

Коэффициенты уширения и сдвига линий поглощения молекулы воды в области 8650–9020 см⁻¹

В.М. Дейчули^{1,2}, Т.М. Петрова¹, Ю.Н. Пономарев¹, А.М. Солодов¹,
А.А. Солодов^{1*}

¹Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

²Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36

Поступила в редакцию 1.04.2019 г.

Проведено сравнение коэффициентов уширения и сдвига центров линий поглощения молекулы H₂O со следующими буферными газами: Ar, He, H₂ и N₂. Данные о коэффициентах уширения и сдвига линий получены из анализа спектров поглощения, зарегистрированных с помощью Фурье-спектрометра в спектральном диапазоне 8650–9020 см⁻¹ со спектральным разрешением 0,01 см⁻¹. С помощью двух моделей формы контура (контур Фойгта и контур Фойгта, зависящий от скорости поглощающей молекулы) были получены параметры линий поглощения молекулы воды. Показано, что применение контура Фойгта, зависящего от скорости, дает лучшее согласие с экспериментальными данными.

Ключевые слова: коэффициенты уширения и сдвига, Фурье-спектрометр, водяной пар; broadening and shift coefficients, Fourier spectrometer, water vapor.

Исследование спектров поглощения молекулы воды вызывает постоянный интерес, который связан с той особой ролью, которую она играет в атмосфере Земли. Для многочисленных приложений необходимо знать точные значения коэффициентов уширения и сдвига линий этой молекулы.

В последние годы большое внимание уделяется получению точной и достоверной информации о параметрах спектральных линий газов. Показано, что широко используемый контур Фойгта не достаточно точно описывает реальные контуры линий поглощения [1–4], что приводит к ошибкам в определении таких параметров линий, как интенсивность и коэффициенты уширения, которые могут достигать нескольких процентов даже для изолированных линий. Наиболее сильно отличия проявляются вблизи центра и в крыльях спектральных линий. Такая неточность модели может внести существенную погрешность в величину концентрации исследуемого газа.

В настоящее время существует достаточно много моделей формы контура линий поглощения, учитывающих тонкие эффекты, проявляющиеся в спектрах молекул. Для использования в массовых спектроскопических измерениях в широких диапа-

зонах длин волн необходимы достаточно простые контуры с небольшим числом физически ясных параметров аппроксимации. Цель данной работы – сравнение параметров линий поглощения молекулы H₂O, полученных с помощью различных профилей из наборов данных для H₂O–Ar, H₂O–He, H₂O–N₂ и H₂O–N₂.

Эксперимент

Коэффициенты уширения и сдвига линий поглощения молекулы воды в области 8650–9020 см⁻¹ были проанализированы нами в работах [5–8]. При получении параметров спектральных линий для H₂O–N₂ и H₂O–He использовался традиционный контур Фойгта, в то время как для H₂O–N₂ и H₂O–Ar – контур Фойгта, зависящий от скорости активной молекулы.

Все спектры были измерены в области 8650–9020 см⁻¹ при помощи Фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR, оснащенного вольфрамовым источником света и InSb-детектором. Данная модель Фурье-спектрометра имеет герметизированный корпус, который с помощью форвакуумного насоса откачивался до остаточного давления ~0,02 мбар, что значительно уменьшало влияние атмосферных газов на результаты измерений. Давление воды не превышало 18 мбар, а давление буферного газа варьировалось от 0 до 3100 мбар. В зависимости от величины давления смеси «H₂O – буферный газ» использовались три датчика: для диапазона давлений

* Владимир Михайлович Дейчули (dvm91@yandex.ru); Татьяна Михайловна Петрова (tanja@iao.ru); Юрий Николаевич Пономарев (yurpon@iao.ru); Александр Михайлович Солодов (solodov@iao.ru); Александр Александрович Солодов (asolodov@iao.ru).

0–100 мбар – Varatron (погрешность измерений 0,25%), для диапазона 100–1000 мбар – DVR5 (точность измерения 0,5%) и для диапазона 1000–3000 мбар – DM501E (точность измерения 0,5%). Все записи спектров поглощения были выполнены при комнатной температуре (296 K) со спектральным разрешением $0,01 \text{ см}^{-1}$ при оптической длине луча в кювете 10 м. В табл. 1 представлены экспериментальные условия, при которых проводились измерения.

Таблица 1

Давление смеси «H ₂ O – буферный газ», мбар							
H ₂ O–Ar		H ₂ O–H ₂		H ₂ O–N ₂		H ₂ O–He	
17	282	16	684	17	288	10	261
18	593	16	488	15	588	10	602
18	890	8	417	17	905	10	1028
		10	415	6	298	10	2021
		17	334	6	619	10	2510
		18	181	6	971	10	3127

Более подробно экспериментальная установка и методика проведения эксперимента описаны в [5–8].

Результаты и обсуждение

Мы рассмотрели 35 линий поглощения молекулы воды, относящихся либо к изолированным, либо к линиям, для которых легко учесть близкорасположенные линии с меньшей интенсивностью, причем доплеровская полуширина менялась в пределах от $0,0125$ до $0,0130 \text{ см}^{-1}$. Отношение сигнал-шум было достаточно высоким – от 1000 и выше. В спектральной области $8650–9020 \text{ см}^{-1}$ наблюдаются линии поглощения водяного пара, принадлежащие колебательным полосам $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$, $2\nu_1 + \nu_2$, $6\nu_2$, $\nu_2 + 2\nu_3$. Наиболее сильной является полоса $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$, именно для ее линий поглощения определялись значения коэффициентов уширения и сдвига центров.

Для расчета параметров применялась программа [9, 10], которая позволяет получать параметры линий при помощи их одновременной подгонки к нескольким спектрам, зарегистрированным при разных условиях. Для аппроксимации экспериментальных данных были использованы две модели формы контура – традиционный контур Фойгта (V) при фиксированной доплеровской полуширине и контур Фойгта, зависящий от скорости активной молекулы (qSDV – quadratic speed-dependent Voigt).

Физический механизм, приводящий к сужению спектральных линий, – это так называемый эффект ветра, который обусловлен зависимостью констант столкновительной релаксации от скорости активной молекулы. В этом случае лоренцевская полуширина и сдвиг центра линии не являются постоянными, а зависят от скорости поглощающей молекулы.

Для определения параметров линий с помощью контура qSDV использовался быстрый алгоритм вычисления, предложенный в [11]. Эффект ветра

учитывается и в контуре для изолированных линий поглощения, рекомендованном IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) [4]. Были вычислены такие параметры спектральных линий, как положение центра линий, интенсивность, коэффициенты уширения, сдвига и сужения для четырех наборов данных H₂O–Ar, H₂O–He, H₂O–H₂ и H₂O–N₂.

На рис. 1 представлена линия поглощения молекулы H₂O с центром $8848,06925 \text{ см}^{-1}$, уширенная давлением водорода, гелия, азота и аргона, а также разность между экспериментальными и рассчитанными профилями. Следует отметить, что все эти расчеты были сделаны с фиксированной доплеровской шириной. Каждый спектр имел свою базовую линию, которая рассчитывалась с помощью полинома первого порядка. Из рис. 1 видно, что V не может правильно описать наблюдаемую линию и во внимание должны быть приняты эффекты сужения линии: сужение за счет эффекта Дике и сужение, обусловленное зависимостью полуширины спектральной линии от скорости поглощающей молекулы (эффект ветра). Поскольку все спектры были зарегистрированы при давлениях буферных газов выше 300 мбар, то наибольший вклад в сужение линий дает эффект ветра. На рис. 1 спектр, рассчитанный с помощью qSDV-профиля, хорошо совпадает с экспериментальным спектром. Средне-квадратичное отклонение для контура Фойгта менялось от $9 \cdot 10^{-5}$ до $1,46 \cdot 10^{-4}$, в то время как для qSDV оно было меньше и составляло $5 \cdot 10^{-5} \dots 8 \cdot 10^{-5}$.

В табл. 2 и 3 приведены полученные значения параметров уширения спектральных линий молекулы воды разными газами и соответствующие им доверительные интервалы.

На рис. 2 и 3 показаны значения коэффициентов уширения линий молекулы воды, полученные при помощи двух контуров. Линии в таблицах и на рисунках сгруппированы так, чтобы проявлялись подполосы в колебательно-вращательной полосе $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ молекулы воды.

Рис. 3 более подробно иллюстрирует зависимость коэффициентов уширения линий поглощения молекулы воды от вращательного квантового числа J для разных буферных газов. Показаны подветви, для которых вращательное квантовое число K_a не меняется и для верхнего и нижнего колебательно-вращательных состояний равно либо нулю (рис. 3, а), либо единице (рис. 3, б).

Взаимодействие между молекулой воды и представленными в работе буферными газами различно, поскольку гелий и аргон являются инертными газами, а водород и азот – это двухатомные молекулы. Кроме того, массы молекул данных газов значительно отличаются друг от друга. Поэтому сравнение параметров уширения линий поглощения молекулы воды нужно проводить для двух групп.

1. Молекула воды – инертный газ. В таких системах электростатическая часть потенциала взаимодействия равна нулю, а близкодействующая часть

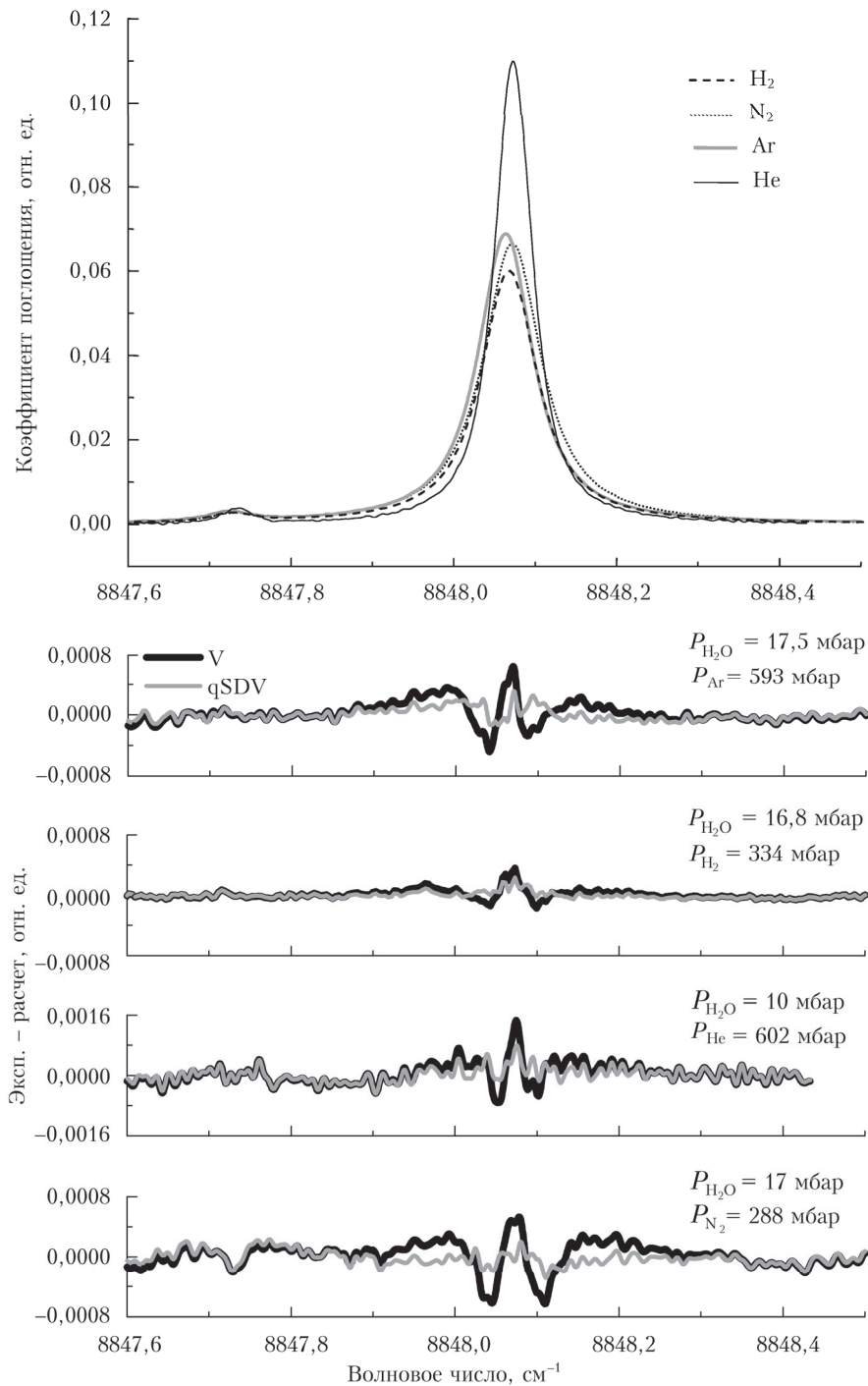


Рис. 1. Линия поглощения молекулы H_2O с центром $8848,06925 \text{ см}^{-1}$, уширенная давлением водорода, азота, аргона и гелия; для аппроксимации использовались контур Фойгта и контур Фойгта, зависящий от скорости активной молекулы

играет наиболее важную роль. Поскольку масса молекулы аргона больше массы гелия, то для смеси $\text{H}_2\text{O}-\text{Ar}$ эффект ветра будет проявляться сильнее, следовательно, значения коэффициентов сужения будут больше (см. табл. 2). Коэффициенты уширения линий поглощения молекулы воды давлением гелия и аргона представлены на рис. 4, а. Разность между значениями коэффициентов уширения, по-

лученными при аппроксимации qSDV- и V-профилями, в среднем небольшая и составляет $0,00084$ и $0,0018 \text{ см}^{-1}$ для гелия и аргона.

2. Молекулы воды – двухатомные неполярные молекулы. Молекула воды обладает большим дипольным моментом, а молекулы N_2 и H_2 – это неполярные молекулы, дипольный момент которых равен нулю, поэтому при столкновениях основными

Т а б л и ц а 2

Коэффициенты уширения и сдвига линий поглощения молекулы воды давлением гелия и аргона.
 Параметры получены при использовании контура Фойгта, зависящего от скорости, $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$

ν , см^{-1} HITRAN	$J' K'_a K'_c J'' K''_a K''_c$	γ_{He}	δ_{He}	β_{He}	γ_{Ar}	δ_{Ar}	β_{Ar}
8830,23079	1 0 1 0 0 0	0,0235(1)	0,0012(1)	0,0032(3)	0,0478(2)	-0,0185(1)	0,0045(3)
8869,87204	3 0 3 2 0 2	0,0206(2)	0,0015(1)	0,0018(2)	0,0428(3)	-0,0208(1)	0,0061(3)
8899,69188	5 0 5 4 0 4	0,0190(1)	0,0024(1)	0,0008(1)	0,0380(2)	-0,0237(2)	0,0061(2)
8937,23296	8 0 8 7 0 7	0,0156(2)	0,0041(1)	0,0021(2)	0,0263(3)	-0,0266(2)	0,0079(3)
8948,14907	9 0 9 8 0 8	0,0159(2)	0,0046(1)	0,0026(3)	0,0238(3)	-0,0273(2)	0,0073(3)
8958,63401	10 0 10 9 0 9	0,0144(1)	0,0043(1)	0,0032(3)	0,0224(2)	-0,0257(2)	0,0071(3)
8760,13999	1 0 1 2 0 2	0,0213(1)	0,0000(1)	0,0019(2)	0,0490(3)	-0,0236(2)	0,0055(3)
8696,98670	4 0 4 5 0 5	0,0189(1)	0,0007(1)	0,0006(1)	0,0389(2)	-0,0260(1)	0,0036(2)
8652,08684	6 0 6 7 0 7	0,0171(2)	0,0020(1)	0,0017(2)	0,0320(3)	-0,0282(1)	0,0073(1)
8628,14132	7 0 7 8 0 8	0,0178(2)	0,0025(1)	0,0029(3)	0,0288(2)	-0,0282(2)	0,0087(2)
8848,06925	2 1 2 1 1 1	0,0230(1)	0,0025(1)	0,0026(3)	0,0462(2)	-0,0169(1)	0,0068(3)
8882,87188	4 1 4 3 1 3	0,0199(2)	0,0024(1)	0,0014(1)	0,0407(2)	-0,0220(2)	0,0063(1)
8912,25551	6 1 6 5 1 5	0,0187(1)	0,0028(1)	0,0030(3)	0,0342(1)	-0,0249(1)	0,0085(3)
8925,22161	7 1 7 6 1 6	0,0166(2)	0,0034(1)	0,0014(1)	0,0279(1)	-0,0255(2)	0,0060(2)
8937,13002	8 1 8 7 1 7	0,0161(1)	0,0042(1)	0,0018(2)	0,0273(2)	-0,0265(1)	0,0080(2)
8948,44132	9 1 9 8 1 8	0,0158(2)	0,0045(1)	0,0034(3)	0,0238(2)	-0,0272(2)	0,0080(3)
8957,60052	10 1 10 9 1 9	0,0142(1)	0,0048(1)	0,0031(3)	0,0212(1)	-0,0276(1)	0,0071(5)
8765,03919	1 1 1 2 1 2	0,0205(1)	0,0002(1)	0,0007(1)	0,0471(2)	-0,0254(1)	0,0030(3)
8742,92788	2 1 2 3 1 3	0,0212(1)	0,0003(1)	0,0022(2)	0,0464(3)	-0,0229(2)	0,0054(2)
8698,52490	4 1 4 5 1 5	0,0200(2)	0,0008(1)	0,0023(2)	0,0404(4)	-0,0263(1)	0,0064(2)
8675,77892	5 1 5 6 1 6	0,0179(2)	0,0013(1)	0,0019(2)	0,0358(1)	-0,0276(2)	0,0079(2)
8652,40180	6 1 6 7 1 7	0,0178(1)	0,0021(1)	0,0006(1)	0,0318(2)	-0,0279(1)	0,0070(2)
8628,31130	7 1 7 8 1 8	0,0170(1)	0,0029(1)	0,0031(3)	0,0283(3)	-0,0280(2)	0,0079(3)
8861,12402	2 1 1 1 1 0	0,0213(2)	0,0019(1)	0,0022(2)	0,0446(1)	-0,0205(1)	0,0064(3)
8955,05380	7 1 6 6 1 5	0,0205(2)	0,0036(1)	0,0039(4)	0,0355(2)	-0,0250(2)	0,0049(5)
8967,23161	8 1 7 7 1 6	0,0177(2)	0,0036(1)	0,0023(2)	0,0298(3)	-0,0259(1)	0,0027(4)
8989,79912	10 1 9 9 1 8	0,0184(2)	0,0054(1)	0,0067(7)	0,0240(2)	-0,0272(2)	0,0081(5)
8754,93163	1 1 0 2 1 1	0,0225(2)	0,0003(1)	0,0028(3)	0,0472(2)	-0,0236(2)	0,0064(4)
8730,12995	2 1 1 3 1 2	0,0206(2)	0,0017(1)	0,0018(2)	0,0407(2)	-0,0205(2)	0,0069(4)
8680,25840	4 1 3 5 1 4	0,0200(2)	0,0008(1)	0,0025(3)	0,0439(1)	-0,0246(2)	0,0082(4)
8658,07834	5 1 4 6 1 5	0,0212(2)	0,0012(1)	0,0025(3)	0,0412(2)	-0,0244(1)	0,0063(3)
8636,75707	6 1 5 7 1 6	0,0212(2)	0,0017(1)	0,0053(5)	0,0387(3)	-0,0254(2)	0,0087(5)

Т а б л и ц а 3

Коэффициенты уширения и сдвига линий поглощения молекулы воды давлением водорода и азота.
 Параметры получены при использовании контура Фойгта, зависящего от скорости, $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$

ν , см^{-1} HITRAN	$J' K'_a K'_c J'' K''_a K''_c$	γ_{H_2}	δ_{H_2}	β_{H_2}	γ_{N_2}	δ_{N_2}	β_{N_2}
1	2	3	4	5	6	7	8
8830,23079	1 0 1 0 0 0	0,0898(3)	-0,0107(1)	0,0044(1)	0,1162(3)	-0,0079(1)	0,0207(3)
8869,87204	3 0 3 2 0 2	0,0801(5)	-0,0088(1)	0,0053(1)	0,1108(4)	-0,0009(1)	0,0186(3)
8899,69188	5 0 5 4 0 4	0,0605(5)	-0,0114(1)	0,0041(1)	0,0959(4)	-0,0050(1)	0,0126(4)
8937,23296	8 0 8 7 0 7	0,0434(5)	-0,0150(2)	0,0047(2)	0,0584(4)	-0,0139(1)	0,0105(5)
8948,14907	9 0 9 8 0 8	0,0403(5)	-0,0150(2)	0,0033(2)	0,0466(4)	-0,0171(2)	0,0089(4)
8958,63401	10 0 10 9 0 9	0,0461(3)	-0,0135(2)	0,0033(1)	0,0442(3)	-0,0153(1)	0,0025(3)
8760,13999	1 0 1 2 0 2	0,0857(5)	-0,0162(1)	0,0064(2)	0,1145(4)	-0,0097(1)	0,0176(4)
8696,98670	4 0 4 5 0 5	0,0594(5)	-0,0172(1)	0,0033(1)	0,0998(4)	-0,0117(1)	0,0151(5)
8652,08684	6 0 6 7 0 7	0,0473(4)	-0,0170(2)	0,0044(1)	0,0733(3)	-0,0178(2)	0,0080(3)
8628,14132	7 0 7 8 0 8	0,0443(3)	-0,0155(1)	0,0050(1)	0,0613(3)	-0,0205(1)	0,0110(4)
8848,06925	2 1 2 1 1 1	0,0914(4)	-0,0104(1)	0,0051(2)	0,1119(4)	-0,0051(1)	0,0180(3)
8882,87188	4 1 4 3 1 3	0,0679(4)	-0,0102(1)	0,0040(1)	0,0994(4)	-0,0054(1)	0,0115(2)
8912,25551	6 1 6 5 1 5	0,0510(4)	-0,0126(1)	0,0039(2)	0,0833(4)	-0,0092(1)	0,0130(3)
8925,22161	7 1 7 6 1 6	0,0495(4)	-0,0147(2)	0,0072(2)	0,0720(3)	-0,0118(1)	0,0112(4)
8937,13002	8 1 8 7 1 7	0,0429(4)	-0,0154(2)	0,0037(1)	0,0545(3)	-0,0148(1)	0,0034(3)
8948,44132	9 1 9 8 1 8	0,0411(4)	-0,0151(1)	0,0043(2)	0,0477(3)	-0,0176(2)	0,0082(2)

Коэффициенты уширения и сдвига линий поглощения молекулы воды в области 8650–9020 см^{-1}

1	2	3	4	5	6	7	8
8957,60052	10 1 10 9 1 9	0,0436(1)	-0,0160(2)	0,0109(2)	0,0378(1)	-0,0209(2)	0,0082(2)
8765,03919	1 1 1 2 1 2	0,0925(6)	-0,0134(2)	0,0064(2)	0,1098(6)	-0,0051(2)	0,0108(2)
8742,92788	2 1 2 3 1 3	0,0805(4)	-0,0167(2)	0,0051(1)	0,1060(3)	-0,0080(2)	0,0133(1)
8698,52490	4 1 4 5 1 5	0,0594(4)	-0,0176(2)	0,0039(1)	0,0957(4)	-0,0123(2)	0,0134(4)
8675,77892	5 1 5 6 1 6	0,0521(5)	-0,0177(1)	0,0048(2)	0,0867(5)	-0,0142(1)	0,0149(4)
8652,40180	6 1 6 7 1 7	0,0469(3)	-0,0168(2)	0,0031(1)	0,0774(3)	-0,0148(1)	0,0190(3)
8628,31130	7 1 7 8 1 8	0,0441(3)	-0,0158(2)	0,0047(2)	0,0606(2)	-0,0187(1)	0,0096(4)
8861,12402	2 1 1 1 1 0	0,0887(4)	-0,0085(1)	0,0062(2)	0,1157(5)	-0,0070(1)	0,0240(3)
8955,05380	7 1 6 6 1 5	0,0597(5)	-0,0131(2)	0,0048(1)	0,0893(3)	-0,0055(2)	0,0067(2)
8967,23161	8 1 7 7 1 6	0,0526(4)	-0,0146(1)	0,0039(1)	0,0765(2)	-0,0100(2)	0,0093(3)
8989,79912	10 1 9 9 1 8	0,0460(4)	-0,0148(1)	0,0042(1)	0,0490(1)	-0,0162(1)	0,0090(3)
8754,93163	1 1 0 2 1 1	0,0891(4)	-0,0137(2)	0,0038(1)	0,0994(4)	-0,0031(1)	0,0142(4)
8730,12995	2 1 1 3 1 2	0,0867(4)	-0,0124(1)	0,0064(2)	0,1103(4)	-0,0013(1)	0,0226(5)
8680,25840	4 1 3 5 1 4	0,0743(5)	-0,0135(2)	0,0051(2)	0,1038(5)	-0,0079(1)	0,0212(5)
8658,07834	5 1 4 6 1 5	0,0673(4)	-0,0148(2)	0,0042(1)	0,0969(5)	-0,0104(2)	0,0124(4)
8636,75707	6 1 5 7 1 6	0,0607(4)	-0,0156(1)	0,0062(2)	0,0921(4)	-0,0142(2)	0,0183(4)

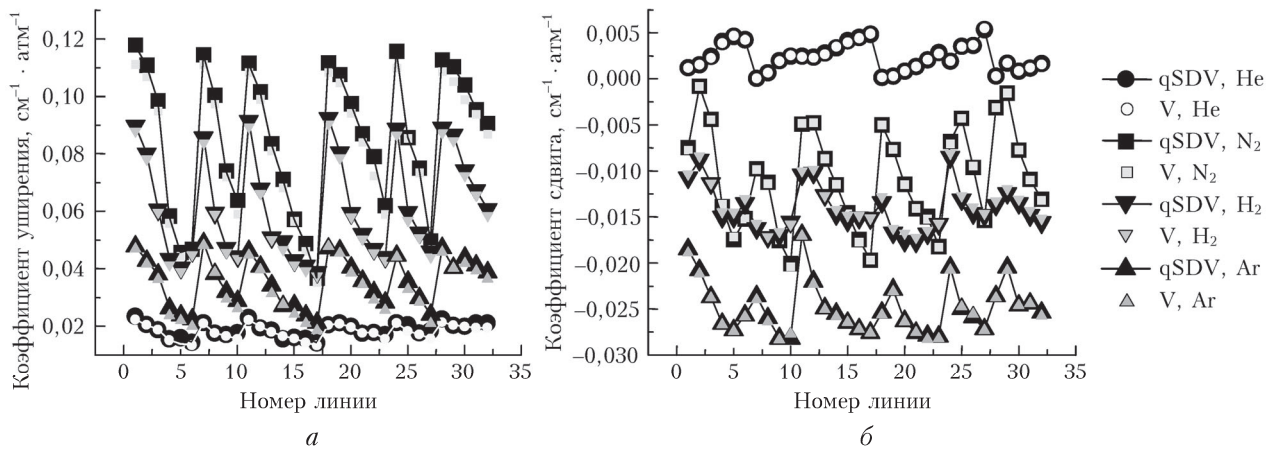


Рис. 2. Сравнение коэффициентов уширения (*a*) и сдвига (*b*) линий поглощения молекулы воды разными буферными газами, полученных при аппроксимации qSDV- и V-контурами (номер линии соответствует нумерации спектральных линий в табл. 2)

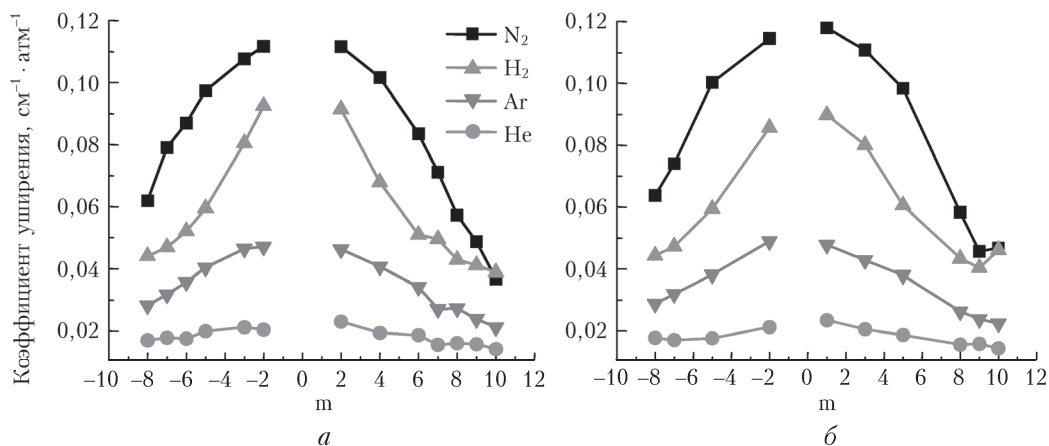


Рис. 3. Зависимость коэффициентов уширения линий поглощения молекулы воды давлением буферного газа (азот, водород, аргон, гелий) от вращательного квантового числа m для подветвей: $(J\ 0\ J) \leftrightarrow (J \pm 1\ 0\ J \pm 1)$ (*a*) и $(J\ 1\ J \pm 1) \leftrightarrow (J \pm 1\ 1\ J \pm 1)$ (*b*) ($m = J'' + 1$ для *R*-ветви и $m = -J''$ для *P*-ветви)

взаимодействиями являются диполь-квадрупольные. Молекула N_2 , по сравнению с H_2 , имеет большее значение квадрупольного момента, что объясняет

большие величины коэффициентов уширения. Поскольку масса молекулы азота больше массы водорода, то для смеси H_2O-N_2 наблюдаются большие

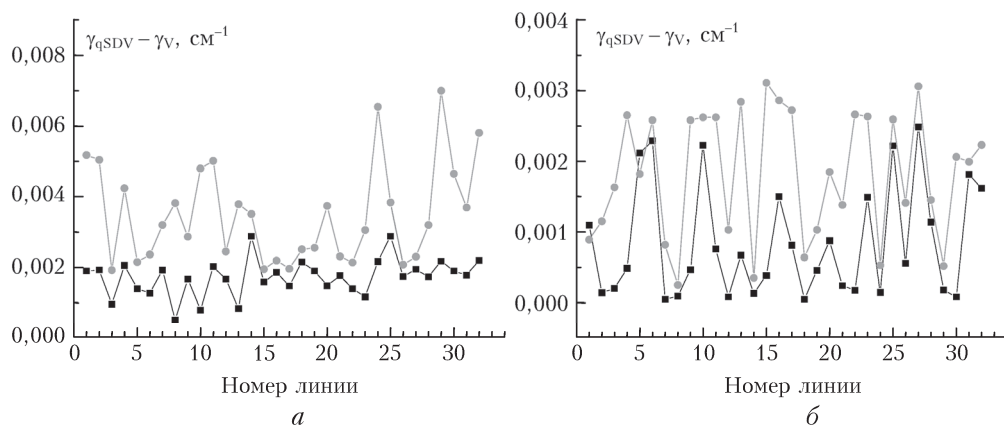


Рис. 4. Сравнение коэффициентов уширения линий поглощения молекулы воды для смесей $\text{H}_2\text{O}-\text{He}$ (—■—) и $\text{H}_2\text{O}-\text{Ar}$ (---●---) (а) и $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2$ (—■—) и $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ (---●---) (б)

значения коэффициентов сужения, обусловленные зависимостью от скорости активной молекулы. Разность между значениями коэффициентов уширения, полученными при аппроксимации qSDV и V-профилями, составляет в среднем 0,0017 и 0,0035 cm^{-1} для водорода и азота.

Проведенный анализ показал, что в спектральной области 8650–9020 cm^{-1} для аппроксимации спектральных линий можно использовать традиционный контур Фойгта в задачах, для которых не требуется высокая точность определения параметров (например, при определении содержания водяного пара в атмосфере планет и т.п.). Это относится в первую очередь к легким уширяющим молекулам, таким как гелий и водород. Если же нужна высокая точность, то необходимы модели контуров, которые, с одной стороны, учитывают, тонкие эффекты, а с другой — достаточно простые для массовых исследований с небольшим числом физически ясных параметров аппроксимации. В наибольшей степени этим условиям для давлений буферного газа выше 300 мбар удовлетворяет контур Фойгта, зависящий от скорости активной молекулы. Данные результаты получены для линий, имеющих полуширины, сравнимые с доплеровской полушириной и больше. Для более узких линий требуется дополнительное исследование.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-45-70001p_a).

- Hartmann J.-M., Boulet C., Robert D. Collisional effects on molecular spectra: Laboratory experiments and models, consequences for application. Amsterdam, Boston: Elsevier Science, 2008. 406 p.
- Lisak D., Cygan A., Bermejo D., Domenech J.L., Hodges J.T., Tran H. Application of the Hartmann–Tran profile to analysis of H_2O spectra // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2015. V. 164. P. 221–233.
- Ngo N.H., Lisak D., Tran H., Hartmann J.-M. An isolated line-shape model to go beyond the Voigt profile in spectroscopic databases and radiative transfer codes // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 129. P. 89–100.

- Tennyson J., Bernath P.F., Campargue A., Csaszar A.G., Daumont L., Gamache R.R., Hodges J.T., Lisak D., Naumenko O.V., Rothman L.S., Tran H., Zobov N.F., Buldyreva J., Boone C.D., De Vizia M.D., Gianfrani L., Hartmann J.-M., McPheat R., Weidmann D., Murray J., Ngo N.H., Polyansky O.N. Recommended isolated-line profile for representing high-resolution spectroscopic transitions (IUPAC Technical Report) // Pure Appl. Chem. 2014. V. 86, N 12. P. 1931–1943.
- Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A., Deichuli V.M., Starikov V.I. Measurements and calculations of Ar-broadening parameters of water vapour transitions in a wide spectral region // Mol. Phys. 2017. V. 115, N 14. P. 1642–1656.
- Laurentieva N.N., Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A. Measurements of N_2 -broadening and shifting parameters of the water vapor spectral lines in the second hexad region // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2010. V. 111, N 15. P. 2291–2297.
- Petrova T.M., Solodov A.M., Starikov V.I., Solodov A.A. Measurements and calculations of He-broadening and -shifting parameters of the water vapor transitions of the $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ band // Mol. Phys. 2012. V. 110, N 14. P. 1493–1503.
- Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A., Deichuli V.M., Starikov V.I. Measurements and calculations of H_2 -broadening and shift parameters of water vapour transitions of the $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ band // Mol. Phys. 2018. V. 116, N 10. P. 1409–1420.
- Kruglova T.M., Щербakov А.П. Автоматический поиск линий в молекулярных спектрах на основе методов непараметрической статистики. Регуляризация в оценке параметров спектральных линий // Оптика и спектроскопия. 2011. Т. 111, № 3. С. 383–386.
- Петрова Т.М., Солодов А.А., Щербakov А.П., Дейчули В.М., Солодов А.А., Пономарев Ю.Н., Чеснокова Т.Ю. Параметры уширения линий поглощения молекулы воды давлением аргона, полученные с помощью различных моделей формы контура // Оптика атмосфер. и океана. 2016. Т. 29, № 10. С. 821–827; Petrova T.M., Solodov A.M., Shcherbakov A.P., Deichuli V.M., Solodov A.A., Ponomarev Yu.N., Chesnokova T.Yu. Parameters of broadening of water molecule absorption lines by argon derived using different line profile models // Atmos. Ocean. Opt. 2017. V. 30, N 2. P. 123–128.

11. Boone C.D. Speed-dependent Voigt profile for water vapor in infrared remote sensing applications // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2007. V. 105. P. 525–532.
12. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Chris Benner D., Bernath P.F., Birk M., Bizzocchi L., Boudon V., Brown L.R., Campargue A., Chance K., Cohen E.A., Coudert L.H., Devi V.M., Drouin B.J., Fayt A., Flaud J.-M., Gamache R.R., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Hill C., Hodges J.T., Jacquemart D., Jolly A., Lamouroux J., Le Roy R.J., Li G., Long D.A., Lyulin O.M., Mackie C.J., Massie S.T., Mikhailenko S., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Orphal J., Perevalov V., Perrin A., Polovtseva E.R., Richard C., Smith M.A.H., Starikova E., Sung K., Tashkun S., Tennyson J., Toon G.C., Tyuterev V.I.G., Wagner G. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2013. V. 130. P. 4–50.

V.M. Deichuli, T.M. Petrova, Yu.N. Ponomarev, A.M. Solodov, A.A. Solodov. Broadening and shift coefficients of water vapor absorption lines in 8650–9020 cm⁻¹ spectral region.

The broadening and shift coefficients of H₂O absorption lines are compared for Ar, He, H₂, and N₂ buffer gases. The broadening and shift coefficients were derived from the analysis of the absorption spectra recorded with a Fourier spectrometer in the spectral range 8650–9020 cm⁻¹ with a spectral resolution of 0.01 cm⁻¹. Using two models of line profiles (Voigt and speed-dependent Voigt profiles) the parameters of the H₂O absorption lines were calculated. It is shown that the speed-dependent Voigt profile provides better agreement with experimental data.