

Параметры уширения линий поглощения молекулы воды давлением аргона, полученные с помощью различных моделей формы контура

Т.М. Петрова¹, А.М. Солодов¹, А.П. Щербаков¹, В.М. Дейчули^{1,2},
А.А. Солодов¹, Ю.Н. Пономарев¹, Т.Ю. Чеснокова^{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 14.07.2016 г.

В области 6700–7650 см⁻¹ проведены измерения спектра поглощения молекулы воды с использованием буферного газа аргона. Спектр зарегистрирован на Фурье-спектрометре IFS 125HR с высоким отношением сигнал-шум при комнатной температуре со спектральным разрешением 0,01 см⁻¹ в диапазоне изменения давления аргона от 0 до 0,9 атм. С помощью двух моделей формы контура (контур Фойгта и контур Фойгта, зависящий от скорости поглощающей молекулы) получены параметры линий поглощения молекулы воды. Показано, что применение контура Фойгта, зависящего от скорости, дает лучшее согласие с экспериментальными данными.

Ключевые слова: параметры линий поглощения, молекула воды, Фурье-спектрометр, зависящий от скорости контур Фойгта; absorption line parameters, water vapor, Fourier transform spectrometer, speed-dependent Voigt profile.

Введение

В последние годы во многих областях науки большое внимание уделяется получению точной и достоверной информации о параметрах спектральных линий газов. Это стало возможным благодаря стремительному развитию экспериментальной техники, в частности лазерной и Фурье-спектроскопии. Так, современные спектрометры позволяют проводить измерения с феноменальным спектральным разрешением (лучше чем 0,001 см⁻¹) и высоким отношением сигнал-шум (10⁵ и выше). Во многих работах показано, что широко используемый контур Фойгта недостаточно точно описывает реальные контуры линий поглощения, наиболее сильно отличия проявляются вблизи центра и на крыльях спектральных линий (например, [1–4]). Это приводит к ошибкам в определении таких параметров линий, как интенсивность и коэффициенты уширения, которые могут достигать нескольких процентов даже для изолиро-

ванных линий. Таким образом, возникла необходимость использования моделей контуров, учитывающих тонкие эффекты, такие как столкновительное сужение линий Dicke [5, 6], интерференцию линий [7], эффект ветра [8, 9]. Среди наиболее распространенных можно отметить контуры Galatry [10] и Раутиана–Собельмана [9], в которых учитывается эффект Дике – уменьшение доплеровского уширения из-за ограничения свободного движения поглощающих молекул за счет столкновений. Однако область применения данных контуров ограничена диапазоном давлений уширяющего газа, при давлениях более 300 мбар влияние эффекта Дике на параметры линий пренебрежимо мало.

Другой физический механизм, приводящий к сужению спектральных линий, – это так называемый эффект ветра, который обусловлен зависимостью констант столкновительной релаксации от скорости поглощающей активной молекулы. В этом случае лоренцевская полуширина и сдвиг центра линии не являются постоянными, а зависят от скорости поглощающей молекулы. В наиболее распространенных моделях используются квадратичные зависимости от скорости [8, 11], иногда модели с гипергеометрической зависимостью [12]. Одной из моделей, в которой учитывается данный эффект, является зависящий от скорости контур Фойгта (Speed-Depended Voigt (SDV)) [3]. Кроме того, существуют модели,

* Татьяна Михайловна Петрова (tanja@iao.ru); Александр Михайлович Солодов (solodov@asd.iao.ru); Анатолий Петрович Щербаков (tol@asd.iao.ru); Владимир Михайлович Дейчули (dvm91@yandex.ru); Александр Александрович Солодов (solodov@sibmail.com); Юрий Николаевич Пономарев (yuron@iao.ru); Татьяна Юрьевна Чеснокова (ches@iao.ru).

в которых учитываются и эффект Дике, и эффект ветра: зависящие от скорости контуры Раутиана [11] и Галатри [12], модель pCqSDHC (partially-Correlated quadratic-Speed Dependent Hard-Collision – частично коррелированная квадратично-зависящая от скорости модель жестких столкновений) [1, 2].

В работе [13] предложен быстрый алгоритм вычисления контура линий SDV, зависящего от скорости молекул. Этот алгоритм был применен при обработке атмосферных спектров, измеренных спутниковым Фурье-спектрометром ACE-FTS, для анализа спектров H_2O . Использование контура SDV позволило значительно улучшить согласие между измеренными и модельными спектрами и повысить качество определения содержания водяного пара в атмосфере. В настоящее время этот алгоритм достаточно широко применяется в атмосферных приложениях. Например, он включен в последние версии пакета программ SFIT, предназначенного для решения задачи определения содержания атмосферных газов из измерений наземной сети Фурье-спектрометров NDACC [14]. В спектроскопических базах данных содержится мало информации по параметрам линий поглощения H_2O для контуров линий, зависящих от скорости буферной молекулы. Поэтому исследование контура SDV и определение его параметров из лабораторных спектров в различных условиях будут полезными для более точного моделирования атмосферных спектров в задачах газоанализа.

В настоящей статье представлен анализ значений коэффициентов уширения и сдвига линий поглощения H_2O , полученных из двух наборов спектров, зарегистрированных с различным отношением сигнала к шуму, при аппроксимации двумя различными контурами – с помощью обычного контура Фойгта и контура Фойгта, зависящего от скорости. В качестве буферного газа использовался аргон, поскольку для данного газа соотношение масс молекул буферного газа и активных молекул составляет примерно 2,2 – и данный эффект будет хорошо проявляться.

Эксперимент

Измерения спектров поглощения молекулы воды, уширенных давлением аргона, были выполнены в диапазоне $6700\text{--}7650\text{ см}^{-1}$ с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR. В качестве излучателя в спектрометре использовался вольфрамовый источник света, регистрация излучения осуществлялась с помощью InSb-детектора, охлаждаемого жидким азотом. Многоходовая оптическая кювета Thermo Electron с базой 20 см, позволяющая получить длину оптического пути до 10 м, размещалась внутри кюветного отделения спектрометра. Давление буферного газа варьировалось от 0 до 0,9 атм. Измерение давления $\text{H}_2\text{O}\text{--Ar}$ -смесей внутри кюветы производилось с помощью датчика давления DVR5, обладающего погрешностью измерения 1%. Для улучшения отношения сигнал-шум (S/N) использовался оптический фильтр, который имел максимальное

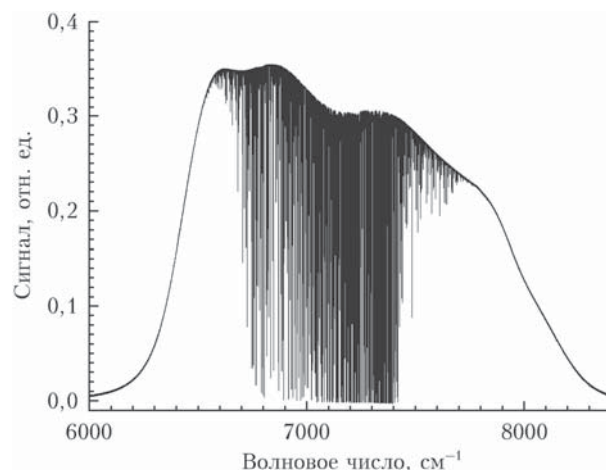


Рис. 1. Обзорный спектр пропускания H_2O в области $6000\text{--}8400\text{ см}^{-1}$ при давлении паров воды $0,00873\text{ атм}$ и аргона $0,503\text{ атм}$

пропускание в области 7000 см^{-1} . Для ряда линий отношение S/N достигало 20000. Для того чтобы иметь возможность проанализировать линии с разным отношением S/N, для каждого давления буферного газа регистрировались два спектра с разным количеством сканирований: для одного спектра усреднение проводилось по 200 сканированиям (первый набор данных), для другого – по 4000 (второй набор данных). Все записи спектров поглощения были выполнены при комнатной температуре (296 К) со спектральным разрешением $0,01\text{ см}^{-1}$ и при оптической длине пути луча в кювете 10 м. Более подробно описание экспериментальной установки и методики проведения эксперимента представлено в работах [15–17]. Обзорный спектр пропускания молекулы воды приведен на рис. 1.

Обсуждение результатов

Для анализа спектров поглощения использовалась программа, позволяющая получать параметры линий с помощью их одновременной подгонки к нескольким спектрам, зарегистрированным при разных условиях. Определяются такие параметры спектральных линий, как положение центра линий, их интенсивности, коэффициенты уширения и сдвига. Данная программа способна производить автоматический поиск пиков линий, разбиение их на группы для одновременной подгонки параметров линий, находящихся под общим контуром. Автоматический поиск пиков построен на методах теории распознавания образов [18, 19] и представляет собой распознающую систему, обучаемую на примерах и ответах «учителя». В качестве примеров используются указываемые «учителем» точки спектра, причем он задает – является данная точка пиком линии или нет. Такой подход позволяет настроить систему на поиск не только явных максимумов или минимумов, но и слабых линий, наблюдаемых на крыльях более сильных. Обучение программы производится один раз после ее установки, но при последующей работе систему можно дополнительно обучать,

исходя из особенностей спектра в конкретной задаче. Подробное описание работы программы, используемых подходов и методов представлено в работах [20–22].

В предыдущей версии данной программы для аппроксимации экспериментальных данных использовался фойгтовский контур (V). В новой версии программы добавлен зависящий от скорости контур Фойгта (SDV), в котором учитывается квадратичная зависимость коэффициентов уширения от скорости активной молекулы. Для этого был использован достаточно простой алгоритм, приведенный в работе [13]. Кроме традиционно используемых параметров спектральной линии (положение центра, интенсивность и полуширина) дополнительно используются еще два — параметры сужения и асимметрии.

Для анализа нами были выбраны 12 линий поглощения, для которых отношение сигнал-шум менялось в широких пределах — от 30 до 16300. Для расчетов использовались два контура — обычный контур Фойгта (V) и зависящий от скорости (SDV) при фиксированной доплеровской полуширине. В табл. 1 представлены параметры линий поглощения молекулы воды — их интенсивности, коэффициенты уширения, сдвига и сужения. Данные получены из спектров,

усредненных по 4000 сканирований для каждого давления буферного газа, причем при определении параметров рассматривались не только анализируемые спектральные линии, но и все близкорасположенные с ними, включая линии, имеющие намного меньшую интенсивность.

В среднем для давления паров воды 0,00873 атм значения отношений лоренцевской (ударной) полуширины к доплеровской γ/γ_{Dop} менялись от 1,41 до 3,55 при изменении давления аргона от 0,273 до 0,9 атм. Интенсивность линий варьировалась от $1,3 \cdot 10^{-4}$ до $2,1 \cdot 10^{-2} \text{ см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$. Для обоих наборов данных значения интенсивностей линий поглощения молекулы воды и их коэффициентов уширения, полученные с помощью V-профилей, оказались меньше соответствующих величин, полученных с использованием SDV-контуров: коэффициенты уширения на 6%, интенсивности на 3% (табл. 2, 3). В то время как значения коэффициентов уширения, полученные с помощью различных моделей, достаточно близки.

На рис. 2 представлены примеры аппроксимации для одной из исследуемых линий поглощения молекулы воды при разных давлениях буферного газа. Видно, что точность аппроксимации V-контуром значительно хуже, особенно это проявляется

Таблица 1

Параметры линий поглощения, полученные при обработке SDV-профилем (усреднение по 4000 сканирований)

ν , см^{-1} HITRAN	V	$J' K_a' K_c'$	$J'' K_a'' K_c''$	$I \cdot 10^{-3}$, $\text{см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$	γ , $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$	δ , $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$	β , $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$
6726,24882	0 2 1	6 0 6	7 0 7	7,16(2)	0,0287(1)	-0,0213(1)	0,00850(10)
6731,44505	0 2 1	6 3 3	7 3 4	1,99(2)	0,0335(1)	-0,0161(1)	0,00689(15)
6755,02085	0 2 1	4 1 3	5 1 4	13,38(3)	0,0386(1)	-0,0177(1)	0,00734(10)
6761,45207	0 2 1	5 3 2	6 3 3	1,24(1)	0,0321(1)	-0,0158(1)	0,00647(20)
6790,64896	0 2 1	4 3 1	5 3 2	5,55(2)	0,0303(1)	-0,0156(1)	0,00756(16)
6791,88741	0 2 1	3 1 3	4 1 4	22,58(3)	0,0427(1)	-0,0179(1)	0,00958(11)
6949,70384	1 2 0	10 3 8	11 0 11	0,14(1)	0,0210(2)	-0,0183(2)	0,00667(28)
6956,31484	0 2 1	3 1 2	2 1 1	9,45(2)	0,0391(1)	-0,0199(1)	0,00733(16)
6958,77665	2 0 0	4 3 1	5 4 2	2,58(1)	0,0321(1)	-0,0224(1)	0,00684(21)
6963,16829	0 2 1	3 2 2	2 2 1	16,23(2)	0,0390(1)	-0,0157(1)	0,00818(15)
7172,69909	2 0 0	3 3 0	4 2 3	8,12(2)	0,0419(1)	-0,0122(1)	0,00748(11)
7178,44584	1 0 1	6 2 5	6 2 4	3,54(1)	0,0395(1)	-0,0200(1)	0,00665(18)

Примечание. V — квантовые числа верхнего колебательного состояния; $J' K_a' K_c'$ и $J'' K_a'' K_c''$ — квантовые числа верхнего и нижнего вращательных состояний соответственно; I — интенсивность; γ — коэффициент уширения; δ — коэффициент сдвига; β — коэффициент сужения. В скобках указаны ошибки, определенные из расчета, в единицах последней цифры.

Таблица 2

Сравнение параметров линий поглощения молекулы воды, полученных с помощью различных модельных контуров (усреднение по 4000 сканирований)

ν , см^{-1}	I_{SDV}/I_V	γ_{SDV}/γ_V	S/N	QF_{SDV}	QF_V	$\Gamma_{SDV}/\Gamma_{Dop}$
1	2	3	4	5	6	7
6726,24882	1,039	1,108	6680	980	290	1,17
6731,44505	1,025	1,054	1590	1070	260	1,39
6755,02085	1,020	1,043	10090	1180	250	1,39
6761,45207	1,033	1,047	1000	740	260	1,33
6790,64896	1,028	1,070	4820	930	170	1,25

1	2	3	4	5	6	7
6791,88741	1,033	1,065	16350	810	180	1,61
6949,70384	1,052	1,133	182	182	102	1,61
6956,31484	6700	1,041	6810	1090	255	1,48
6958,77665	1,025	1,056	2180	1270	202	1,13
6963,16829	1,026	1,056	11800	1220	225	1,53
7172,69909	1,017	1,037	5730	830	260	1,50
7178,44584	1,019	1,035	2550	280	1090	1,49

Примечание. Значения S/N и среднеквадратичные отклонения $\Gamma_{SDV}/\Gamma_{Dop}$ (QF) получены для давления аргона 0,273 атм.

Таблица 3

**Сравнение параметров линий поглощения молекулы воды,
полученных с помощью различных модельных контуров
(усреднение по 200 сканированиям)**

ν , cm^{-1}	I_{SDV}/I_V	γ_{SDV}/γ_V	S/N	QF_{SDV}	QF_V
6726,24882	1,040	1,108	1130	520	160
6731,44505	1,028	1,055	270	240	180
6755,02085	1,019	1,043	1700	1160	286
6761,45207	1,025	1,035	170	169	140
6790,64896	1,031	1,072	815	580	240
6791,88741	1,036	1,083	2770	840	276
6949,70384	1,045	1,121	30	30	29
6956,31484	1,025	1,049	1153	800	335
6958,77665	1,020	1,043	370	311	230
6963,16829	1,023	1,053	2000	700	410
7172,69909	1,016	1,035	970	570	300
7178,44584	1,018	1,035	430	330	230

для низких давлений аргона. При давлениях менее 0,503 атм для V-профиля разность между экспериментальными и рассчитанными спектрами имеет явный W-образный вид.

Качество подгонки можно оценить по величине среднеквадратичного отклонения. В работах [2, 23] было предложено использовать параметр, связанный со среднеквадратичным отклонением:

$$QF = (K_{\max} - K_{\min})/\sigma_r,$$

где K_{\max} и K_{\min} — максимальное и минимальное значения поглощения на линии; σ_r — среднеквадратичное отклонение. В идеальном случае, когда рассчитанный контур восстанавливает спектр с экспериментальной погрешностью, величина QF должна быть близкой к значению S/N . Также в работе [2] на основе моделирования спектральных линий было показано, что при анализе линий поглощения с помощью различных контуров большую роль играют значения отношения сигнал-шум и соотношение между лоренцевской и доплеровской полуширинами.

Для каждой спектральной линии нами были определены значения S/N и QF (см. табл. 2 и 3). Рис. 3 и 4 иллюстрируют основные полученные результаты, на них представлены зависимости отношения $K = QF/(S/N)$ от S/N для одних и тех же линий поглощения молекулы воды, но при разных давлениях буферного газа. При давлении аргона 0,273 атм (рис. 3), когда полуширины отличаются

от доплеровской в среднем в 1,4 раза, среднеквадратичное отклонение при расчете с помощью SDV-профиля в среднем в 5 раз меньше, чем в случае, когда используется V-контур. Для спектральных линий со значениями S/N меньше 2000 применение SDV-профиля дает хороший результат: величина QF отличается от значения отношения сигнал-шум менее чем в 2 раза. Однако при отношении S/N более 3000 SDV-профиль не обеспечивает нулевой разности (т.е., разности на уровне шума), а имеет четко выраженную структуру. Это говорит о том, что и модель SDV не отражает полностью механизма формирования контура.

Увеличение давления аргона вызывает увеличение полуширин линий поглощения молекулы воды, что, в свою очередь, приводит к увеличению значений QF и уменьшению K (см. рис. 4). Уже для отношения S/N 10000 величина параметра K составляет примерно 0,4.

В широко используемых базах данных HITRAN [24] для молекулы воды содержатся значения положений центров линий поглощения, их интенсивностей, параметров уширения собственным давлением и давлением воздуха. На рис. 5 представлено сравнение значений интенсивностей линий поглощения из базы данных HITRAN и полученных в данной статье. В случае, когда для аппроксимации использовался контур Фойгта, зависящий от скорости, отношение интенсивностей в среднем I/I_{HITRAN} составляло 0,983, в то время как для традиционного

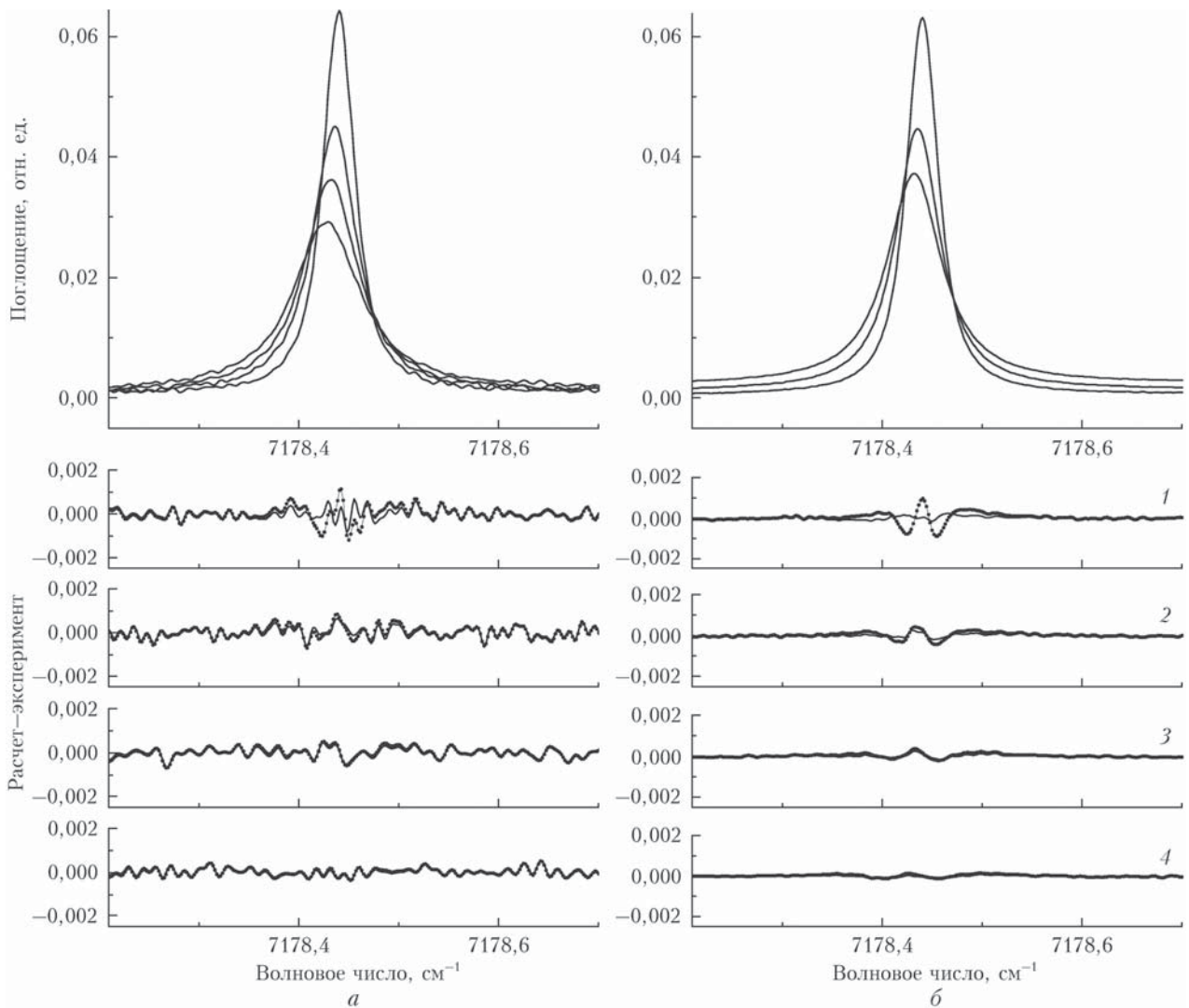


Рис. 2. Пример подгонки линии поглощения молекулы воды с помощью V- (а) и SDV- (б) профилей для двух наборов спектральных данных, зарегистрированных при разных давлениях аргона (1 – 0,273; 2 – 0,503; 3 – 0,680; 4 – 0,9 атм). Сплошной линией показан результат подгонки SDV-контуром, линией с точками – V-контуром; а соответствует спектру, полученному усреднением по 200 интерферограммам, б – по 4000

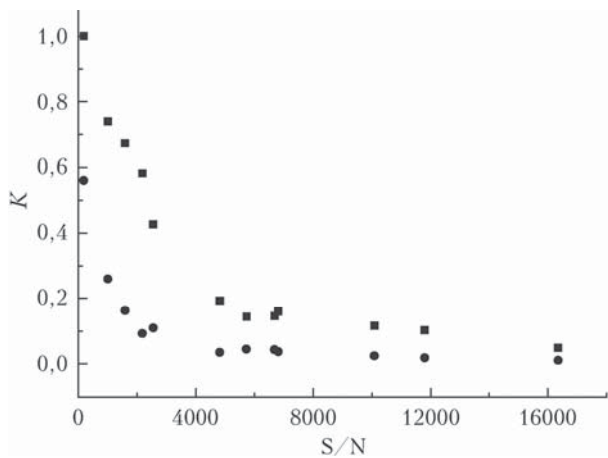


Рис. 3. Зависимость параметра $K = QF/(S/N)$ от величины S/N (давление аргона 0,273 атм). Здесь и на рис. 4 квадратиками обозначены данные, полученные с помощью профиля Фойгта, зависящего от скорости, кружками – обычного контура Фойгта

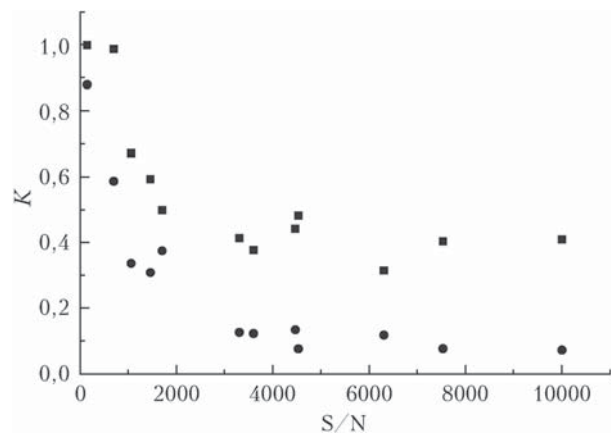


Рис. 4. Зависимость параметра K от величины S/N (давление аргона 0,9 атм)

фойгтовского профиля это отношение равнялось 0,958. Для дополнительной проверки полученных

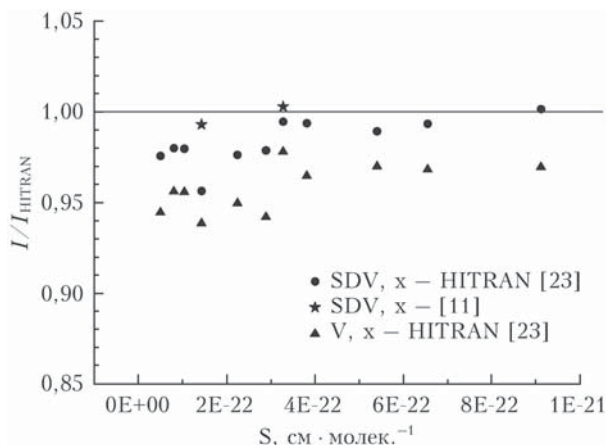


Рис. 5. Сравнение значений интенсивностей линий поглощения молекулы воды, полученных в нашей работе и представленных в базе данных HITRAN

значений интенсивности на рисунке показано сравнение с данными работы [11], в которой с использованием методов лазерной спектроскопии были измерены интенсивности линий поглощения молекулы воды с высокой точностью. Отличие для этих линий не превышает 1%.

Заключение

В данной статье в области $6700\text{--}7650\text{ см}^{-1}$ с высоким отношением сигнал-шум зарегистрированы спектры поглощения молекулы воды, уширенные давлением аргона. Проанализированы параметры линий, полученные с помощью двух различных моделей, — традиционного контура Фойгта и контура Фойгта, зависящего от скорости, причем для определения параметров спектральных линий была использована программа, позволяющая получать параметры линий с помощью их одновременной подгонки к нескольким спектрам. Наилучшее согласие с экспериментальными данными достигается при использовании контура Фойгта, зависящего от скорости. Анализ линий, имеющих разные значения отношений сигнал-шум, показал, что зависящий от скорости контур Фойгта, хотя и в некоторых случаях не обеспечивает должного восстановления экспериментальных профилей, является оптимальным при отношении $S/N < 2000$, будучи достаточно простым контуром с относительно небольшим числом физически ясных параметров подгонки.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы физических наук РАН «Фундаментальная оптическая спектроскопия и ее приложения», проект 3.9.4, и гранта РФФИ № 15-02-06808.

- 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., Császár 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.
- Dicke R.H. The effect of collisions upon the Doppler width of spectral lines // Phys. Rev. 1953. V. 89, N 2. P. 472–474.
- Раутиан С.Г., Собельман И.И. Влияние столкновений на доплеровское уширение спектральных линий // Успехи физ. наук. 1966. Т. 90, № 2. С. 209–236.
- Fano V. Pressure broadening as a prototype of relaxation // Phys. Rev. 1963. V. 131, N 1. P. 259–268.
- Berman P.R. Speed-dependent collisional width and shift parameters in spectral line profiles // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1972. V. 12, N 9. P. 1331–1342.
- Раутиан С.Г. Асимптотический контур спектральной линии при малом доплеровском уширении // Оптика и спектроскопия. 2001. Т. 90, № 1. С. 47–58.
- Galatry L. Simultaneous effect of Doppler and foreign gas broadening on spectral lines // Phys. Rev. 1961. V. 122, N 4. P. 1218–1223.
- Lisak D., Havey D.K., Hodges J.T. Spectroscopic line parameters of water vapor for rotation-vibration transitions near 7800 см^{-1} // Phys. Rev. A. 2009. V. 79. P. 052507-1–052507-10.
- Ciurylo R., Szudy J. Speed-dependent pressure broadening and shift in the soft collision approximation // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1997. V. 57, N 1. P. 41–54.
- Boone C.D. Speed-dependent Voigt profile for water vapor in infrared remote sensing applications // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2007. V. 105, N 3. P. 525–532.
- Network for the Detection of Atmospheric Composition Change (NDACC). URL: <http://www.ndsc.ncep.noaa.gov/>
- Ponomarev Yu.N., Solodov A.A., Solodov A.M., Petrova T.M., Naumenko O.V. FTIR spectrometer with 30 m optical cell and its applications to the sensitive measurements of selective and nonselective absorption spectra // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 177. P. 253–260.
- Пташник И.В., Климешина Т.Е., Петрова Т.М., Солодов А.А., Солодов А.М. Континуальное поглощения водяного пара в полосах 2,7 и 6,25 мкм при пониженных температурах // Оптика атмосф. и океана. 2015. Т. 28, № 9. С. 772–776; Ptashnik I.V., Klimeshina T.E., Petrova T.M., Solodov A.A., Solodov A.M. Water vapor continuum absorption in the 2.7 and 6.25 μm bands at decreased temperatures // Atmos. Ocean. Opt. 2016. V. 29, N 3. P. 211–215.
- Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A., Lyulin O.M., Tashkun S.A., Perevalov V.I. Measurements of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ line parameters in the 8790–8860, 9340–9650 and 11430–11505 cm^{-1} wavenumber regions by means of Fourier transform spectroscopy // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 124. P. 21–27.

18. Айзерман М.А., Браверман Э.И., Розоноэр Л.И. Метод потенциальных функций в теории обучения машин. М.: Наука, 1970. 384 с.
19. Левин Л.Л. Введение в теорию распознавания образов: учеб. пособие. Томск: ТГУ, 2008. 97 с.
20. Щербаков А.П. Применение методов теории распознавания образов для идентификации линий в колебательно-вращательных спектрах // Оптика атмосфер. и океана. 1997. Т. 10, № 8. С. 947–958.
21. Быков А.Д., Науменко О.В., Пшеничников А.М., Синица Л.Н., Щербаков А.П. Экспертная система для идентификации линий в колебательно-вращательных спектрах // Оптика и спектроскопия. 2003. Т. 94, № 4. С. 528–537.
22. Круглова Т.М., Щербаков 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.
23. Cygan A., Lisak D., Wojtevicz W., Domyslawska J., Hodges J.T., Trawinski R.S., Ciurylo R. High-signal-to-noise-ratio laser technique for accurate measurements of spectral line parameters // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. P. 022508 (11 p.).
24. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov I.E., Barbe A., Benner C.D., Bernath P.F., Birk M., Bizzocchi L., Boudon V., Brown L.R., Campargue A., Chance K., Cohen E.A., Couderc E.A., 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 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 HITRAN 2012 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 130. P. 4–50.

T.M. Petrova, A.M. Solodov, A.P. Shcherbakov, V.M. Deichuli, A.A. Solodov, Yu.N. Ponomarev, T.Yu. Chesnokova. **Parameters of broadening of water molecule absorption lines by argon pressure using different profile models.**

The absorption spectra of water vapor perturbed by Ar pressure have been investigated in the wavenumber range 6700–7650 cm⁻¹. Room temperature spectra of water vapor have been measured by the Bruker IFS 125HR Fourier transform spectrometer with a high signal-to-noise ratio in a wide range of pressure of argon with a spectral resolution of 0.01 cm⁻¹. The fittings with Voigt and speed-dependent Voigt profiles were performed to retrieve the H₂O spectral lines parameters. It was shown that the use of the speed-dependent Voigt profile gives the best agreement with experimental data.