

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 535.14; 535.342: 539.196

Континуальное поглощение водяным паром при уширении азотом в крыльях ИК-полос H_2O **О.Б. Родимова, Т.Е. Климешина****Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 8.11.2020 г.

Поглощение H_2O при уширении азотом в ИК-диапазоне рассматривается в рамках асимптотической теории крыльев линий, представляющей поглощение как сумму коэффициентов поглощения отдельными линиями со специальным контуром на далеких расстояниях от центров линий. Параметры контура, относящиеся к классическому и квантовому потенциалам взаимодействия H_2O-N_2 , находятся подгонкой к экспериментальным данным по поглощению в интервале $4200-5000\text{ см}^{-1}$ и по температурной зависимости второго вириального коэффициента. Полученный контур используется для расчета континуального поглощения в диапазоне $1000-10000\text{ см}^{-1}$.

Ключевые слова: континуальное поглощение H_2O , уширение азотом, крылья спектральных линий, второй вириальный коэффициент; water vapor continuum, water-nitrogen continuum absorption, spectral line wings, second virial coefficient.

Введение

Хорошо известно, что континуальное поглощение водяным паром в атмосфере представляет собой сумму двух компонент: одна обусловлена столкновениями молекул воды между собой (self-continuum, устаревшее название – «континуум-самоуширение»), другая – столкновениями молекул воды со сторонними газами (foreign-continuum или «континуум уширения сторонними газами»), в атмосфере Земли это в основном N_2 (см., например, [1–3]).

Континуальное поглощение водяным паром является предметом экспериментальных и теоретических исследований в течение длительного времени. Обсуждение его природы продолжается сейчас достаточно активно из-за появления новых экспериментальных данных. В последние годы большое внимание уделялось рассмотрению континуального поглощения водяным паром в ИК-диапазоне при самоуширении [1–8]. Количество измерений и расчетов продолжает расти, что позволяет определять недоступные ранее детали его спектрального и температурного поведения. При наличии стороннего газа компонента foreign-continuum получается вычитанием из полного континуального поглощения компоненты self-continuum, характеристики которой известны из измерений в чистом водяном паре.

Современные измерения континуального поглощения водяным паром при уширении сторонним газом сравнительно немногочисленны. В таблице приведены сведения об основных публикациях, посвященных континуальному поглощению водяного пара

в стороннем газе (см. также [3]). Следует, однако, отметить, что благодаря развитию техники эксперимента обнаружилось неожиданное расхождение результатов измерений континуального поглощения чистым водяным паром в окнах прозрачности в ИК-области спектра, полученных с помощью Фурье-спектрометров (см. [1] и ссылки в нем) и методов спектроскопии внутрирезонаторного затухания (CRDS) [4, 5], причем данные измерений на Фурье-спектрометрах могут превышать данные CRDS-измерений более чем на порядок величины. Соответствующая неопределенность возникает и в определении foreign-continuum. Напомним, что без знания этой компоненты континуального поглощения невозможны атмосферные приложения.

Описание измерений континуума водяного пара при уширении азотом в дальнем ИК-диапазоне

Год	Публикация	Область спектра, см^{-1}	Буферный газ	Температура, К	Рисунок (таблица) в публикации
1980	Burch, Gryvnak [10]	1300–2200	N_2	308; 353; 428	рис. 9
1984	Burch, Alt [12]	2500–2800	N_2	296	табл. 2
1985	Burch [15]	3000–4200	N_2	296	рис. 5, а, б, табл. 2
2011	Baranov [16]	2000–3250	N_2	326–363	табл. 2
2012	Ptashnik et al. [17]	2010–8940	воздух	402	табл. 3
2015	Mondelain et al. [14]	4248–4257	N_2	297	табл. 2
2019	Vasilchenko et al. [13]	4435–4999	N_2	297	рис. 8

Недавно в [9] в рамках асимптотической теории крыльев линий был предложен контур линий

* Ольга Борисовна Родимова (rod@iao.ru); Татьяна Еремеевна Климешина (kte@iao.ru).

воды, который использовался для расчета континуального поглощения водяным паром при самоуширении в диапазоне $2000\text{--}10000\text{ см}^{-1}$. Результаты расчета показали хорошее согласие с измерениями Берча [10–12] в области $2400\text{--}2700\text{ см}^{-1}$ при температурах $296\text{--}428\text{ К}$ и с измерениями CRDS и OF-CEAS в других окнах ИК-диапазона в спектре H_2O [4, 5, 13, 14].

В настоящей работе предпринята попытка описать континуальное поглощение водяным паром при уширении сторонним газом в ряде окон ИК-диапазона с помощью одного контура.

1. Контур спектральной линии на больших расстояниях от ее центра

При расчете коэффициента поглощения как суммы коэффициентов поглощения, обусловленных отдельными линиями, становится очевидным, что контур линии, лоренцевский вблизи центра линии, должен значительно отличаться от него на больших расстояниях от центра [18, 19]. Существует два достаточно строгих подхода к описанию контура при больших смещенных частотах: квазистатистический (см. [20] и ссылки в нем) и асимптотический [21, 22]. В [9] и в настоящей работе мы следуем асимптотической теории крыльев линий (АТКЛ).

Выражение для коэффициента поглощения в АТКЛ содержит в качестве параметров классический и квантовый потенциалы межмолекулярного взаимодействия. Параметры классического потенциала Леннарда-Джонса, описывающего движение центров масс сталкивающихся молекул, выбирались нами таким образом, чтобы воспроизвести температурную зависимость вторых вириальных коэффициентов. Параметры квантового потенциала, за неимением пока соответствующих данных, оценивались в результате подгонки, исходя из согласия с данными экспериментов по измерению континуального поглощения. В расчетах поглощения H_2O при самоуширении в области $3\text{--}5\text{ мкм}$ [23] в качестве референтных были использованы данные измерений Берча [12], которые существенно расходятся с результатами более поздних Фурье-измерений. Оказалось, однако, что расчеты [9] с полученным в [23] контуром, уточненным в области близких крыльев, хорошо согласуются с результатами CRDS-измерений в других окнах ИК-диапазона спектра водяного пара вплоть до 10000 см^{-1} . Хотелось бы получить описание поглощения H_2O при уширении азотом в окнах спектра H_2O в ИК-диапазоне также с помощью одного контура. К сожалению, для поглощения водяным паром при уширении азотом в окне $3\text{--}5\text{ мкм}$ у Берча есть только оценочные данные [15], и в дальнейшем появилось не так много данных лабораторных измерений (см. таблицу). Мы ориентировались на результаты CRDS-измерений [13] в окне $4000\text{--}5000\text{ см}^{-1}$.

Мы получили параметры классического потенциала Леннарда-Джонса, зависящие от температуры,

используя экспериментальные данные по температурной зависимости второго вириального коэффициента $B(T)$, приведенные в [24]. При $T = 296\text{ К}$ эти параметры имеют следующие значения: $\epsilon = 150\text{ см}^{-1}$, $\sigma = 3,2 \cdot 10^{-8}\text{ см}^{-1}$. При температурах выше 296 К они практически не меняются, а ниже 296 К могут возрасти. Определеннее сказать трудно из-за большого разброса данных и их большой неточности. Отметим, что в [24] произведен полный квантово-механический расчет потенциальной поверхности $\text{H}_2\text{O}\text{--}\text{N}_2$, чтобы установить характеристики равновесной конфигурации соответствующего комплекса. Оказалось, что глобальный минимум появляется при геометрии, в которой молекула N_2 почти коллинеарна ОН-связи, располагаясь на ее продолжении. Энергия связи была оценена в 441 см^{-1} . Полученный потенциал был также использован в [24] для расчета $B(T)$. Эти результаты иллюстрирует черная кривая на рис. 1.

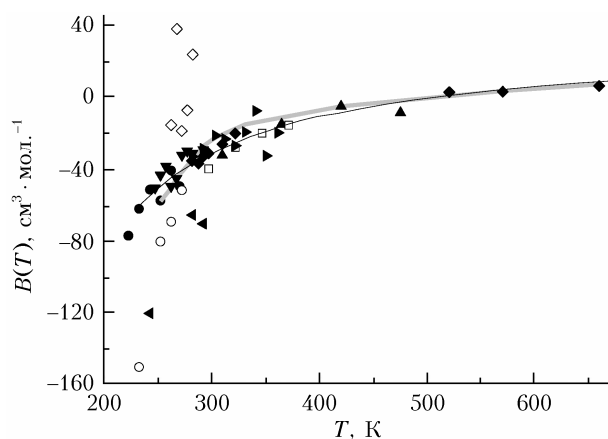


Рис. 1. Второй вириальный коэффициент $\text{H}_2\text{O}\text{--}\text{N}_2$: серая кривая — наш расчет; черная кривая — расчет с поверхностью потенциальной энергии, полученной в [24] посредством достаточно точного квантово-механического расчета; остальные точки — результаты измерений, приведенные в [24]

Выражение для контура линии, используемое в АТКЛ, имеет вид

$$\begin{aligned} \kappa_{a_n}^W(\omega) &= D_{a_j} \frac{1}{|\omega - \omega_j|^{1+3/a_n}} \frac{1}{r_{a_n}} \int_0^{r_{a_n}} \frac{e^{-V(r,T)/kT}}{\sqrt{r_{a_n}^2 - r^2}} r dr = \\ &= D_{a_n} \frac{1}{|\omega - \omega_j|^{1+3/a_n}} F(r_{a_n}), \end{aligned} \quad (1)$$

где

$$r_{a_n} = \frac{C_{a_n}}{|\omega - \omega_j|^{1/a_n}}. \quad (2)$$

Параметры a_n , C_{a_n} , D_{a_n} аппроксимируют разности квантовых потенциалов взаимодействия молекул, находящихся в разных колебательных состояниях, одночленами (2) с обратной зависимостью от расстояния.

2. Континуальное поглощение в окнах ИК-спектра водяного пара при уширении азотом

Параметры квантового потенциала в расчете по АТКЛ определялись на основе подгонки контура (1) к данным о континуальном поглощении, полученным из CRDS-измерений [13, 14] в окне 4000–5000 см^{-1} . Согласно принятому сейчас в литературе определению (введенному авторами модели СКД [19]), величина континуального поглощения определяется путем вычитания из полного измеренного поглощения так называемой величины локального вклада линий, т.е. того поглощения, которое обусловлено центральными частями спектральных линий, присутствующих в исследуемом интервале, без некоторого постоянного «плинтуса», равного значению лоренцевского коэффициента поглощения на границе области локального вклада, равной 25 см^{-1} , считая от центра линии. Мы добавили к экспериментальному континуальному поглощению локальный вклад лоренцевских линий в пределах 25 см^{-1} , получив таким образом полное «экспериментальное» поглощение (звезды на рис. 2), и осуществили подгонку параметров классического потенциала АТКЛ. В результате были получены следующие значения (параметры с индексом 1, относящиеся к меньшим смещенным частотам, будут введены ниже):

$$\begin{aligned} a_2 &= 11,0; & C_{a_2} &= 5,55016; & D_{a_2} &= 0,005; \\ a_3 &= 13,0; & C_{a_3} &= 5,55016; & D_{a_3} &= 0,00045. \end{aligned} \quad (3)$$

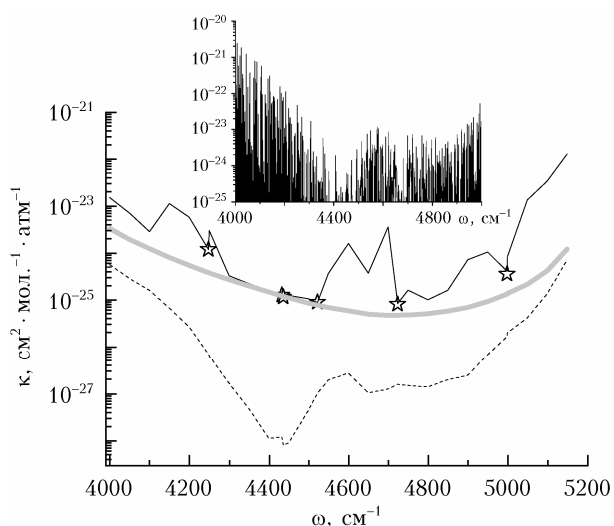


Рис. 2. Коэффициент континуального поглощения спектра водяного пара в окне 4000–5000 см^{-1} при уширении азотом: пунктирная кривая — континуум, отвечающий сумме «плинтусов»; звездочки — континуум из экспериментов [13, 14] с добавлением локального вклада линий в пределах 25 см^{-1} ; черная кривая — расчет с контуром (1)–(3) полного коэффициента поглощения; полужирная серая кривая — расчет континуального поглощения с контуром (1)–(3) при $T = 296$ К, шаг по частоте 50 см^{-1} ; на врезке изображены линии H_2O (HITRAN2004) в данном интервале

Расчетное континуальное поглощение, полученное согласно приведенному выше определению, показано на рис. 2 серой кривой. На рис. 3 продемонстрировано применение полученного контура к поглощению в окне 2000–3100 см^{-1} . На нем показано сравнение расчета с данными измерений [16, 17] при разных температурах.

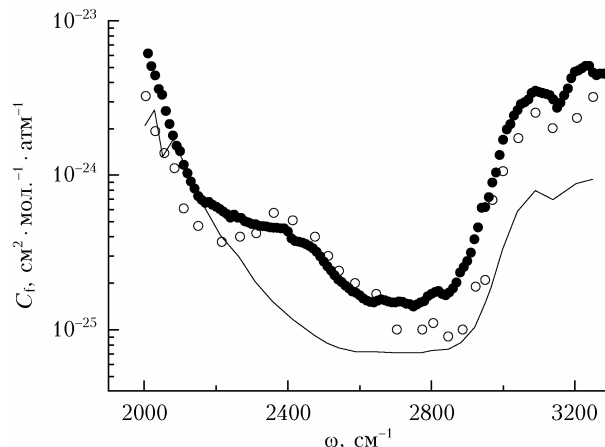


Рис. 3. Коэффициент континуального поглощения спектра водяного пара в окне 2000–3100 см^{-1} при уширении азотом: белые кружки — эксперимент [16] при $T = 326$ К; черные кружки — эксперимент [17] при $T = 402$ К; кривая — расчет по АТКЛ (1) при $T = 296$ К на основе параметров (3), полученных при подгонке данных в окне 4000–5000 см^{-1} (см. рис. 2)

Как отмечено, в частности, в [16], поглощение H_2O , уширенного азотом, практически не зависит от температуры. Отметим также, что максимум около 2400 см^{-1} обусловлен индуцированным поглощением [25], которое не учитывалось в настоящем расчете.

3. Континуальное поглощение в пределах полос водяного пара при уширении азотом

Следует отметить, что приведенное выше определение континуального поглощения, применяемое сейчас к самым разным газам и их смесям (см., например, случай $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ [13, 14, 17] или CO_2-CO_2 [26, 27]), при фиксированной границе локального вклада 25 см^{-1} постулирует лоренцевскую форму контура вплоть до 25 см^{-1} , не позволяя ставить вопрос о форме контура внутри этих пределов. Здесь уместно вспомнить измерения поглощения $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ и CO_2 в работах Берча, например [15, 18]. В этих работах, исследующих континуальное поглощение, при обработке данных эксперимента убиралось поглощение линиями в пределах ± 1 см^{-1} от исследуемой точки, что и позволило делать предположение о форме контура на расстояниях нескольких см^{-1} от центра линии. Отметим, что полученное таким образом поглощение может быть обусловлено различными парными взаимодействиями молекулы воды с партнерами из ее окружения, приводящими в том числе и к образованию димеров. То же самое относится и к современным определениям континуума

водяного пара. Поэтому результирующий контур линии следует считать некоторым эффективным контуром линии, форма которого связана с межмолекулярными взаимодействиями, и это будет подразумеваться в дальнейшем (собственно, то же самое можно сказать и о лоренцевском контуре, полуширина которого также связана с межмолекулярными взаимодействиями).

Итак, измерения Берча в [15] были проведены с целью исследования поведения контура линий H_2O на небольших расстояниях от центра линии, которое становится особенно важным в пределах полос поглощения. Как в случае самоуширения, так и при уширении азотом определенный в [15] контур оказывался выше лоренцевского. При уширении азотом это превышение невелико и имеет место на расстояниях $1,0\text{--}10\text{ см}^{-1}$ от центра линии. Измерения поглощения H_2O при уширении азотом в [15] были проведены в области полосы $3400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ (рис. 4).

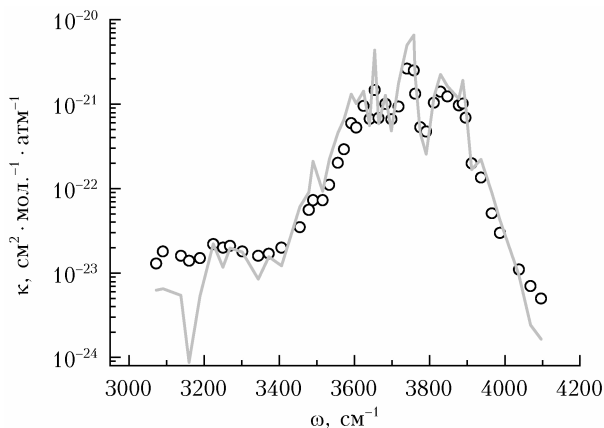


Рис. 4. Коэффициент поглощения H_2O при уширении азотом в пределах полосы $3000\text{--}4200\text{ см}^{-1}$: кружки — измерения [15], скорректированные таким образом, чтобы исключить влияние аппаратной функции (табл. 2 в [15]); серая кривая — расчет с контуром АТКЛ (3), (4) с исключением вклада линий в пределах $1,0\text{ см}^{-1}$ от точки измерения (без «плинтусов»)

Чтобы описать поведение контура на малых расстояниях от центров линий, мы добавили к одночлену (3) еще один одночлен и получили в результате подгонки к значениям поглощения [15] следующие значения его параметров:

$$a_1 = 2,8; C_{a_1} = 8,0; D_{a_1} = 0,7. \quad (4)$$

Одночлены переходят один в другой по мере увеличения расстояния от центра линии, что видно на рис. 5, а, где результирующий контур (черная полужирная кривая) идет сначала по $\kappa_{2,8}$, затем по κ_{11} и, наконец, по κ_{13} вплоть до границы обрывания контура 2000 см^{-1} .

Поведение эффективного контура (1) с параметрами (3), (4) на близких расстояниях от центра, показанное на рис. 5, б, аналогично полученному Берчем. Результаты расчета с контуром (3), (4) в области $3000\text{--}4200\text{ см}^{-1}$ приведены на рис. 4. Расчет проводился на частотах измерений и, как в [15], не учитывалось поглощение линиями на расстояни-

ях $\Delta\omega = 1\text{ см}^{-1}$ от точки измерения. В целом совпадение расчетных и экспериментальных данных можно считать удовлетворительным.

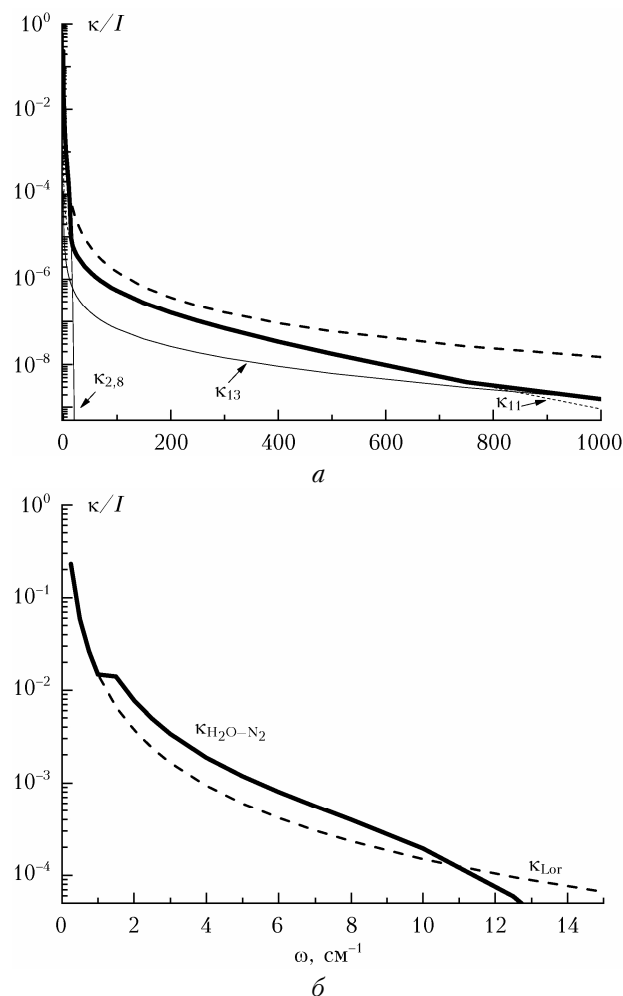


Рис. 5. Контур спектральной линии H_2O при уширении азотом, полученный в АТКЛ с параметрами (3), (4): пунктирная линия — лоренцевский контур; $\kappa_{2,8}$, κ_{11} , κ_{13} — части контура, описываемые соответствующими одночленами; черная полужирная кривая — результирующий контур; (а) и (б) относятся к разным расстояниям от центра линии

Следует подчеркнуть, что, в отличие от контура линии H_2O при самоуширении, контур H_2O при уширении азотом становится ниже лоренцевского на расстояниях от центра, меньших, чем 25 см^{-1} (см. рис. 5). Эта же тенденция отмечена, например, в [28]. В связи с этим расчет континуального поглощения, использующий контур (3), (4) и лоренцевское поглощение на 25 см^{-1} от центра (согласно определению СКД), может, в принципе, приводить к отрицательным значениям континуума. Аналогичная ситуация возникает, например, в случае поглощения CO_2 , контур линий которого ниже лоренцевского на расстояниях от центра линии меньше 25 см^{-1} [29]. Поэтому при расчете континуального поглощения с полученным контуром (3), (4) логично на границе локального вклада брать не лоренцевское значение, а значение этого контура.

Рисунок 6 позволяет сравнить наши результаты с результатами Берча [10, 12]. Отметим, что точность данных [10, 12] на рис. 6, *a* невелика, про третью точку сказано только, что результат менее $4,0E-25 \text{ см}^2 \cdot \text{мол.}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$. Пунктир на рис. 6, *б*, продолжающий сплошную линию, показывает предполагаемое поведение континуального поглощения (по Берчу). Результаты [10, 12] получены при отбрасывании поглощения линиями, находящимися в пределах $\pm 1 \text{ см}^{-1}$ от точки измерения. Расчет производился при тех же условиях.

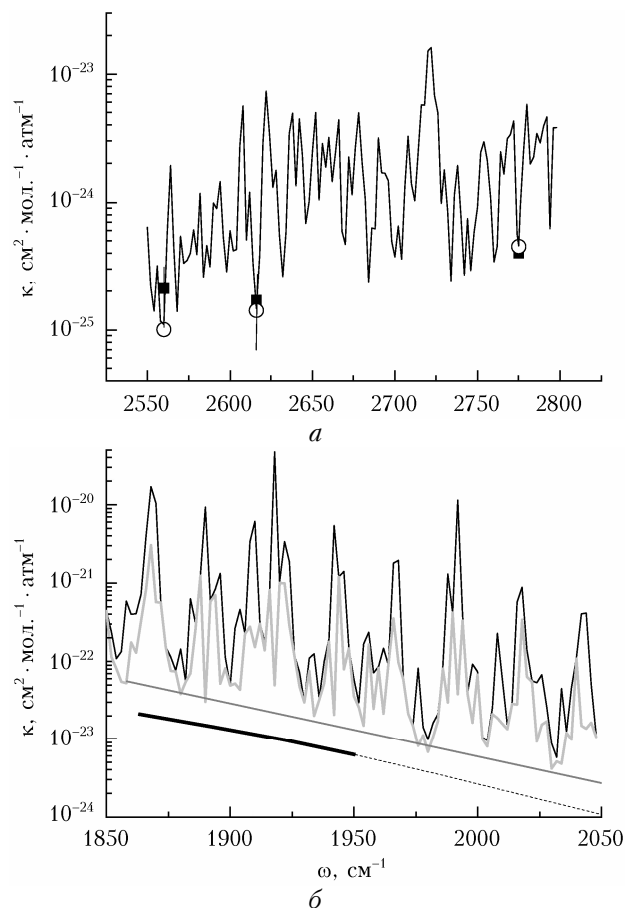


Рис. 6. Коэффициент поглощения H_2O , уширенного азотом, в разных спектральных интервалах: *a* – в окне 3–5 мкм: квадраты – эксперимент [12], тонкая черная кривая – полный коэффициент (с контуром (3), (4)), кружки – расчет с контуром (3), (4) без вклада линий в пределах $\pm 1 \text{ см}^{-1}$ от точки измерения; *б* – в крыле полосы 1400–1900 см^{-1} : полужирная кривая и пунктир – эксперимент [10] ($T = 428 \text{ K}$), тонкая черная кривая – полный коэффициент (с контуром (3), (4)) ($T = 296 \text{ K}$), серая кривая – расчет с контуром (3), (4) без вклада линий в пределах $\pm 1 \text{ см}^{-1}$ от точки измерения, серая прямая проведена по минимумам серой кривой ($T = 296 \text{ K}$)

Недавний вариант континуального поглощения H_2O в интервале 3400–4000 см^{-1} получен в [30] из экспериментальных данных путем тщательной подгонки с использованием уточненных характеристик спектральных линий (полужирная черная кривая 1 на рис. 7, *a*). Мы добавили к этому экспериментальному континуальному поглощению локальный вклад

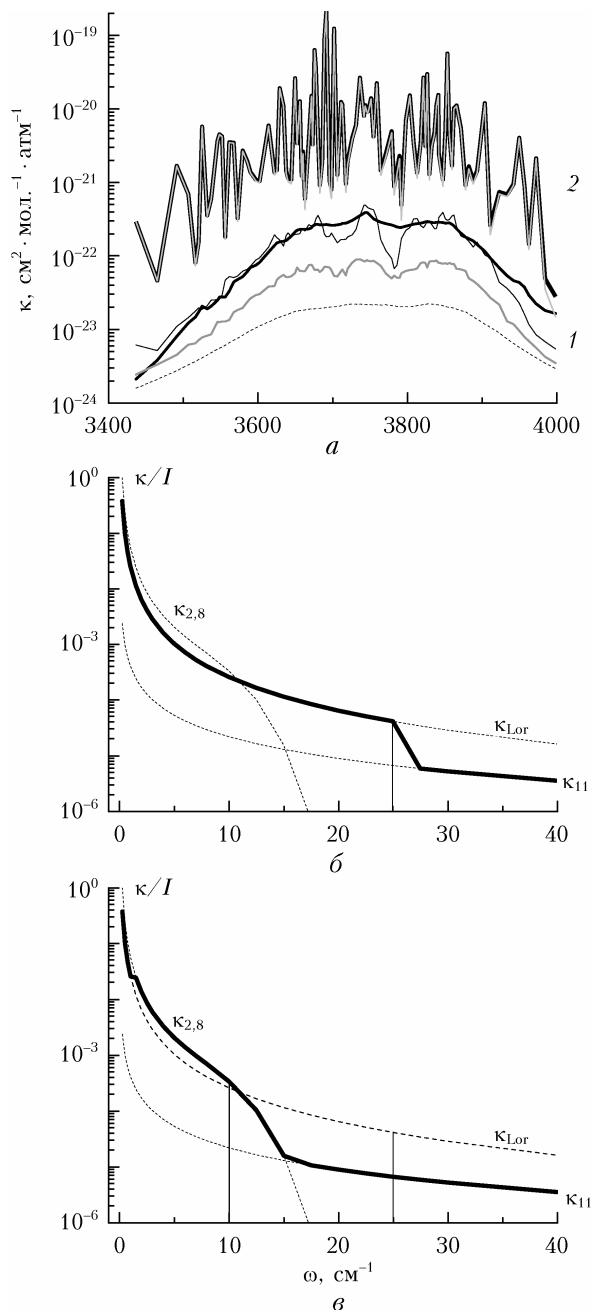


Рис. 7. Коэффициент поглощения H_2O при уширении азотом в пределах полосы 3000–4200 см^{-1} (*a*): группа кривых 1 относится к континуальному поглощению, группа кривых 2 – к полному поглощению; полужирные черные кривые 1 и 2 – коэффициент континуального поглощения, полученный в [30] из экспериментальных данных, и полный коэффициент поглощения, полученный добавлением к нему локального вклада лоренцевских линий в пределах 25 см^{-1} ; серые кривые 1 и 2 – континуальное и полное поглощение, рассчитанное с контуром АТКЛ (3) (*б*) с границей локального вклада 25 см^{-1} ; пунктирная кривая – континуальное поглощение, рассчитанное с контуром АТКЛ (3), (4) (*в*) с границей локального вклада 10 см^{-1} ; тонкая черная кривая – континуальное поглощение, рассчитанное с контуром АТКЛ (3), (4) (*в*) с границей локального вклада 10 см^{-1} ; контуры, используемые в расчете АТКЛ (*б*, *в*): обозначения частей контура как на рис. 5, полужирные кривые – результирующие контуры

лоренцевских линий в пределах 25 см^{-1} , получив таким образом полное «экспериментальное» поглощение (полужирная черная кривая 2 на рис. 7, а). Если теперь из полного коэффициента, посчитанного с контуром АТКЛ (3), (4) (серая кривая 2 на рис. 7, а), вычесть локальный вклад линий с лоренцевским значением коэффициента поглощения на границе 25 см^{-1} , получим континуальное поглощение (серая кривая 1 на рис. 7, а). Контур линии в этом расчете показан на рис. 7, б. Видно, что он значительно отличается от контура (3), (4) на расстояниях до 25 см^{-1} от центра линии. На 25 см^{-1} контур (3), (4) ниже лоренцевского. Рассчитанный со значением контура (3), (4) на 25 см^{-1} (контур на рис. 7, в) континуум показан пунктирной кривой на рис. 7, а. Если взять границу локального вклада, равную 10 см^{-1} , то континуальное поглощение примет вид, представленный тонкой черной кривой на рис. 7, а.

Сравнения с другими вариантами континуума к подогнанному континууму добавлялись вклады линий, отсутствовавшие при подгонке, чтобы получить континуальное поглощение, обозначенное полужирной черной кривой 1 на рис. 7, а. Кроме того, авторы [30] отмечают, что полученный ими континуум полезен внутри полос, но не между ними. По видимому, решительных выводов из его сравнения с нашим расчетом делать пока не стоит. Однако все же из этого сравнения и из вида контура (3), (4) можно заключить, что континуальное поглощение H_2O при уширении азотом сильно зависит от принятой границы локального вклада линий.

На рис. 8 континуальное поглощение, рассчитанное с разными границами локального вклада в диапазоне $1000\text{--}10000 \text{ см}^{-1}$, приведено в сравнении с расчетом Ma, Tipping [28] и с версией MTKCD_2.5, а также с экспериментальными данными [13, 14, 16, 17, 30].

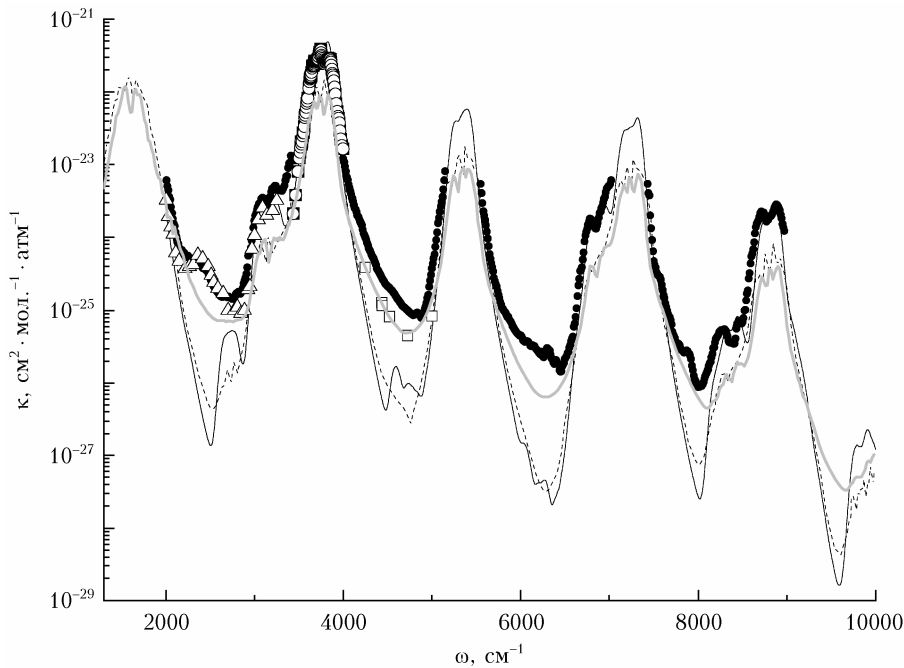


Рис. 8. Коэффициент континуального поглощения H_2O при уширении азотом в интервале $1000\text{--}10000 \text{ см}^{-1}$: пунктирная кривая — расчет [28], $T = 296 \text{ К}$; черная кривая — расчет MTKCD_2.5; светло-серая кривая — АТКЛ-расчет при $T = 296 \text{ К}$ с контуром (3), (4) (рис. 7, в) с границей локального вклада 25 см^{-1} ; белые кружки — коэффициент континуального поглощения, полученный в [30] из экспериментальных данных; квадраты — эксперимент [13, 14]; треугольники — эксперимент [16], $T = 326 \text{ К}$; черные кружки — эксперимент [17], $T = 402 \text{ К}$

Здесь не следовало ожидать согласия наших расчетов с экспериментальным поглощением [30] по нескольким причинам. Мы использовали лоренцевский контур для расчета локального вклада линий, в то время как в [30] это был контур Hartmann–Tzan и Rosenkranz line mixing, параметры которого находились в процессе подгонки. При подгонке параметров в случае стороннего континуума в [30] в каждом микроокне вырезались линии от $0,5$ до 3 см^{-1} , и при этом учитывался вклад линий до $\pm 100 \text{ см}^{-1}$ от границ микроокна. Для срав-

Подчеркнем, что влияние границы локального вклада существенно в пределах полос поглощения и практически не имеет места в крыльях полос.

Заключение

Расчет континуального поглощения как суммы коэффициентов поглощения отдельными линиями со специальным контуром на далеких расстояниях от центров линий, следующим из асимптотической теории крыльев линий, произведен для водяного

пара при уширении азотом. Как и в случае самоуширения [9], параметры контура подбираются с использованием экспериментальных данных [13, 14] в ограниченном спектральном интервале ($4200\text{--}5000\text{ см}^{-1}$), и затем этот контур используется для расчета поглощения в более широком диапазоне — $1000\text{--}10000\text{ см}^{-1}$.

Получаемый из АТКЛ контур линий водяного пара при уширении азотом значительно отличается от такового при самоуширении. Так, если в случае самоуширения контур может превышать лоренцевский в несколько раз на расстояниях до 500 см^{-1} от центра линии, то в случае уширения азотом превышение незначительно и контур становится ниже лоренцевского уже на расстояниях около 10 см^{-1} от центра линии. Если при расчете континуального поглощения при уширении азотом использовать границу локального вклада, равную 25 см^{-1} , при значении реального (а не лоренцевского) контура на этой границе, то рассчитанное континуальное поглощение в пределах полосы оказывается ниже определенного из эксперимента. Использование в качестве границы локального вклада расстояния, меньшего 25 см^{-1} (например, 10 см^{-1}), могло бы привести к согласию рассчитанного континуального поглощения в пределах полосы $3400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ с определенным из эксперимента [30].

В целом можно предполагать, что контур линий водяного пара, полученный в рамках АТКЛ, способен и в случае уширения азотом, как и при самоуширении, дать приемлемое описание поглощения, по крайней мере, в промежутках между полосами ИК-диапазона. Для окончательных выводов желательно иметь более обширные экспериментальные данные по поглощению в лабораторных условиях.

Стоит также отметить, что следование принятому в литературе единому определению континуального поглощения ограничивает возможности исследования контура линии на расстояниях от центра линии, меньших 25 см^{-1} , и тем самым может привести к неоднозначностям в величине как расчетного, так и экспериментального континуального поглощения. Уже тот факт, что полуширины линий поглощающих газов могут сильно различаться, свидетельствует в пользу того, что не стоит *a priori* считать контур лоренцевским в пределах 25 см^{-1} от центра для всех атмосферных газов.

Авторы благодарят И.В. Пташника за полезные обсуждения.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

1. Ptashnik I.V., Shine K.P., Vigasin A.A. Water vapour self-continuum and water dimers: 1. Analysis of recent work // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2011. V. 112. P. 1286–1303.
2. Shine K.P., Ptashnik I.V., Radel G. The water vapour continuum: Brief history and recent developments // Surveys in Geophysics 2012. V. 33. N 3–4. P. 535–555.
3. Hartmann J.-M., Tran H., Armante R., Boulet C., Campargue A., Forget F., Gianfrani L., Gordon I., Guerlet S., Gustafsson M., Hodges J.T., Kassi S., Lisak D.,

Thibault F., Toon G.C. Recent advances in collisional effects on spectra of molecular gases and their practical consequences // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2018. V. 213. P. 178–227.

4. Shine K.P., Campargue A., Mondelain D., McPheat R.A., Ptashnik I.V., Weidmann D. The water vapour continuum in near-infrared windows – Current understanding and prospects for its inclusion in spectroscopic databases // J. Mol. Spectrosc. 2016. V. 327. P. 193–208.
5. Lechevallier L., Vasilchenko S., Grilli R., Mondelain D., Romanini D., Campargue A. The water vapour self-continuum absorption in the infrared atmospheric windows: new laser measurements near 3.3 and $2.0\text{ }\mu\text{m}$ // Atmos. Meas. Tech. 2018. V. 11. P. 2159–2171.
6. Ptashnik I., Klimeshina T.E., Solodov A.A., Vigasin A.A. Spectral composition of the water vapour self-continuum absorption within 2.7 and $6.25\text{ }\mu\text{m}$ bands // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2019. V. 228. P. 97–05.
7. Odintsova T., Tretyakov M.Yu., Zibarova A.O., Pirali O., Roy P., Campargue A. Far-infrared self-continuum absorption of H_2^{16}O and H_2^{18}O ($15\text{--}500\text{ см}^{-1}$) // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2019. V. 227. P. 1900–1909.
8. Ptashnik I.V., Petrova T.M., Ponomarev Yu.N., Shine K.P., Solodov A.A., Solodov A.M. Near-infrared water vapour self-continuum at close to room temperature // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 120. P. 23–25.
9. Клimeshina T.E., Родимова О.Б. Расчет континуального поглощения H_2O в ИК-диапазоне на основе измерений Берча // Оптика атмосф. и океана. 2019. Т. 32, № 8. С. 628–632.
10. Burch D.E., Gryonak D.A. Continuum absorption by H_2O vapor in the infrared and millimeter regions / A. Deepak, T.D. Wilkerson, L.H. Ruhnke (eds.) // Atmospheric water vapor. New York, London, Toronto, Sydney, San Francisco: Academic Press, 1980. P. 47–76.
11. Burch D.E. Continuum absorption by atmospheric H_2O // Proc. SPIE. 1981. V. 277. P. 28–39.
12. Burch D.E., Alt R.L. Continuum absorption by H_2O in the $700\text{--}1200\text{ см}^{-1}$ and $2400\text{--}2800\text{ см}^{-1}$ windows // Report AFGL-TR-84-0128. 1984. 31 p.
13. Vasilchenko S., Campargue A., Kassi S., Mondelain D. The water vapour self- and foreign-continua in the $1.6\text{ }\mu\text{m}$ and $2.3\text{ }\mu\text{m}$ windows by CRDS at room temperature // J. Geophys. Res.: Atmos. 2019. V. 227. P. 230–238.
14. Mondelain D., Vasilchenko S., Cermak P., Kassi S., Campargue A. The self- and foreign-absorption continua of water vapor by cavity ring-down spectroscopy near $2.35\text{ }\mu\text{m}$ // Phys. Chem. Chem. Phys. 2015. V. 17. P. 17762–17770.
15. Burch D.E. Absorption by H_2O in narrow windows between $3000\text{--}4200\text{ см}^{-1}$ // Report AFGL-TR-85-0036. 1985. 37 p.
16. Baranov Y.I. The continuum absorption in $\text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$ mixtures in the $2000\text{--}3250\text{ см}^{-1}$ spectral region at temperatures from 326 to 363 K // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2011. V. 112. P. 2281–2286.
17. Ptashnik I.V., McPheat R.A., Shine K.P., Smith K.M., Williams R.G. Water vapour foreign-continuum absorption in near-infrared windows from laboratory measurements // Philos. Trans. R. Soc. A. 2012. V. 370. P. 2557–2577.
18. Burch D.E., Gryonak D.A., Patty R.R., Bartky Ch.E. Absorption of infrared radiant energy by CO_2 and H_2O . IV. Shapes of collision-broadened CO_2 lines // J. Opt. Soc. Amer. 1969. V. 59, N 3. P. 267–280.

19. Clough S.A., Kneizys F.X., Davies R.W. Line shape and the water vapor continuum // *Atmos. Res.* 1989. V. 23, iss. 3–4. P. 229–241.
20. Ma Q., Tipping R.H., Leforestier C. Temperature dependences of mechanisms responsible for the water-vapor continuum absorption: 1. Far wings of allowed lines // *J. Chem. Phys.* 2008. V. 128, N 12. P. 124313.
21. Несмелова Л.И., Родимова О.Б., Творогов С.Д. Контур спектральной линии и межмолекулярное взаимодействие. Новосибирск: Наука, 1986. 216 с.
22. Творогов С.Д., Родимова О.Б. Столкновительный контур спектральных линий. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2013. 196 с.
23. Климешина Т.Е., Богданова Ю.В., Родимова О.Б. Континуальное поглощение водяным паром в окнах прозрачности атмосферы 8–12 и 3–5 мкм // *Оптика атмосф. и океана.* 2011. Т. 24, № 9. С. 765–769; Klimeshina T.E., Bogdanova Yu.V., Rodimova O.B. Continuum absorption by water vapor in the 8–12 and 3–5 mm atmospheric transparency windows // *Atmos. Ocean. Opt.* 2012. V. 25, N 1. P. 71–76.
24. Tulegenov A.S., Wheatley R.J., Hodges M.P., Harvey A.H. Intermolecular potential and second virial coefficient of the water–nitrogen complex // *J. Chem. Phys.* 2007. V. 126, iss. 9. P. 094305-1–11.
25. Brown A., Tipping R.H. Collision-induced absorption in dipolar molecule – homonuclear diatomic pairs / C. Camy-Peyret, A.A. Vigasin (eds.) // *Proc. NATO. Dordrecht: Kluwer, 2003. P. 93–99.*
26. Mondelain D., Vasilchenko S., Čermák P., Kassi S., Campargue A. The CO₂ absorption spectrum in the 2.3 μm transparency window by high sensitivity CRDS: (II) Self-absorption continuum // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2017. V. 187. P. 38–43.
27. Tonkov M.V., Filippov N.N., Bertsev V.V., Bouanich J.P., Nguyen Van-Thanh, Brodbeck C., Hartmann J.M., Boulet C., Thibault F., Le Doucen R. Measurements and empirical modeling of pure CO₂ absorption in the 2.3-μm region at room temperature: Far wings, allowed and collision-induced bands // *Appl. Opt.* 1996. V. 35, N 24. P. 4863–4870.
28. Tipping R.H., Ma Q. Theory of the water vapor continuum and validations // *Atmos. Res.* 1995. V. 36. P. 69–94.
29. Родимова О.Б. Континуальное поглощение в ИК-спектре углекислого газа и водяного пара // *Оптика атмосф. и океана.* 2018. Т. 31, № 8. С. 595–600; Rodimova O.B. Carbon dioxide and water vapor continuum absorption in the infrared spectral region // *Atmos. Ocean. Opt.* 2018. V. 31, N 6. P. 564–569.
30. Birk M., Wagner G., Loos J., Shine K.P. 3 μm water vapor self- and foreign-continuum: New method for determination and new insights into the self-continuum // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2020. V. 253. P. 107134-1–22.

O.B. Rodimova, T.E. Klimeshina. Foreign-continuum absorption in the wings of the IR H₂O bands.

The H₂O foreign-continuum absorption in the IR region is regarded according to the asymptotic line wing theory presenting absorption as a sum of the individual line absorption coefficients with a special line shape at far distances from the line center. The line shape parameters pertaining to quantum and classical H₂O–N₂ interaction potentials are found as a result of fitting the experimental absorption data in the 4200–5000 cm⁻¹ spectral interval and the data on the temperature dependence of the second virial coefficient. This line shape is used for calculation of the continuum absorption in the 1000–10000 cm⁻¹ region.