{-5}$	$8,07 \cdot 10^{-3}$
973,2892	R16	$5,59 \cdot 10^{-5}$	$7,38 \cdot 10^{-7}$	$3,74 \cdot 10^{-5}$	$9,13 \cdot 10^{-3}$
974,6226	R18	$4,10 \cdot 10^{-5}$	$1,90 \cdot 10^{-6}$	$5,44 \cdot 10^{-6}$	$1,72 \cdot 10^{-2}$
975,9311	R20	$2,80 \cdot 10^{-5}$	$8,49 \cdot 10^{-6}$	$8,21 \cdot 10^{-4}$	$1,17 \cdot 10^{-2}$
977,2146	R22	$1,82 \cdot 10^{-5}$	$1,78 \cdot 10^{-6}$	$1,74 \cdot 10^{-5}$	$1,05 \cdot 10^{-2}$
978,4730	R24	$1,15 \cdot 10^{-5}$	$3,75 \cdot 10^{-6}$	$1,70 \cdot 10^{-6}$	$2,87 \cdot 10^{-2}$
979,7061	R26	$7,38 \cdot 10^{-6}$	$6,15 \cdot 10^{-5}$	$5,80 \cdot 10^{-7}$	$1,44 \cdot 10^{-2}$
980,9139	R28	$5,00 \cdot 10^{-6}$	$2,86 \cdot 10^{-5}$	$9,76 \cdot 10^{-7}$	$1,92 \cdot 10^{-2}$
982,0962	R30	$3,82 \cdot 10^{-6}$	$4,13 \cdot 10^{-6}$	$1,62 \cdot 10^{-5}$	$2,24 \cdot 10^{-2}$
983,2530	R32	$3,52 \cdot 10^{-6}$	$3,69 \cdot 10^{-6}$	$1,08 \cdot 10^{-6}$	$3,06 \cdot 10^{-2}$
984,3840	R34	$4,59 \cdot 10^{-6}$	$1,80 \cdot 10^{-5}$	$6,71 \cdot 10^{-6}$	$3,68 \cdot 10^{-2}$
985,4891	R36	$7,49 \cdot 10^{-6}$	$6,42 \cdot 10^{-5}$	$3,36 \cdot 10^{-7}$	$2,51 \cdot 10^{-2}$
986,5682	R38	$2,08 \cdot 10^{-6}$	$7,31 \cdot 10^{-6}$	$1,25 \cdot 10^{-7}$	$3,64 \cdot 10^{-2}$
987,6212	R40	$5,43 \cdot 10^{-7}$	$4,09 \cdot 10^{-6}$	$3,12 \cdot 10^{-7}$	$7,00 \cdot 10^{-2}$
988,6477	R42	$2,85 \cdot 10^{-7}$	$1,75 \cdot 10^{-6}$	$9,09 \cdot 10^{-7}$	$1,09 \cdot 10^{-1}$
989,6478	R44	$2,92 \cdot 10^{-7}$	$1,59 \cdot 10^{-6}$	$5,33 \cdot 10^{-7}$	$1,97 \cdot 10^{-1}$
990,6212	R46	$7,13 \cdot 10^{-7}$	$1,90 \cdot 10^{-6}$	$1,10 \cdot 10^{-6}$	$1,98 \cdot 10^{-1}$
991,5676	R48	$3,32 \cdot 10^{-8}$	$3,06 \cdot 10^{-6}$	$1,26 \cdot 10^{-7}$	$1,81 \cdot 10^{-1}$

Таблица 3

Расчетные данные по коэффициентам поглощения OCS, H₂S, H₂O (K_v , $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$, $T = 296 \text{ K}$) для полосы 0001—0200 генерации CO₂-лазера

Частота (см^{-1})	Линия CO ₂ -лазера	K_v (расч.)		
		OCS	H ₂ S	H ₂ O
1	2	3	4	5
1018,9020	P48	$8,46 \cdot 10^{-3}$	$1,21 \cdot 10^{-5}$	$6,57 \cdot 10^{-6}$
1021,0579	P46	$2,18 \cdot 10^{-2}$	$1,20 \cdot 10^{-3}$	$8,40 \cdot 10^{-7}$
1023,1901	P44	$2,06 \cdot 10^{-2}$	$7,53 \cdot 10^{-5}$	$5,16 \cdot 10^{-7}$
1025,2984	P42	$7,99 \cdot 10^{-2}$	$2,33 \cdot 10^{-5}$	$6,29 \cdot 10^{-7}$
1027,3825	P40	$6,93 \cdot 10^{-2}$	$3,38 \cdot 10^{-5}$	$4,38 \cdot 10^{-6}$
1029,4423	P38	$1,07 \cdot 10^{-1}$	$8,18 \cdot 10^{-6}$	$3,67 \cdot 10^{-4}$
1031,4776	P36	$3,09 \cdot 10^{-1}$	$5,65 \cdot 10^{-5}$	$2,30 \cdot 10^{-6}$
1033,5843	P34	$5,09 \cdot 10^{-1}$	$4,09 \cdot 10^{-5}$	$8,55 \cdot 10^{-7}$
1035,4737	P32	$3,93 \cdot 10^{-1}$	$2,97 \cdot 10^{-4}$	$6,63 \cdot 10^{-6}$
1037,4342	P30	$1,93 \cdot 10^{-1}$	$3,73 \cdot 10^{-5}$	$1,42 \cdot 10^{-6}$
1039,3694	P28	$1,85 \cdot 10^{-1}$	$2,87 \cdot 10^{-4}$	$7,45 \cdot 10^{-5}$
1041,2791	P26	$1,55 \cdot 10^{-1}$	$5,38 \cdot 10^{-5}$	$1,06 \cdot 10^{-6}$
1043,1633	P24	$1,52 \cdot 10^{-1}$	$3,48 \cdot 10^{-3}$	$2,41 \cdot 10^{-6}$
1045,0218	P22	$2,51 \cdot 10^{-1}$	$2,67 \cdot 10^{-4}$	$3,49 \cdot 10^{-7}$
1046,8543	P20	$2,06 \cdot 10^{-2}$	$3,35 \cdot 10^{-5}$	$4,19 \cdot 10^{-7}$
1048,6609	P18	$1,87 \cdot 10^{-1}$	$1,93 \cdot 10^{-4}$	$3,39 \cdot 10^{-6}$
1050,4414	P16	$1,39 \cdot 10^{-1}$	$6,23 \cdot 10^{-5}$	$6,99 \cdot 10^{-6}$
1052,1956	P14	$1,20 \cdot 10^{-1}$	$1,66 \cdot 10^{-4}$	$2,23 \cdot 10^{-6}$
1053,9236	P12	$1,37 \cdot 10^{-1}$	$1,74 \cdot 10^{-3}$	$1,02 \cdot 10^{-6}$
1055,6251	P10	$1,45 \cdot 10^{-1}$	$3,63 \cdot 10^{-3}$	$1,02 \cdot 10^{-4}$
1058,1953	P8	$1,57 \cdot 10^{-1}$	$8,64 \cdot 10^{-5}$	$3,03 \cdot 10^{-6}$

1	2	3	4	5
1058,9488	P6	$4,65 \cdot 10^{-1}$	$1,07 \cdot 10^{-4}$	$5,55 \cdot 10^{-6}$
1060,5707	P4	$2,10 \cdot 10^{-1}$	$2,02 \cdot 10^{-3}$	$9,38 \cdot 10^{-6}$
1062,1660	P2	$1,43 \cdot 10^{-1}$	$3,42 \cdot 10^{-4}$	$9,45 \cdot 10^{-6}$
1064,5089	R0	$8,22 \cdot 10^{-2}$	$6,35 \cdot 10^{-5}$	$6,10 \cdot 10^{-6}$
1066,0374	R2	$1,81 \cdot 10^{-1}$	$6,56 \cdot 10^{-4}$	$8,75 \cdot 10^{-4}$
1067,5391	R4	$1,96 \cdot 10^{-1}$	$2,50 \cdot 10^{-4}$	$8,13 \cdot 10^{-6}$
1069,0141	R6	$6,66 \cdot 10^{-2}$	$4,86 \cdot 10^{-3}$	$2,14 \cdot 10^{-6}$
1070,4623	R8	$4,45 \cdot 10^{-2}$	$1,17 \cdot 10^{-3}$	$1,36 \cdot 10^{-6}$
1071,8838	R10	$3,46 \cdot 10^{-2}$	$1,43 \cdot 10^{-2}$	$3,03 \cdot 10^{-6}$
1073,2785	R12	$2,97 \cdot 10^{-2}$	$8,25 \cdot 10^{-4}$	$6,31 \cdot 10^{-6}$
1074,6465	R14	$4,22 \cdot 10^{-2}$	$2,72 \cdot 10^{-3}$	$7,95 \cdot 10^{-5}$
1075,9879	R16	$4,33 \cdot 10^{-2}$	$4,81 \cdot 10^{-4}$	$3,64 \cdot 10^{-5}$
1077,3026	R18	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$1,32 \cdot 10^{-3}$	$1,27 \cdot 10^{-6}$
1078,5907	R20	$8,48 \cdot 10^{-3}$	$6,85 \cdot 10^{-4}$	$4,97 \cdot 10^{-7}$
1079,8523	R22	$9,24 \cdot 10^{-3}$	$1,31 \cdot 10^{-3}$	$4,20 \cdot 10^{-7}$
1081,0875	R24	$4,06 \cdot 10^{-3}$	$5,53 \cdot 10^{-3}$	$5,44 \cdot 10^{-6}$
1082,2963	R26	$3,26 \cdot 10^{-3}$	$1,97 \cdot 10^{-3}$	$6,31 \cdot 10^{-7}$
1083,4788	R28	$4,81 \cdot 10^{-3}$	$9,64 \cdot 10^{-3}$	$2,81 \cdot 10^{-7}$
1084,6352	R30	$1,13 \cdot 10^{-3}$	$5,21 \cdot 10^{-4}$	$2,33 \cdot 10^{-7}$
1085,7655	R32	$8,81 \cdot 10^{-4}$	$1,40 \cdot 10^{-3}$	$3,10 \cdot 10^{-7}$
1086,8699	R34	$1,38 \cdot 10^{-3}$	$3,03 \cdot 10^{-3}$	$6,25 \cdot 10^{-7}$
1087,9485	R36	$1,86 \cdot 10^{-3}$	$5,35 \cdot 10^{-3}$	$1,11 \cdot 10^{-4}$
1089,0014	R38	$1,36 \cdot 10^{-3}$	$2,57 \cdot 10^{-3}$	$1,60 \cdot 10^{-6}$
1090,0288	R40	$9,65 \cdot 10^{-4}$	$2,57 \cdot 10^{-3}$	$4,67 \cdot 10^{-6}$
1091,0308	R42	$6,18 \cdot 10^{-4}$	$2,70 \cdot 10^{-2}$	$1,91 \cdot 10^{-4}$
1092,0076	R44	$2,30 \cdot 10^{-4}$	$1,88 \cdot 10^{-3}$	$9,95 \cdot 10^{-6}$
1092,9594	R46	$9,21 \cdot 10^{-5}$	$8,14 \cdot 10^{-3}$	$2,33 \cdot 10^{-6}$
1093,8863	R48	$7,42 \cdot 10^{-5}$	$2,91 \cdot 10^{-3}$	$1,25 \cdot 10^{-6}$

Водяной пар (H_2O). В рассматриваемом участке поглощение водяным паром обусловлено селективной и континуальной компонентами. При этом селективное поглощение обусловлено слабыми линиями, отвечающими переходам на высоковозбужденные КВ уровни, интенсивности которых подвержены влиянию внутримолекулярных взаимодействий. В базе данных описываемой ИПС выполненный учет КВ взаимодействий (детали в [8, 9]) значительно повысил точность хранимых численных значений ПСЛ. Это подтверждается, например, хорошим согласием экспериментальных и расчетных значений коэффициента поглощения на линии излучения 10P40, в то время как расчет по данным [10] в два раза превышает эксперимент (см. табл. 4). Именно это расхождение послужило основной посылкой в [11] и привело к ошибочным выводам ее авторов. Дело в том, что использованные ими значения интенсивностей из [10] рассчитаны по модели жесткого волчка, что для линий H_2O не применимо.

В табл. 4 приведены значения рассчитанного полного КП H_2O в сравнении с экспериментами различных авторов, приведенными в [12] к единообразному виду. Трудность корректного сравнения заключается в учете континуального поглощения, для вычисления которого получен ряд полуэмпирических формул [13, 14]. Наиболее полным представляется выражение [13], в котором учтены как линейная, так и квадратичная зависимости от содержания паров воды. Нами использовалась более простая аппроксимация [14]. Наилучшим образом значения КП совпадают для линий. 10R16, 10R18, 10R20, где расхождение не превышает 2–3%. Наибольшее расхождение наблюдается для КП на линиях 9R14 и 9R30, где наш расчет хорошо согласуется с аналогичным [10] и расходитя в два раза с экспериментом для 9R14 и еще больше для линии излучения ОКГ 9R30. Для последнего перехода, как отмечено в [12], возможно влияние поглощения аммиаком; объяснить же расхождение между экспериментом и расчетом на 9R14 затрудняемся.

Вместе с тем автором [15] на этой линии определено экспериментальное значение селективного коэффициента поглощения (как разность КП в линии и вне линии поглощения), равное $1,1 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$; рассчитанное нами значение КП равно $8,0 \cdot 10^{-5}$, что дает расхождение 27%, а не в два раза, как следует из табл. 4. В целом можно считать, что на основе ПСЛ данной системы коэффициент селективного

поглощения H₂O рассчитывается с достаточной точностью (на уровне экспериментальной). Для полосы излучения 9 мкм желателен более строгий эксперимент, исключая влияние посторонних газов.

Таблица 4

Расчетные и экспериментальные данные по полному значению коэффициентов поглощения H₂O (P = 10 мм рт. ст.)

Частота (см ⁻¹)	Линия CO ₂ -лазера	Полное K _v (расч.) T=296K X · 10 ⁶	K _v полное (эксп.) T=300 K K _v (эксп.) [12]				Среднее X · 10 ⁶	Расчет AFGL[12]
			X · 10 ⁶	X · 10 ⁶	X · 10 ⁶	X · 10 ⁶		
924,9740	10P(40)	10,3			12,4		12,4	20,5 ± 4,1
944,1940	10P(20)	1,01	1,02	1,09	0,69	0,92	0,93 ± 0,15	0,88 ± 0,1
947,7420	10P(16)	1,29	1,09		0,98	1,08	1,05 ± 0,05	1,05 ± 0,11
970,5472	10R(12)	1,86	2,07		2,19	2,07	2,11 ± 0,06	2,03 ± 0,25
971,9303	10R(14)	1,01	1,70	1,80		1,66	1,72 ± 0,06	0,88 ± 0,10
973,2885	10R(16)	1,36	1,60		1,24	1,26	1,37 ± 0,17	1,08 ± 0,12
974,6219	10R(18)	0,94	1,07		0,89	0,88	0,95 ± 0,08	0,79 ± 0,08
975,9304	10R(20)	11,6	12,7	10,7	11,4	9,09	11,3 ± 1,3	10,4 ± 2,1
977,2139	10R(22)	1,09	1,59	1,32	1,20	1,28	1,35 ± 0,15	1,04 ± 0,11
1039,3693	9P(28)	1,71	2,76		3,10		2,93 ± 0,17	1,63 ± 0,18
1055,6251	9P(10)	2,06	2,86	3,40	2,65		2,97 ± 0,32	2,28 ± 0,29
1073,2785	9R(12)	0,77	0,82				0,98 ± 0,16	1,57 ± 0,18
1074,6465	9R(14)	1,73	3,62		3,49		3,56 ± 0,07	1,87 ± 0,21
1075,9878	9R(16)	1,16	0,93		0,84		0,89 ± 0,05	1,00 ± 0,10
1084,6351	9R(30)	0,68			2,78		2,78	0,62 ± 0,06
1085,7654	9R(32)	0,68	0,97		1,13		1,05 ± 0,08	0,75 ± 0,08

Углекислый газ (CO₂). Несмотря на значительное количество слабых полос, попадающих в рассматриваемый район, точность рассчитанных ПСЛ достаточно высока для проведения количественных оценок ослабления излучения этим газом. Параметры спектральных линий лазеромногokrатно тестировались и рассчитанные коэффициенты поглощения достоверны с точностью не ниже 90%.

Аммиак (NH₃). Круг работ по измерению поглощения излучения CO₂-лазера аммиаком достаточно широк [15–19], но разброс в экспериментальных значениях, как следует из табл. 5, 6, велик. Одно из объяснений этого факта дано в [12] при рассмотрении расхождений в КП водяного пара: это различия в абсолютных значениях КП этилена, принимаемых в эксперименте за эталон. Хорошее согласие с экспериментом в сильных линиях поглощения NH₃ дает возможность использовать приведенные ПСЛ в полосе 9 мкм в задаче газоанализа. Вместе с тем значительные расхождения в коэффициентах поглощения 10P полосы требуют дальнейшего совершенствования баз данных по ПСЛ в районе 10 мкм.

Таблица 5

Расчетные и экспериментальные данные по коэффициентам поглощения NH₃ (K_v / атм⁻¹ · см⁻¹) для полосы 0001–1000 генерации CO₂-лазера

Частота (см ⁻¹)	Линия CO ₂ -лазера	K _v (расч.) T=296 K	K _v (эксп.)			
			[16]	[17]	[15]	[18]
1	2	3	4	5	6	7
916,5834	P48	1,96 · 10 ⁻¹				
918,7197	P46	1,74				
920,8303	P44	6,71 · 10 ⁻¹				
922,9153	P42	3,90 · 10 ⁻¹				
924,9749	P40	9,00 · 10 ⁻¹			1,31	
927,0091	P38	3,95			3,68	
929,0182	P36	8,01	7,80		7,45	8,07
931,0022	P34	1,36 · 10 ¹	1,34 · 10 ¹	1,24 · 10 ¹	1,33 · 10 ¹	1,31 · 10 ¹
932,9611	P32	1,51 · 10 ¹	1,58 · 10 ¹	1,50 · 10 ¹	1,56 · 10 ¹	1,54 · 10 ¹
934,8952	P30	8,13 · 10 ⁻¹	9,00 · 10 ⁻¹	8,60 · 10 ⁻¹	8,50 · 10 ⁻¹	9,50 · 10 ⁻¹

1	2	3	4	5	6	7
936,8045	P28	$2,44 \cdot 10^{-1}$	$3,10 \cdot 10^{-1}$	$3,60 \cdot 10^{-1}$	$3,70 \cdot 10^{-1}$	$3,60 \cdot 10^{-1}$
938,6890	P26	$2,73 \cdot 10^{-1}$	$3,50 \cdot 10^{-1}$	$3,40 \cdot 10^{-1}$	$3,60 \cdot 10^{-1}$	$4,50 \cdot 10^{-1}$
940,5488	P24	$7,25 \cdot 10^{-2}$	$1,50 \cdot 10^{-1}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$	$1,50 \cdot 10^{-1}$	$2,00 \cdot 10^{-1}$
942,3841	P22	$3,22 \cdot 10^{-2}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$	$4,50 \cdot 10^{-2}$	$4,00 \cdot 10^{-2}$	$1,20 \cdot 10^{-1}$
944,1948	P20	$5,82 \cdot 10^{-2}$	$1,40 \cdot 10^{-1}$	$1,20 \cdot 10^{-1}$	$9,00 \cdot 10^{-2}$	$1,90 \cdot 10^{-1}$
945,9810	P18	$9,25 \cdot 10^{-2}$	$1,10 \cdot 10^{-1}$	$1,40 \cdot 10^{-1}$	$8,00 \cdot 10^{-2}$	$1,10 \cdot 10^{-1}$
947,7427	P16	$3,41 \cdot 10^{-1}$	$5,30 \cdot 10^{-1}$	$4,90 \cdot 10^{-1}$	$5,80 \cdot 10^{-1}$	$5,40 \cdot 10^{-1}$
949,4800	P14	$4,21 \cdot 10^{-1}$	$6,10 \cdot 10^{-1}$	$8,10 \cdot 10^{-1}$	$7,20 \cdot 10^{-1}$	$8,70 \cdot 10^{-1}$
951,1930	P12	$4,78 \cdot 10^{-1}$	$7,20 \cdot 10^{-1}$	$5,70 \cdot 10^{-1}$	$5,40 \cdot 10^{-1}$	$7,30 \cdot 10^{-1}$
952,8816	P10	$1,38 \cdot 10^{-1}$	$2,50 \cdot 10^{-1}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$	$2,20 \cdot 10^{-1}$	$7,80 \cdot 10^{-1}$
954,5458	P8	$2,01 \cdot 10^{-1}$			3,48	
956,1857	P6	$5,78 \cdot 10^{-1}$			$7,20 \cdot 10^{-1}$	
957,8012	P4	1,86				
959,3924	P2	2,17				
961,7336	R0	1,91				
963,2638	R2	6,89				
964,7697	R4	1,14			8,20	
966,2511	R6	$2,78 \cdot 10^1$	$3,25 \cdot 10^1$		$3,06 \cdot 10^1$	$2,90 \cdot 10^1$
967,7079	R8	$2,27 \cdot 10^1$	$2,58 \cdot 10^1$	$2,19 \cdot 10^1$	$2,61 \cdot 10^1$	$2,32 \cdot 10^1$
969,3281	R10	$4,51 \cdot 10^{-1}$	$3,10 \cdot 10^{-1}$	$7,80 \cdot 10^{-1}$	$6,30 \cdot 10^{-1}$	$5,20 \cdot 10^{-1}$
970,5479	R12	$2,28 \cdot 10^{-1}$	$6,00 \cdot 10^{-2}$	$4,60 \cdot 10^{-1}$	$5,80 \cdot 10^{-1}$	$2,30 \cdot 10^{-1}$
971,9310	R14	7,05	7,50	$6,30 \cdot 10^{-1}$	7,60	7,03
973,2892	R16	$9,99 \cdot 10^{-2}$	$7,00 \cdot 10^{-2}$	$1,00 \cdot 10^{-1}$		$1,10 \cdot 10^{-1}$
974,6226	R18	$4,72 \cdot 10^{-2}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$	$2,30 \cdot 10^{-1}$		$6,00 \cdot 10^{-2}$
975,9311	R20	$2,63 \cdot 10^{-2}$	$1,80 \cdot 10^{-1}$	$3,60 \cdot 10^{-2}$		$5,00 \cdot 10^{-2}$
977,2146	R22	$1,12 \cdot 10^{-2}$	$2,00 \cdot 10^{-1}$	$5,70 \cdot 10^{-2}$		$4,00 \cdot 10^{-2}$
978,4730	R24	$1,90 \cdot 10^{-3}$	$2,70 \cdot 10^{-1}$	$2,80 \cdot 10^{-2}$		$4,00 \cdot 10^{-2}$
979,7061	R26	$1,37 \cdot 10^{-3}$	$1,40 \cdot 10^{-1}$	$4,40 \cdot 10^{-2}$		$4,00 \cdot 10^{-2}$
980,9139	R28	$1,77 \cdot 10^{-3}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$	$4,40 \cdot 10^{-2}$		$4,00 \cdot 10^{-2}$
982,0962	R30	$2,09 \cdot 10^{-3}$	$2,60 \cdot 10^{-1}$	$2,90 \cdot 10^{-2}$		$3,00 \cdot 10^{-2}$
983,2530	R32	$5,56 \cdot 10^{-3}$	$2,80 \cdot 10^{-1}$	$2,00 \cdot 10^{-2}$		$2,00 \cdot 10^{-2}$
984,3840	R34	$7,28 \cdot 10^{-3}$	$2,10 \cdot 10^{-1}$			
985,4891	R36	$9,94 \cdot 10^{-3}$				
986,5682	R38	$1,47 \cdot 10^{-2}$				
987,6212	R40	$9,24 \cdot 10^{-2}$				
988,6477	R42	$3,76 \cdot 10^{-2}$				
989,6478	R44	$6,34 \cdot 10^{-2}$				
990,6212	R46	$1,68 \cdot 10^{-1}$				
991,5676	R48	3,30				

Таблица 6

Расчетные и экспериментальные данные по коэффициентам поглощения NH_3 для полосы 0001—0200 генерации CO_2 -лазера

Частота (см^{-1})	Линия CO_2 - лазера	K_v (расч.) ($\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$) $T=296 \text{ K}$	K_v (эксп.) ($\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$)				
			[16]	[17]	[15]	[18]	[19]
1	2	3	4	5	6	7	8
1018,9020	P48	$1,26 \cdot 10^{-2}$					
1021,0579	P46	$1,36 \cdot 10^{-2}$					
1023,1901	P44	$1,47 \cdot 10^{-1}$					
1025,2984	P42	$8,04 \cdot 10^{-2}$					
1027,3825	P40	1,64					
1029,4423	P38	$1,40 \cdot 10^{-1}$					
1031,4776	P36	$5,35 \cdot 10^{-1}$			$5,80 \cdot 10^{-1}$		
1033,5843	P34	2,33			3,74		
1035,4737	P32	$2,26 \cdot 10^{-1}$	$3,40 \cdot 10^{-1}$	$3,10 \cdot 10^{-1}$		$2,80 \cdot 10^{-1}$	$3,20 \cdot 10^{-1}$
1037,4342	P30	$5,01 \cdot 10^{-2}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$	$8,20 \cdot 10^{-2}$		$8,00 \cdot 10^{-2}$	$9,00 \cdot 10^{-1}$
1039,3694	P28	$3,89 \cdot 10^{-2}$	$9,00 \cdot 10^{-2}$	$5,60 \cdot 10^{-2}$		$8,00 \cdot 10^{-2}$	$6,00 \cdot 10^{-2}$
1041,2791	P26	$3,98 \cdot 10^{-2}$	$5,00 \cdot 10^{-2}$	$1,00 \cdot 10^{-1}$		$1,20 \cdot 10^{-1}$	$1,00 \cdot 10^{-1}$
1043,1633	P24	$2,07 \cdot 10^{-1}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$	$4,30 \cdot 10^{-1}$		$4,60 \cdot 10^{-1}$	$4,70 \cdot 10^{-1}$

1	2	3	4	5	6	7	8
1045,0218	P22	$3,22 \cdot 10^{-1}$	$2,50 \cdot 10^{-1}$	$3,50 \cdot 10^{-1}$	$4,20 \cdot 10^{-1}$	$3,60 \cdot 10^{-1}$	$3,80 \cdot 10^{-1}$
1046,8543	P20	2,73	2,28	2,16	2,38	2,71	2,50
1048,6609	P18	$2,25 \cdot 10^{-1}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$	$2,40 \cdot 10^{-1}$	$3,20 \cdot 10^{-1}$	$2,30 \cdot 10^{-1}$	$2,60 \cdot 10^{-1}$
1050,4414	P16	$1,55 \cdot 10^{-1}$	$1,80 \cdot 10^{-1}$	$2,00 \cdot 10^{-1}$		$1,80 \cdot 10^{-1}$	$2,20 \cdot 10^{-1}$
1052,1956	P14	$3,42 \cdot 10^{-1}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$	$3,10 \cdot 10^{-1}$		$3,80 \cdot 10^{-1}$	$3,40 \cdot 10^{-1}$
1053,9236	P12	$9,30 \cdot 10^{-1}$	1,03	$9,40 \cdot 10^{-1}$		$9,60 \cdot 10^{-1}$	1,03
1055,6251	P10	$2,61 \cdot 10^{-1}$	$6,00 \cdot 10^{-2}$	$3,60 \cdot 10^{-1}$		$3,80 \cdot 10^{-1}$	$3,90 \cdot 10^{-1}$
1058,1953	P8	$2,98 \cdot 10^{-2}$	$3,10 \cdot 10^{-1}$				
1058,9488	P6	$8,11 \cdot 10^{-2}$					
1060,5707	P4	$2,69 \cdot 10^{-2}$					
1062,1660	P2	$4,87 \cdot 10^{-2}$					
1064,5089	R0	$3,89 \cdot 10^{-1}$					
1066,0374	R2	2,02					
1067,5391	R4	$4,31 \cdot 10^{-1}$					
1069,0141	R6	$1,20 \cdot 10^{-1}$			$3,70 \cdot 10^{-1}$		
1070,4623	R8	1,79	3,00		2,76		2,60
1071,8838	R10	$1,63 \cdot 10^{-1}$	$3,50 \cdot 10^{-1}$	$2,40 \cdot 10^{-1}$	$3,90 \cdot 10^{-1}$	$2,70 \cdot 10^{-1}$	$3,70 \cdot 10^{-1}$
1073,2785	R12	$2,69 \cdot 10^{-1}$	$2,50 \cdot 10^{-1}$	$3,40 \cdot 10^{-1}$	$3,10 \cdot 10^{-1}$	$3,20 \cdot 10^{-1}$	
1074,6465	R14	$5,81 \cdot 10^{-1}$	$6,70 \cdot 10^{-1}$	$6,60 \cdot 10^{-1}$	$7,80 \cdot 10^{-1}$	$6,90 \cdot 10^{-1}$	$7,20 \cdot 10^{-1}$
1075,9879	R16	$1,47 \cdot 10^{+1}$	$1,33 \cdot 10^{+1}$	$1,27 \cdot 10^{+1}$	$1,35 \cdot 10^{+1}$	$1,38 \cdot 10^{+1}$	$1,05 \cdot 10^{+1}$
1077,3026	R18	$9,72 \cdot 10^{-2}$	$3,60 \cdot 10^{-1}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$	$2,90 \cdot 10^{-1}$	$1,40 \cdot 10^{-1}$	$1,40 \cdot 10^{-1}$
1078,5907	R20	$4,09 \cdot 10^{-2}$	$2,10 \cdot 10^{-1}$	$2,70 \cdot 10^{-2}$		$6,00 \cdot 10^{-2}$	$3,00 \cdot 10^{-2}$
1079,8523	R22	$3,79 \cdot 10^{-2}$	$1,00 \cdot 10^{-1}$	$6,40 \cdot 10^{-2}$		$7,00 \cdot 10^{-2}$	$7,80 \cdot 10^{-2}$
1081,0875	R24	$5,51 \cdot 10^{-2}$	$1,20 \cdot 10^{-1}$	$6,40 \cdot 10^{-2}$		$8,00 \cdot 10^{-2}$	$7,00 \cdot 10^{-2}$
1082,2963	R26	$1,07 \cdot 10^{-1}$	$3,70 \cdot 10^{-1}$	$1,10 \cdot 10^{-1}$		$1,00 \cdot 10^{-1}$	$1,20 \cdot 10^{-1}$
1083,4788	R28	$4,19 \cdot 10^{-1}$		$3,80 \cdot 10^{-1}$	$5,30 \cdot 10^{-1}$	$4,50 \cdot 10^{-1}$	$4,20 \cdot 10^{-1}$
1084,6352	R30	$7,22 \cdot 10^{+1}$		$1,20 \cdot 10^{+2}$	$7,00 \cdot 10^{+1}$	$2,70 \cdot 10^{+1}$	
1085,7655	R32	$5,34 \cdot 10^{-1}$			$2,70 \cdot 10^{-1}$		
1086,8699	R34	$2,21 \cdot 10^{-1}$					
1087,9485	R36	$8,72 \cdot 10^{-2}$					
1089,0014	R38	$4,25 \cdot 10^{-1}$					
1090,0288	R40	$1,58 \cdot 10^{-1}$					
1091,0308	R42	$8,88 \cdot 10^{-2}$					
1092,0076	R44	$6,76 \cdot 10^{-1}$					
1092,9594	R46	$9,52 \cdot 10^{-2}$					
1093,8863	R48	$8,28 \cdot 10^{-1}$					

Таблица 7

Расчетные и экспериментальные данные по коэффициентам поглощения O_3 K_v ($\text{атм}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$) для полосы 0001–0200 генерации CO_2

Частота (см^{-1})	Линия CO_2 - лазера	K_v (расч.) $T=296$ К	K_v (эксп.)					
			[38]	[17]	[22]	[23]	[24]	[18]
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1018,9020	P48	7,66						
1021,0579	P46	6,39						
1023,1901	P44	6,48						
1025,2984	P42	9,72						
1027,3825	P40	10,4						
1029,4423	P38	4,17						
1031,4776	P36	3,78	6,67	6,70	8,00		2,20	
1033,5843	P34	3,43	2,99	3,00	3,60		3,50	3,60
1035,4737	P32	4,28	5,98	5,90	6,00		3,70	6,20
1037,4342	P30	5,07	6,44	6,40	7,80		4,30	6,60
1039,3694	P28	8,29	9,44	9,40	11,8		2,10	9,00
1041,2791	P26	5,49	5,98	6,00	6,5	—	1,00	6,00

1	2	3	4	5	6	7	8	9
1043,1633	P24	0,35	0,69	0,70	1,20	0,71	0,80	0,57
1045,0218	P22	1,08	1,84	1,80	2,90	1,93	2,30	1,97
1046,8543	P20	4,52	5,29	5,50	5,20	4,33	2,60	4,70
1048,6609	P18	2,88	6,45	6,40	8,00	6,11	4,50	5,50
1050,4414	P16	6,74	8,98	9,00	11,5	8,78	5,00	8,50
1052,1956	P14	8,76	12,6	12,7	14,6	12,9	5,80	12,8
1053,9236	P12	12,0	12,2	12,2	14,4	12,4		11,4
1055,6251	P10	10,2	5,98	6,00	7,40	6,43		5,70
1058,1953	P8	15,6	12,7	12,7	14,5	14,1		12,3
1058,9488	P6	5,19						
1060,5707	P4	10,3						
1062,1660	P2	7,63						
1064,5089	R0	5,71						
1066,0374	R2	3,38						
1067,5391	R4	2,64						
1069,0141	R6	1,53						
1070,4623	R8	1,22						
1071,8838	R10	$6,67 \cdot 10^{-1}$						
1073,2785	R12	$5,02 \cdot 10^{-1}$						
1074,6465	R14	$2,86 \cdot 10^{-1}$						
1075,9879	R16	$1,15 \cdot 10^{-1}$						
1077,3026	R18	$4,95 \cdot 10^{-2}$						
1078,5907	R20	$5,80 \cdot 10^{-2}$						
1079,8523	R22	$1,80 \cdot 10^{-1}$						
1081,0875	R24	$4,42 \cdot 10^{-1}$						
1082,2963	R26	$9,56 \cdot 10^{-2}$						
1083,4788	R28	$7,42 \cdot 10^{-2}$						
1084,6352	R30	$2,28 \cdot 10^{-1}$						
1085,7655	R32	$1,05 \cdot 10^{-1}$						
1086,8699	R34	$1,85 \cdot 10^{-1}$						
1087,9485	R36	$1,98 \cdot 10^{-1}$						
1089,0014	R38	$2,31 \cdot 10^{-1}$						
1090,0288	R40	$1,18 \cdot 10^{-1}$						
1091,0308	R42	$1,17 \cdot 10^{-1}$						
1092,0076	R44	$1,75 \cdot 10^{-1}$						
1092,9594	R46	$1,44 \cdot 10^{-1}$						
1093,8863	R48	$1,65 \cdot 10^{-1}$						

Озон (O_3). Поглощение озоном в рассматриваемом диапазоне исследовалось неоднократно [20–24], но разброс в экспериментальных значениях КП достигал сотен процентов (9P28). Наиболее пригодные для зондирования озона линии 9P8, 9P12 измерены достаточно точно (~20%), и рассчитанные значения КП адекватны экспериментальным значениям (см. табл. 7).

Оксид азота (N_2O). Вклад в поглощение оксида азота в диапазоне 9–11 мкм обычно не учитывается. Это объясняется тем, что содержание N_2O в реальной атмосфере невелико. Однако по величине абсолютные значения КП N_2O на переходах 10P2, 10P14, 10P16, 10P32 сравнимы с КП CO_2 и при протяженных трассах влияние N_2O желательно учитывать.

Диоксид серы (SO_2). Как следует из табл. 8, значение КП SO_2 мало и может быть существенным лишь для переходов 9R48–9R10. Экспериментальное значение КП [16] для наиболее сильно поглощаемой линии 9R26 совпадает с теоретическим на 95%. Согласие между расчетом и экспериментом для остальных длин волн ОКГ несколько хуже, но единичный эксперимент не дает оснований для окончательных выводов о достоверности ПСЛ SO_2 .

Оксосульфид (OCS) и сероводород (H_2S). Эти газы экспериментально не изучались с помощью ОКГ на CO_2 , т. к. значения КП этих газов в этом диапазоне малы. КП OCS достигает макси-

мальной величины $0,5 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ для линии ОКГ 9Р34. Использование лазера на CO_2 для газоанализа на эти соединения, видимо, целесообразно только при больших концентрациях этих газов (например, в цехах химических и металлургических производств).

Таблица 8

Расчетные и экспериментальные данные по коэффициенту поглощения SO_2 ($K_v \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$) для полосы 0001–0200 генерации CO_2 -лазера

Частота (см^{-1})	Линия CO_2 -лазера	K_v (расч.)	K_v (эксп.) [16]
1	2	3	4
1018,9020	P48		
1021,0579	P46		
1023,1901	P44		
1025,2984	P42		
1027,3825	P40		
1029,4423	P38		
1031,4776	P36		
1033,5843	P34	$4,78 \cdot 10^{-9}$	
1035,4737	P32	$1,87 \cdot 10^{-8}$	
1037,4342	P30	$5,60 \cdot 10^{-8}$	
1039,3694	P28	$1,88 \cdot 10^{-7}$	
1041,2791	P26	$8,00 \cdot 10^{-7}$	
1043,1633	P24	$3,25 \cdot 10^{-6}$	
1045,0218	P22	$6,26 \cdot 10^{-5}$	
1046,8543	P20	$3,48 \cdot 10^{-5}$	
1048,6609	P18	$1,53 \cdot 10^{-4}$	
1050,4414	P16	$3,00 \cdot 10^{-4}$	
1052,1956	P14	$1,50 \cdot 10^{-3}$	
1053,9236	P12	$7,99 \cdot 10^{-4}$	
1055,6251	P10	$6,33 \cdot 10^{-4}$	
1058,1953	P8	$3,04 \cdot 10^{-3}$	
1058,9488	P6	$2,59 \cdot 10^{-3}$	
1060,5707	P4	$5,19 \cdot 10^{-3}$	
1062,1660	P2	$1,26 \cdot 10^{-2}$	
1064,5089	R0	$2,97 \cdot 10^{-2}$	
1066,0374	R2	$3,28 \cdot 10^{-2}$	
1067,5391	R4	$3,21 \cdot 10^{-2}$	
1069,0141	R6	$3,11 \cdot 10^{-2}$	
1070,4623	R8	$3,09 \cdot 10^{-2}$	$3,60 \cdot 10^{-2}$
1071,8838	R10	$2,53 \cdot 10^{-2}$	$4,40 \cdot 10^{-2}$
1073,2785	R12	$3,05 \cdot 10^{-2}$	$4,80 \cdot 10^{-2}$
1074,6485	R14	$3,80 \cdot 10^{-2}$	$5,40 \cdot 10^{-2}$
1075,9879	R16	$3,88 \cdot 10^{-2}$	$5,60 \cdot 10^{-2}$
1077,3026	R18	$5,33 \cdot 10^{-2}$	$6,80 \cdot 10^{-2}$
1078,5907	R20	$5,70 \cdot 10^{-2}$	$8,80 \cdot 10^{-2}$
1079,8523	R22	$5,53 \cdot 10^{-2}$	$7,20 \cdot 10^{-2}$
1081,0875	R24	$6,99 \cdot 10^{-2}$	$9,00 \cdot 10^{-2}$
1082,2963	R26	$1,00 \cdot 10^{-1}$	$1,05 \cdot 10^{-1}$
1083,4788	R28	$8,82 \cdot 10^{-2}$	$9,20 \cdot 10^{-2}$
1084,6352	R30	$9,48 \cdot 10^{-2}$	$1,10 \cdot 10^{-1}$
1085,7655	R32	$8,68 \cdot 10^{-2}$	
1086,8699	R34	$7,97 \cdot 10^{-2}$	

1	2	3	4
1087,9485	R36	$1,05 \cdot 10^{-1}$	
1089,0014	R38	$1,09 \cdot 10^{-1}$	
1090,0288	R40	$1,28 \cdot 10^{-1}$	
1091,0308	R42	$9,73 \cdot 10^{-2}$	
1092,0076	R44	$1,54 \cdot 10^{-1}$	
1092,9594	R46	$1,99 \cdot 10^{-1}$	
1093,8863	R48	$1,22 \cdot 10^{-1}$	

Фреон-12 (CF_2Cl_2). В базу данных ПСЛ включены параметры линий полосы ν_6 фреона-12, полученные авторами [25]. Однако рассчитанные значения КП в два раза ниже экспериментальных. В области 9–11 мкм в спектре фреона-12 поглощают, помимо полосы ν_6 , обертоновая и комбинационные полосы $2\nu_2$, $\nu_6+\nu_4-\nu_4$, $\nu_6+\nu_5-\nu_5$. Кроме того, следует учитывать роль изотопических модификаций $\text{CF}_2^{37}\text{Cl}_2$ и $\text{CF}_2^{35}\text{Cl}^{37}\text{Cl}$. При расчете полуширины линий фреона-12 принимались равными $0,1 \text{ см}^{-1}$, без учета вращательной зависимости полуширины, что также приводит к заниженному значению КП. Все это говорит о необходимости спектроскопических исследований фреона-12 и формировании полного файла ПСЛ в районе 9–11 мкм, что на данном этапе требует отдельного рассмотрения.

Режим работы программного комплекса «Разбег»

В описываемом программном комплексе «Разбег» предусмотрены следующие режимы функционирования, определяемые набором отдельных букв:

- S* – выбор лазерной линии заданием ее характеристик или длины волны излучения;
- R* – выбор параметров линий из базы данных и их просмотр;
- L* – редакция характеристик лазерных линий;
- C* – выбор конкретного (одного) газа, анализ которого желателен;
- P* – выдача протокола на печать (см. табл. 9);
- M* – выбор смеси нескольких газов;
- O* – поиск оптимальных для газоанализа длин волн и выдача массива характеристик лазерных линий с нумерацией;
- N* – выбор для анализа лазерной линии из числа найденных (оптимальных) по указанию номера линии.

Таблица 9

ATLAS SYSTEM V-1.0 CO₂-Laser Gases Analysis Subsystem. Session protocol

Wednesday, 22/5/1991 15:15:46

Laser line parameters:
Centre=9.14172 (1093.89);
Quantum identification: 001—020 R(48);
Isotope code: 626

Base lines parameters in interval ± 2 GHz:

Centre	Intensity	H/W	Gas
1093.84420	3.976E-06	0.070	20 (OCS)
1093.84620	4.009E-06	0.070	20 (OCS)
1093.86043	3.336E-05	0.080	9 (SO2)
1093.87993	9.179E-05	0.080	9 (SO2)
1093.89163	4.223E-05	0.080	9 (SO2)
1093.95247	3.207E-03	0.080	9 (SO2)
1093.95756	1.124E-03	0.080	9 (SO2)

Absorption of H2O=1.250E-06

Absorption of N2O=2.796E-08

Absorption of SO2=1.221E-01

Absorption of OCS=7.420E-05

Absorption of H2S=2.915E-03

Принцип выбора «оптимальных» линий CO₂-лазера для зондирования различных атмосферных и загрязняющих газов заключается в следующем. Для заданного газа из базы данных ПСЛ выбираются (до 500) наиболее интенсивные линии, для которых выполняется соотношение:

$$I_i \geq I_{\max} \cdot f,$$

где I_i — интенсивность i -й линии заданного газа, I_{\max} — максимальная интенсивность из всех ПСЛ данного газа, входящих в рассматриваемый спектральный интервал; f — множитель, подбираемый эмпирически, таким образом, чтобы количество самых интенсивных линий было в пределах 100–499, ($0 < f < 1$).

Затем каждая из этих линий сравнивается с лазерными линиями из базы лазерных (CO₂) ПСЛ. В качестве «оптимальных» выбираются линии, для которых выполняется условие

$$\nu_\lambda - \Delta\nu \leq \nu_g \leq \nu_\lambda + \Delta\nu,$$

где ν_λ — центр лазерной линии; ν_g — центр линии заданного газа; $\Delta\nu$ — интервал расстройки частот.

Заключение

Дистанционные измерения ослабления оптического излучения, проходящего через атмосферу, содержат информацию о ее газовом составе, т. е. измеряемый коэффициент поглощения обусловлен перекрыванием линий поглощения различных газовых компонент. Независимо от математического аппарата, применяемого для обработки результатов дистанционных измерений, значения коэффициентов поглощения с интервалом погрешностей должны быть известны априори. Анализ экспериментальных значений коэффициентов поглощения (КП) показывает, что единичные кюветные измерения КП отдельных газов не дают уверенности в достоверности полученных данных и расхождения между результатами независимых экспериментов могут достигать порядков. В данной статье показано, что развивая принципы формирования баз данных по параметрам спектральных линий атмосферных и примесных газов, основанные на компиляции, систематизации и селекции как экспериментальных, так и расчетных данных, с анализом их достоверности, можно проводить обоснованные расчеты спектральных характеристик поглощения атмосферных и примесных газов для корректного решения задачи лазерного газоанализа.

1. Beck R., Englisch W., Gurs K. Table of Laser Lines in Gases and Vapors. Springer series in optical sciences, 1978. 203 p.
2. Войцеховская О.К., Розина А.В., Трифонова Н.Н. Информационная система по спектроскопии высокого разрешения. Новосибирск: Наука, 1988. 150 с.
3. Войцеховская О.К., Розина А.В., Трифонова Н.И. Работа с базами параметров спектральных линий в системе АТЛАС. Томск, 1986. 44 с. (Препринт/ИОА СО АН СССР, № 37).
4. Черкасов М.Р. К ударной теории уширения спектральных линий. 1. Метод релаксационных параметров. М., 1977, 20 с. Деп. в ВИНТИ 20.12.77. № 4281-77.
5. Birnbaum G. // *Advanc. Chem. Phys.* 1967. V. 12. P. 487–548.
6. Krishnaji, Prakash V. // *Rev. Modern. Phys.* 1966. V. 38. P. 690–700.
7. Stogryn D.E., Stogryn A.P. // *Molec. Phys.* 1966. V. 11. P. 371–393.
8. Аганбекян К.А., Войцеховская О.К., Куликов В.В., Трифонова Н.Н. // *Оптика атмосферы.* 1988. Т. 1. № 7. С. 47–55.
9. Аганбекян К.А., Гулаев Г.А., Куликов В.В., Трифонова Н.Н., Войцеховская О.К. // *J. Mol. Spectrosc.* 1988. V. 130. № 1. P. 258–261.
10. Rothman L.S., Gamache R.R., Barbe A. et al. // *Appl. Optics.* 1983. V. 22. № 15. P. 2247–2256.
11. Hinderling J., Sigrist M.W., Kneubuhl F.K. // *Infrared Phys.* 1987. V. 27. № 2. P. 2085–2090.
12. Grant W.V. // *Appl. Optics.* 1990. V. 29. № 4. P. 452–462.
13. Арефьев В.Н., Погадаев Б.Н., Сизов Н.И. // *Квантовая электроника.* 1983. Т. 1. № 3. С. 496–502.
14. Roberts R.E., Selby J.E., Biberman L.M. // *Appl. Optics.* 1976. V. 15. № 9. P. 2085–2090.
15. Хмельницкий Г.С. Зондирование газов в атмосфере по молекулярному поглощению излучения перестраиваемого СО₂-лазера. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. Томск: ИОА СО АН СССР, 1979. 16 с.
16. Mayer A., Comera J., Sarpentier H., Jaussaud C. // *Appl. Optics.* 1978. V. 17. № 3. P. 391–393.
17. Patty R.R., Russwurm G.M., McClenny W.A., Morgan D.R. // *Appl. Optics.* 1974. V. 13. № 12. P. 2850–2854.
18. Boscher J., Shafer G., Wiesemann W. BMFT contract 01 TTL 018a, AK/RT/WRT 2077, Bottele Institute, Frankfurt, 1979.
19. Graig S.E., Morgan D.R., Roberts D.A., Showman L.K. Development of a gas laser system to measure trace gases by long path absorption techniques. Final Report, EPA Contract 68-02-0767, 1974.
20. Shumate M.S., Menzies R.T., Margolis J.S., Rasengren L.G. // *Appl. Optics.* 1976. V. 15. № 10. P. 2480–2484.

21. Kelly P.L., McClatchey R.A., Long R.K., Snelson A. //Opt. and Quant. Electron. 1976. V. 8. P. 117–144.
22. Shewechun J., Garside B.R., Ballik L.A. et al. //Appl. Optics. 1976. V. 15. № 2. P. 340–346.
23. Menzies R.T. //Appl. Optics. 1976. V. 15. № 11. P. 2597–2660.
24. Asai K., Igarashi T. //Jap. J. Appl. Phys. 1975. V. 14. № 1. P. 137–141,
25. Voitsekhovskaya O.K., Kosishkin Yu.V., Makushkin Yu.S. et al. // J. Mol. Spectrosc. 1987. V. 124. № 1. P. 13–20.
26. Rothman L.S. //Appl. Optics, 1986. V. 25. № 11. P. 1795–1816.
27. Chedin A., Husson N. et al. Le banque de donnees «GEISA»—laboratoire de meteorologi'e dynamique du C. N. R. S. Note interue L. M. D. 1980. V. 108; note interue L. M. D.. 1981. V. 1,13.
28. Toth R.A. //J. Opt. Soc. Amer. .1987. V. 4. № 3. P. 357–374,
29. Toth R.A. //Appl. Optics. 1984. V. 23. № 11. P. 1825–1834.
30. Vanek M.D., Weill J.S., Maki A.G. //J. Mol. Spectrosc. 1989.V. 138. № 1. P. 79–83.
31. Maki A.G., Olson W.B. //J. Mol. Spectrosc. 1,986. V. 130. № 1. P. 69–80.
32. Sattler J.P., Worchesky T.L., Maki A.G., Lafferty W.J. //J. Mol. Spectrosc. 1981. V. 90. № 3. P. 460–466.
33. Strow L.L. //J. Mol. Spectroscs. 1983. V. 97. № 1. P. 9–28
34. Guelachvili G., Ulenikow O.N., Ushakova G.A. //J. Mol. Spectrosc. 1984. V. 108. № 1. P. 1–5.
35. Rao K.N., Smith M.A., Fridovich B., Rinsland C.P. Molecular Spectroscopy. Modern Research. 1985. V. III. P. 111–248.
36. Банах Г.Ф., Войцеховская О.К., Трифонова Н.Н. //Оптика атмосферы. 1988. Т. 1. № 5. С. 37–42.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,
Томск

Поступила в редакцию
23 мая 1991 г.

О.К. Voitsekhovskaya, S.V. Kuznetsov, S.V. Sapozhnikov,
M.R. Cherkasov. **Informational System of the Molecular Absorption of the CO₂- Laser Radiation.**

The paper presents the description of the information system (IS) aimed at providing the studies of gaseous media using the CO₂-laser radiation with the data of absolute values of the absorption coefficients of the atmosphere and trace gases. In addition to characteristics of the CO₂ lasing transitions the IS presents information on the parameters of absorption lines compiled using original techniques of calculations. Great attention is paid to the reliability of the information. A comparison of the information included into the IS with the experimental data obtained by other authors is made.