

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Басов Н.Г., Молчанов А.Г., Насибов А.С., Обидин А.З., Печенов А.Н., Попов Ю.М. Стримерные лазеры на твердом теле // ЖЭТФ. – 1976. – Т. 70. – № 5. – С. 1751–1761.
2. Грибковский В.П. Стримеры в полупроводниках – кооперативные самоорганизованные процессы // Доклады АН БССР. – 1985. – Т. 29. – № 10. – С. 896–898.
3. Грибковский В.П. Полупроводниковые лазеры. – Минск: Университетское, 1988. – 235 с.
4. Grubkovskii V.P., Gladyschuk A.A., Zubritskii V.V., Parashchuk V.V., Yablonskii G.P. Streamer Discharges in Semiconductors // Phys. Stat. Sol. (a). – 1983. – V. 77. – № 2. – P. 765–774.
5. Васильев В.А., Романовский Ю.М., Яхно В.Г. Автоволновые процессы (Современные проблемы физики) / Под ред. Д.С. Чернавского. – М.: Наука, 1987. – 240 с.
6. Парашук В.В., Грибковский В.П. Автоколебания электрон-фотонной системы в условиях стримерного разряда // Доклады НАН Беларуси. – 2001. – Т. 45. – № 1. – С. 56–59.
7. Владимиров В.В., Горшков В.Н., Константинов О.В., Кускова Н.И. Возбуждение высокочастотных автоколебаний в стримерных полупроводниковых лазерах // Доклады АН СССР. – 1989. – Т. 305. – № 3. – С. 586–588.
8. Елисеев П.Г., Богатов А.П. Явления в полупроводниковых лазерах, связанные с нелинейной рефракцией и влиянием носителей тока на показатель преломления // Нелинейная оптика полупроводниковых лазеров / Труды ФИАН. – Т. 166. – М.: Наука, 1986. – С. 15–51.
9. Destriau G. The new phenomenon of electrophotoluminescence and its possibilities for the investigation of crystal lattice // Phil. Mag. – 1947. – V. 38. – № 285. – P. 700–739.
10. Обидин А.З., Печенов А.Н., Попов Ю.М., Фролов В.А. Исследование генерации света в направлении стримерного канала в полупроводниках  $A_2B_6$  // Квантовая электроника. – 1983. – Т. 10. – № 6. – С. 1165–1170.
11. Парашук В.В., Грибковский В.П., Русаков К.И., Прокopenя А.Н. Излучательные процессы при разряде в полупроводниках // Доклады АН Беларуси. – 1997. – Т. 41. – № 3. – С. 43–47.
12. Лагарьков А.Н., Руткевич И.М. Волны электрического пробоя в ограниченной плазме. – М.: Наука, 1989. – 206 с.
13. Тагер А.С., Вальд-Перлов В.М. Лавинно-пролетные диоды и их применение в технике СВЧ. – М.: Советское радио, 1968. – 480 с.

Поступила 19.04.2007 г.

УДК 539.194,535.621,535.34

## РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ ЛИНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВОЗБУЖДЕННОЙ МОЛЕКУЛЫ HF

В.Н. Стройнова

Томский политехнический университет  
E-mail: vns@tpu.ru

Создана расчетная модель, позволяющая получить достоверные значения полуширины и сдвига центров линий молекулы HF горячих и холодных полос вплоть до предела диссоциации. Представлены результаты расчетов вращательных и колебательных зависимостей релаксационных параметров линий HF-HF.

### 1. Введение

Одной из основных проблем современной теоретической спектроскопии является исследование высоколежащих колебательных состояний молекул. Достоверные значения параметров линий поглощения молекул в газовой фазе необходимы для приложений в фотохимии атмосферы, лазерной физике, при создании баз данных спектроскопической информации. Здесь представлена новая модель, в основу которой положены вариант Корфа-Левита-Черкасова ударной теории уширения, уровни энергии и волновые функции осциллятора Морзе, рассчитанные *ab initio* или полумпирически функции мультипольных моментов и поляризуемости двухатомных молекул. Предлагаемая модель позволяет исследовать влияние внутримолекулярной динамики двухатомных молекул в условиях сильного колебательного возбуждения на полуширину и сдвиг линий поглощения. Для проверки достоверности модели в статье проведены рас-

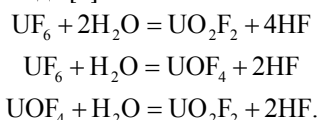
четы полуширин и сдвигов центров линий высоколежащих горячих и холодных полос молекулы HF.

Ранее были проведены измерения полуширин и сдвигов центров линий молекулы HF вплоть до  $v=2$  [1–4]. В настоящее время экспериментальные значения полуширин и сдвигов центров линий, образованные переходами на более высокие колебательные состояния молекулы HF, отсутствуют. Хорошее согласие рассчитанных в данной работе полуширин и сдвига центров линий HF-HF с результатами измерений [1–4] также подтверждает достоверность предлагаемой модели.

В [5, 6] представлены результаты анализа зависимости релаксационных параметров линии  $R_0$  двухатомных молекул от различных факторов внутримолекулярной динамики: изменения вращательной постоянной, дипольного, квадрупольного моментов, поляризуемости. Показано, что для линий высоколежащих колебательно-вращательных (КВ) полос молекул HF и CO наблюдаются значитель-

ные изменения коэффициентов уширения и сдвига в зависимости от внутримолекулярной динамики. При сильном колебательном возбуждении должен проявляться также адиабатический эффект в полуширинах, связанный со сдвигом уровней энергии при столкновениях. Как показано в [7], этот эффект увеличивает полуширины линий  $H_2O$  в полосах, обусловленных возбуждением валентных колебаний. Наоборот, в молекуле  $H_2O$  наблюдается уменьшение полуширин линий в полосах типа  $\nu_2$ , обусловленное существенным возрастанием вращательной постоянной и аномальным центробежным эффектом при возбуждении изгибного колебания [8].

Предлагаемая модель может иметь следующие практические приложения. Во-первых, использование в атомной энергетике уранового топлива, в частности,  $UF_6$ ,  $UF_4$  приводит к загрязнению атмосферы оксифторидами урана и водорода. В районах прохождения ядерного топливного цикла могут образовываться колебательно-возбужденные молекулы HF, а также комплексы  $(HF+H)$ ,  $(HF+OH)$  в газообразном виде [9]:



Спектроскопические методы позволяют обнаружить места скопления HF и ее комплексов и определить концентрацию. Во-вторых, для построения кинетических моделей колебательно-возбужденных лазерных сред необходимо знать полуширины и сдвиги центров линий, принадлежащих высоколежащим колебательным полосам HF. В настоящее время химические HF-лазеры используются в различных областях техники [10]. В-третьих, в настоящее время создаются базы данных спектроскопической информации. Представленная здесь расчетная модель позволяет получить достоверную спектроскопическую информацию для существующих баз данных.

Необходим детальный численный анализ влияния внутримолекулярной динамики высоковозбужденных КВ состояний на релаксационные параметры линий поглощения двухатомных молекул. Исследовано проявление адиабатического эффекта в полуширинах линий HF, влияние изменения вращательной постоянной, дипольного, квадрупольного моментов и поляризуемости на релаксационные параметры линий поглощения горячих и холодных полос молекулы HF при ее сильном колебательном возбуждении вплоть до предела диссоциации.

## 2. Теоретический анализ

Для определения потенциальной функции использовалась модель осциллятора Морзе. Параметры потенциала Морзе для молекулы HF определены подгонкой к потенциальной функции, рассчитанной *ab initio*. Молекула HF имеет предел диссоциации  $49000 \text{ см}^{-1}$ , потенциал Морзе поддерживает 23 колебательных состояния. Необходимые в теории уширения матричные элементы дипольного,

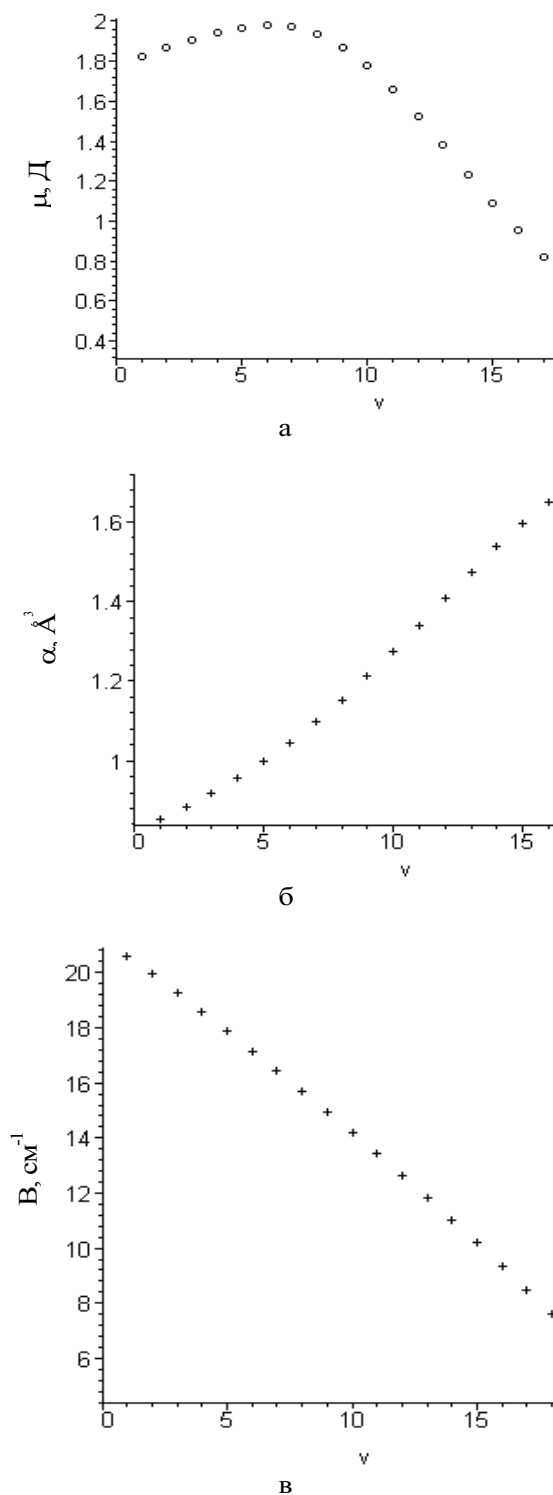


Рис. 1. Зависимость средних значений ВНУ тримолекулярных характеристик HF от колебательного квантового числа: а) дипольный момент; б) поляризуемость; в) вращательная постоянная

квадрупольного моментов, поляризуемости, а также вращательная постоянная определялись численно с волновыми функциями осциллятора Морзе. Для расчетов использовались функции [11–13] дипольного, квадрупольного моментов и поляризуемости молекулы HF, рассчитанные *ab initio* и/или

определенные полуэмпирически. Внутримолекулярная динамика HF при сильном колебательном возбуждении подробно обсуждалась в [5], поэтому здесь остановимся на колебательной зависимости средних значений молекулярных параметров.

На рис. 1, *a*, *b*, показана зависимость диагональных матричных элементов дипольного момента и поляризуемости молекулы HF от колебательного квантового числа *v*. Разность матричных элементов поляризуемости и квадратов дипольного момента определяют адиабатический вклад в полуширину и сдвиг центров линий. Расчеты показали, что для молекулы HF этот вклад возрастает в 7 раз в состоянии *v*=20 по сравнению с *v*=2. Можно ожидать существенных изменений полуширины и сдвига центров линий молекулы HF при увеличении колебательного квантового числа.

Значения вращательных уровней энергии, определяемые матричным элементом вращательной постоянной *B<sub>v</sub>* оптически активной молекулы, сильно зависят от степени ее колебательного возбуждения. На рис. 1, *в*, показана зависимость вращательной постоянной молекулы HF от колебательного квантового числа *v*. Можно видеть, что имеет место сильное уменьшение вращательной постоянной (в 7,2 раза при увеличении *v* от 0 до 22).

Очевидно, такое существенное изменение вращательной постоянной молекулы HF значительно «уплотняет» вращательный энергетический спектр молекулы в высоких колебательных состояниях вблизи предела диссоциации. Частоты вращательных переходов, определяющие величину неадиабатического вклада в полуширину и сдвиг центров линий, уменьшаются. Это должно приводить к изменению полуширины и сдвига центров линий HF-HF при увеличении колебательного квантового числа.

### 3. Результаты и обсуждение

#### 3.1. Теоретические основы расчетной модели

В рамках одного из вариантов полуклассической теории ударного уширения [14], в приближении прямолинейных траекторий и средней скорости столкновений, полуширина  $\gamma(i, f)$  и сдвиг  $\delta(i, f)$  центра линии выражаются формулами:

$$\gamma(i, f) = \frac{mv}{c} \sum_j \rho(j) \int_0^\infty \left[ 1 - \exp\{-\text{Re } S_2^{\text{outer}}(b)\} \times \cos\{S_1(b) + \text{Im } S_2^{\text{outer}}(b)\} \right] b db, \quad (1)$$

$$\delta(i, f) = \frac{mv}{c} \sum_j \rho(j) \int_0^\infty \left[ \sin(S_1(b) + \text{Im } S_2(b)) \exp(-\text{Re } S_2(b)) \right] b db. \quad (2)$$

Здесь *i, f* – квантовые числа начального и конечного состояний колебательного перехода; *n* – концентрация возмущающих частиц; *v* – относительная скорость сталкивающихся молекул;  $\rho(j)$  – засе-

ленность вращательного уровня *j* возмущающей молекулы. Функция эффективности находится разложением в ряд теории возмущений:  $S(b) = iS_1(b) + S_2^{\text{outer}}(b) + iS_2^{\text{outer}}(b) + \dots$   $S_1(b)$  – функция эффективности первого порядка, определяющая адиабатический вклад в полуширину (1) и сдвиг центра (2) линий.  $\text{Re } S_2(b)$  и  $\text{Im } S_2(b)$  – действительная и мнимая части функции эффективности второго порядка, определяющей неадиабатический вклад. В межмолекулярном потенциале учитывались диполь-дипольное, диполь-квадрупольное, квадруполь-квадрупольное и поляризационные (индукционное и дисперсионное) взаимодействия. Для краткости здесь приведены вклады в  $S_2^{\text{outer}}(b)$  только диполь-дипольного слагаемого в межмолекулярном потенциале:

$$\text{Re } S_2^{\text{outer}}(i, f, b, v) = \frac{4}{9} \frac{1}{(\hbar v b^2)^2} \times \sum_{j'} D(jj'|1) \left\{ \sum_{i'} D(ii'|1) \text{Re } \varphi_{11}(k_{jj'i'}) + \sum_{f'} D(ff'|1) \text{Re } \varphi_{11}(k_{ff'j'}) \right\}. \quad (3)$$

Здесь  $\varphi_{11} = \text{Re } \varphi_{11} + i \text{Im } \varphi_{11}$  – комплексная резонансная функция для диполь-дипольного взаимодействия. Обобщенная сила линии *D* определяется как произведение квадрата матричного элемента дипольного момента  $\mu$  поглощающей молекулы в колебательном состоянии. Сила линии перехода зависит от диагонального матричного элемента дипольного момента:

$$D(ii'|1) = \langle V_i | \mu | V_i \rangle^2 (j_i 100 | j'_i 0)^2. \quad (4)$$

Здесь  $|V_i\rangle$  колебательные волновые функции начального состояния перехода;  $(j_i 100 | j'_i 0)$  – коэффициенты Клебша-Гордана [15],  $i=0, \dots, 22$ . Резонансный параметр *k* в (3) определяется разностью энергий вращательных уровней в верхнем или нижнем колебательных состояниях:

$$k_{jj'i} = \frac{2\pi cb}{v} (E_{j_i} - E_{j'_i} + E_j - E_{j'}) = \frac{2\pi cb}{v} (\omega_{jj'i} + \omega_{j'}). \quad (5)$$

Заменяв индексы *j<sub>i</sub>, j'<sub>i</sub>* на *j<sub>p</sub>, j'<sub>p</sub>*, можно получить резонансный параметр  $k_{jff}$  в верхнем колебательном состоянии перехода. Уровни энергии  $E_{j_i}, E_{j'_i}$  в (5) рассчитываются с матричными элементами вращательной постоянной.

Мнимая часть функции эффективности определяется поляризационной частью межмолекулярного потенциала (индукционным и дисперсионным взаимодействием) и электростатическими взаимодействиями. Изотропная часть поляризационных взаимодействий в приближении Унзольда [16] зависит от разностей средних значений поляризуемости и квадрата дипольного момента в верхнем и нижнем состоянии перехода:

$$S_1(i, f, b, \nu) = \frac{3\pi}{8\hbar\nu b^5} \left\{ \begin{aligned} &\alpha_2 \{ \langle V_i | \mu_i^2 | V_i \rangle - \langle V_f | \mu_i^2 | V_f \rangle \} + \\ &+ [\mu_2^2 + \frac{3}{2} \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \alpha_2] \times \\ &\times \{ \langle V_i | \alpha_1 | V_i \rangle - \langle V_f | \alpha_1 | V_f \rangle \} \end{aligned} \right\}. \quad (6)$$

Здесь  $\mu_1, \mu_2$  – функции дипольного момента;  $\alpha_1, \alpha_2$  – функция поляризуемости поглощающей и возбуждающей молекулы;  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  – потенциалы ионизации. В случае самоуширения  $\mu_1 = \mu_2, \alpha_1 = \alpha_2, \varepsilon_1 = \varepsilon_2$ . Вклад от  $S_1(b)$  (6) (адиабатический вклад) в полуширину и сдвиг центров линии существенно различается для молекулы  $H_2O$ : для полуширин линий он составляет около 10 % [7], для сдвига центров линий может достигать 75 % в полосе  $3\nu_1 + \nu_3$  [17].

В формуле для  $Im S_2$  приводится вклад только от диполь-дипольного взаимодействия:

$$Im S_2^{outer}(i, f, b, \nu) = \frac{4}{9} \frac{1}{(\hbar\nu b^2)^2} \times \left\{ \begin{aligned} &\sum_{i'} D(ii' | 1) Im \varphi_{11}(k_{i'j'}) - \\ &\sum_{j'} D(jj' | 1) \left\{ \begin{aligned} &\sum_{i'} D(ii' | 1) Im \varphi_{11}(k_{i'j'}) - \\ &\sum_{j'} -D(ff' | 1) Im \varphi_{11}(k_{j'f'}) \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\}. \quad (7)$$

3.2. Колебательные и вращательные зависимости полуширины и сдвига центров линий HF-HF горячих и холодных полос

Для расчетов полуширин линий HF-HF использовались рассчитанная *ab initio* функция дипольного момента из [11], квадрупольного момента из [12], поляризуемости из [13]. Некоторые молекулярные постоянные взяты из [18]. Необходимые матричные элементы дипольного момента, поляризуемости, вращательной постоянной определялись с помощью численного интегрирования. Необходимо отметить, что рассчитанные величины меняются весьма значительно под влиянием колебательного возбуждения молекулы HF. Рассчитанный нами средний дипольный момент основного состояния равен 1,80 Д (рассчитанное значение хорошо согласуется с экспериментально определенной величиной), Рассчитанное в данной работе значение вращательной постоянной для основного состояния  $\nu=0$   $B_0=20,617$   $cm^{-1}$  хорошо согласуется с известным значением  $B_0=20,96$   $cm^{-1}$  [18]. Таким образом, колебательное возбуждение молекулы HF приводит к значительному изменению средних молекулярных характеристик, а также существенному изменению вращательного энергетического спектра.

Ранее в [5] нами проанализированы изменения внутримолекулярной динамики молекул HF и CO под влиянием сильного колебательного возбуждения. Для детального исследования влияния колебательного возбуждения на релаксационные параметры линий проведены расчеты полуширины и сдви-

га центров десятков линий молекулы HF. На рис. 2 представлена колебательная зависимость полуширин линий HF-HF холодных и горячих полос. В целом полуширины линий HF-HF проявляют слабую колебательную зависимость, которая определяется в основном поведением функции дипольного момента. Адиабатический вклад в полуширины линий HF-HF вклад (6) в полуширины линий HF-HF полосы 0-20 в среднем не превышает 10 %. Колебательная зависимость сдвига центров линий представлена на рис. 3 для холодных и горячих полос. Необходимо отметить осциллирующий характер колебательной зависимости сдвига центров линий. Расчеты показывают, что колебательная зависимость сдвига в целом сильно коррелирует с поведением функции поляризуемости. Как следствие, отрицательный вклад в сдвиг линии возрастает из-за увеличения вклада в сдвиг центра от изотропной части поляризационных взаимодействий (6) (адиабатический вклад).

Вращательные зависимости полуширин линий (колебательное квантовое число верхнего состояния  $\nu=18$ ) представлены на рис. 4 для холодных и горячих полос. Видно, что полуширина линий холодных полос монотонно убывает с ростом  $J$ .

Полуширины тех же линий горячих полос проявляют немонотонную зависимость от  $J$  (рис. 4, б). Проведем анализ вкладов в полуширину от резонансной функции с частотами  $\omega_{jji}, \omega_{jff}$  (5) в нижнем и верхнем колебательном состоянии:

$$\omega_{jji} = E_{ji} - E_{j_i} = B_{vi} (j_i^2 + j_i - j_i^2 - j_i'), \quad (8)$$

$$\omega_{jff} = E_{jf} - E_{j_f} = B_{vf} (j_f^2 + j_f - j_f^2 - j_f'). \quad (9)$$

Молекула HF имеет большую вращательную постоянную  $B_{vi}=20,96$   $cm^{-1}$  в основном состоянии и, как следствие, большие частоты вращательных переходов в нижнем колебательном состоянии  $\omega_{jji}$  (8). В колебательном состоянии  $\nu=18$  вращательная постоянная  $B_{vf}=7,59$   $cm^{-1}$ , т. е. в 3 раза меньше. Поскольку  $B_{vi} \gg B_{vf}$ , основной вклад от резонансной функции в полуширину линии (3) определяется частотами вращательных переходов  $\omega_{jji}$  (9) в верхнем колебательном состоянии и зависимость полуширины от вращательного квантового числа  $j$  для линий холодных полос монотонно убывающая (рис. 4, а). Для тех же линий горячих полос (рассматривается переход с изменением колебательного квантового числа на 1) наблюдается другое соотношение вращательных постоянных в нижнем и верхнем колебательном состоянии. Вращательные постоянные  $B_{vi}=8,488$  ( $\nu_i=17$ )  $cm^{-1}$  и  $B_{vf}=7,593$  ( $\nu_f=18$ )  $cm^{-1}$  отличаются менее чем на 1  $cm^{-1}$ , т. е.  $B_{vi} \approx B_{vf}$ . Наблюдается конкуренция частот  $\omega_{jji}$  (8) и  $\omega_{jff}$  (9) вращательных переходов. Различные вклады от резонансной функции (3) определяют значительное расхождение полуширин линий с соседними значениями вращательного квантового числа  $J$ . Как следствие, полуширина проявляет немонотонную зависимость от  $J_i$  (рис. 4, б).

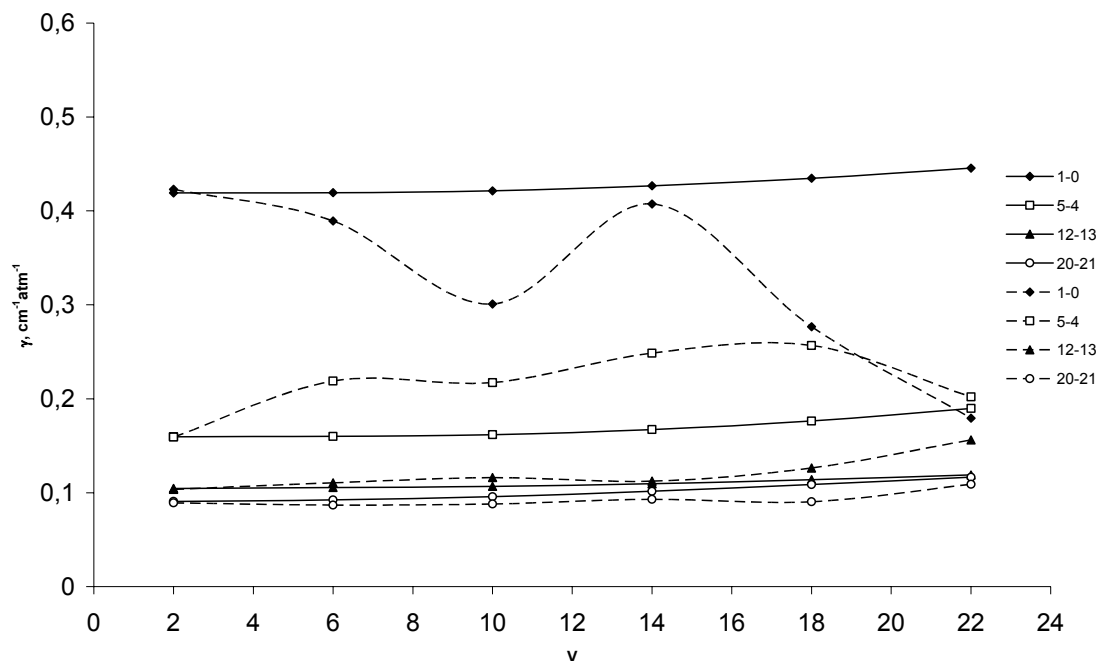


Рис. 2. Зависимость полуширин линий HF-HF от колебательного квантового числа верхнего состояния; сплошные кривые – для холодных полос; пунктирные – для горячих

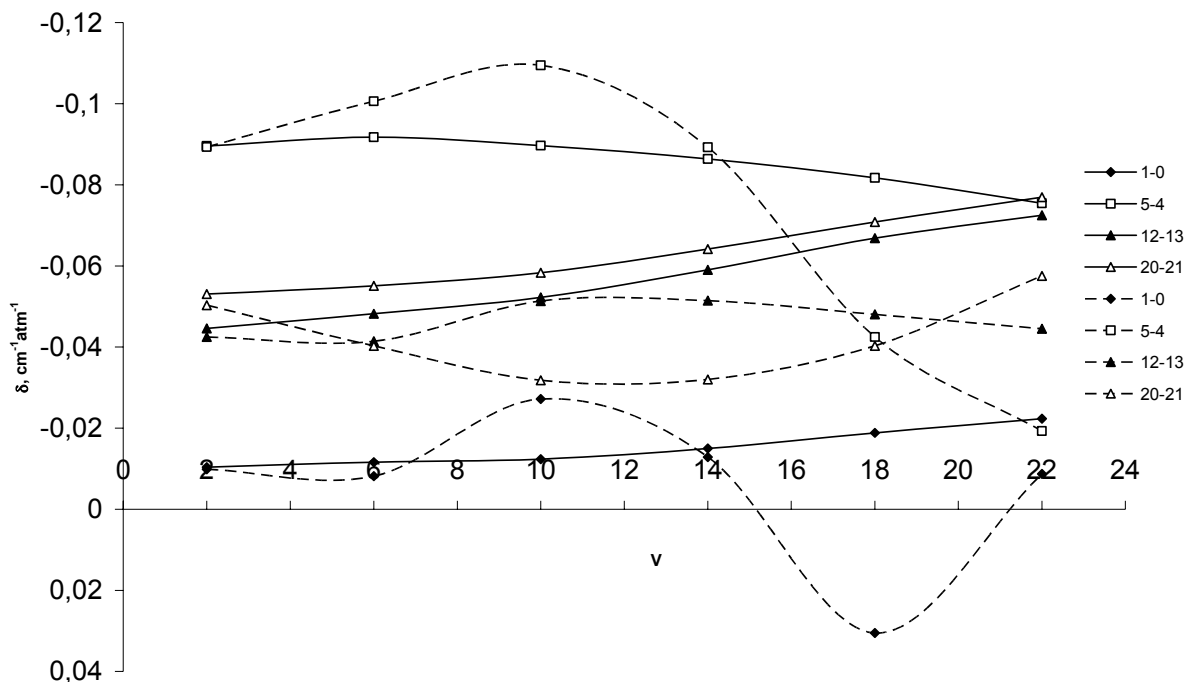
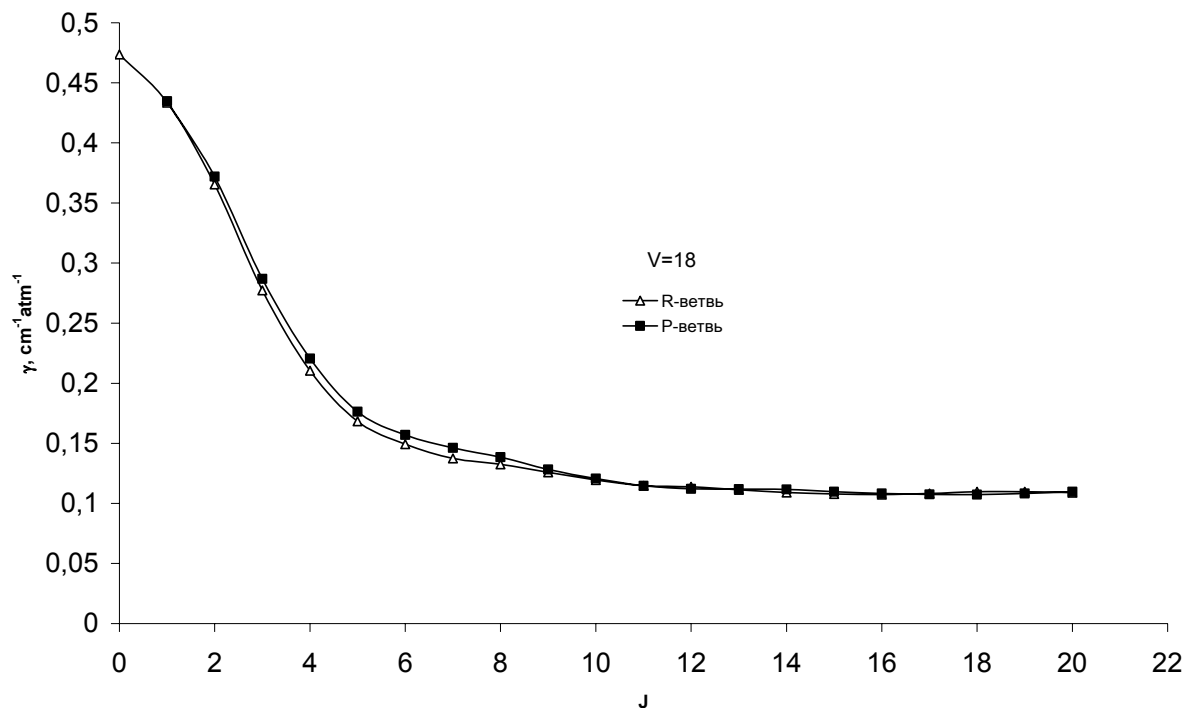


Рис. 3. Зависимость сдвига центров линий HF-HF от колебательного квантового числа верхнего состояния; сплошная кривая – для холодных полос; пунктирная – для горячих

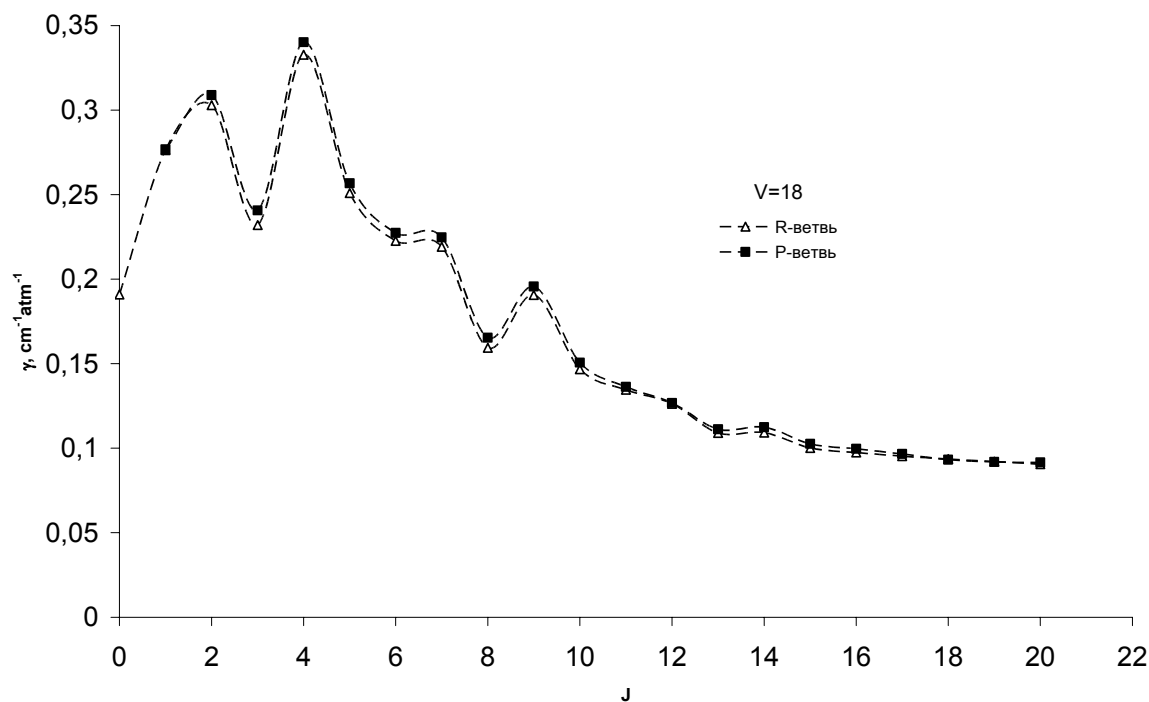
На рис. 5 представлены вращательные зависимости сдвига центров линий холодных и горячих полос. Можно видеть изменение знака сдвига, в особенности для линий горячих полос (рис. 5, б). Аналогичная картина осциллирующих сдвигов имеет место для случаев уширения линий молекулы HF давлением полярных двухатомных молекул [5], молекулы  $H_2O$  собственным давлением [17].

Анализ колебательных и вращательных зависимостей релаксационных параметров молекулы HF позволяет сделать следующие выводы:

1. Поведение функций мультипольных моментов и поляризуемости определяет зависимость полуширины и сдвига центров линий от колебательного квантового числа. Полуширины линий HF-HF слабо зависят от колебательного кванто-



а

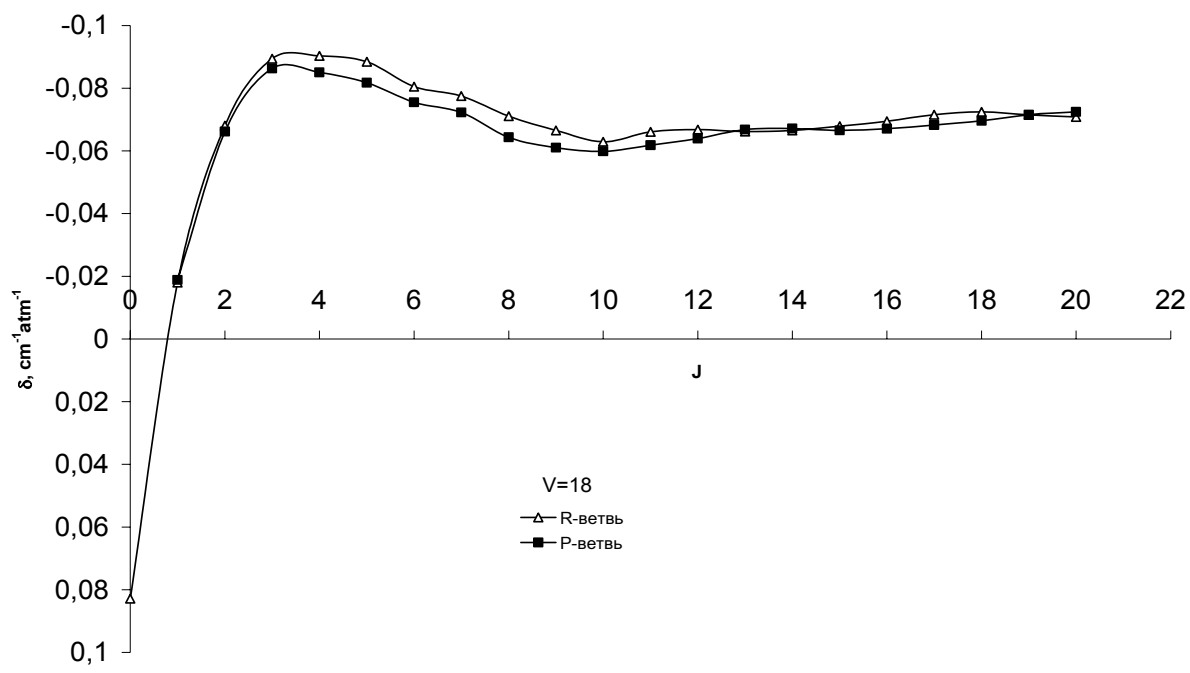


б

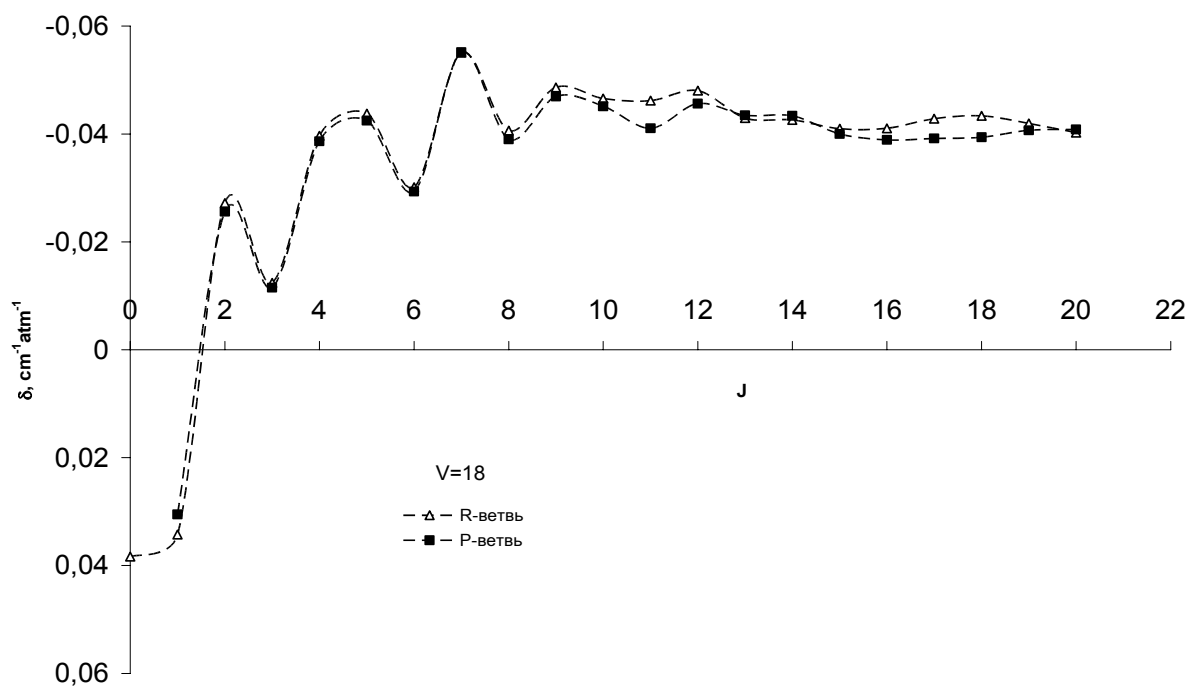
**Рис. 4.** Зависимость полуширин линий HF-HF от вращательного квантового числа нижнего состояния: а) для холодных полос; б) для горячих полос

вого числа. Вычислен адиабатический вклад в полуширину линий: он составляет не более 10 % для линий полосы 0-20 HF-HF. Сдвиги центров линий HF-HF существенно зависят от колеба-

тельного квантового числа, адиабатический вклад в сдвиг центра линии значительный.  
2. Изменение вращательного энергетического спектра при сильном колебательном возбужде-



а



б

Рис. 5. Зависимость сдвига центров линий HF-HF от вращательного квантового числа нижнего состояния: а) для холодных полос б) для горячих полос

нии поглощающей молекулы, обусловленное уменьшением вращательной постоянной, оказывает значительное влияние на релаксационные параметры линий. Как следствие, вращательные зависимости сдвига центров линий HF

имеют осциллирующий характер, наблюдается изменение знака сдвига. Ранее осциллирующие сдвиги описаны в [5] для линий HF-HF полосы 0–2, для линий H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O полосы 3ν<sub>1</sub>+ν<sub>3</sub> [17]. Полуширины линий HF-HF проявляют непо-

нотонную зависимость от вращательного квантового числа.

- Представленная в статье модель позволяет получить достоверные значения полуширины и сдвига центров линий холодных и горячих полос молекулы HF при сильном колебательном возбуждении вплоть до предела диссоциации.

#### 4. Заключение

Представлена модель и проведены расчеты полуширины и сдвига центров линий HF-HF при сильном колебательном возбуждении вплоть до предела диссоциации. Исследован адиабатический эффект и перестройка вращательного энергетического спектра при сильном колебательном возбуждении молекулы HF. Использование в качестве исходных данных *ab initio* или полуэмпирически рассчитанных функций мультипольных моментов, поляризуемости обеспечивает достоверность результатов расчета. Достоверность представленной модели подтверждается также совпадением с экспериментальными значениями полуширин и сдвига центров линий HF

[5–8] низколежащих КВ полос. Ранее подробный анализ колебательных и вращательных зависимостей полуширины и сдвига центров линий проводился только для молекулы H<sub>2</sub>O [8, 17, 19].

Необходимо отметить, что предлагаемая модель, использующая рассчитанные *ab initio* функции мультипольных моментов и поляризуемости, позволяет:

- анализировать колебательные и вращательные зависимости полуширины и сдвига центров линий высоколежащих холодных и горячих полос молекулы HF.
- получать достоверные значения полуширины и сдвига центров сотен линий молекулы HF для высоковозбужденных колебательных состояний вблизи диссоциационного предела.

Результаты расчетов могут быть использованы при построении кинетических моделей молекулярных лазерных сред, в фотохимии атмосферы, при создании баз данных спектроскопической информации.

*Автор благодарит д.ф.-м.н. А.Д. Быкова за полезные консультации и обсуждение результатов работы.*

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Boulet C., Robert D., Galatry L. Shifts of vibration-rotation absorption lines of diatomic molecules perturbed by diatomic polar molecules. A theoretical analysis // J. Chem. Phys. – 1976. – V. 65. – P. 5302–5314.
- Pine A.S., Looney J.P. N<sub>2</sub> and air broadening in the fundamental bands of HF and HCl // J. Mol. Spectrosc. – 1987. – V. 122. – P. 41–55.
- Grigoriev I.M., Doucen R.Le, Boissoles J., Cali B.I., Boulet C., Hartmann J.M., Bruet X., Dubernet M.L. Spectral lineshape parameters revisited for HF in a bath of argon. I. Widths and shifts in the (0-0), (0-1), and (0-2) bands // J. Mol. Spectrosc. – 1999. – V. 198. – P. 249–256.
- Boulet C., Hartmann J.M. Lineshape parameters for HF in a bath of argon as a test of classical path models // J. Chem. Phys. – 2000. – V. 113. – P. 9000–9010.
- Быков А.Д., Стройнова В.Н. Полуширина и сдвиг центров линий двухатомных молекул при сильном колебательном возбуждении // Оптика атмосферы и океана. – 2006. – Т. 19. – № 8. – С. 719–726.
- Bykov A.D., Stroynova V.N. Halfwidths and lineshifts caused by transitions into highly excited vibrational states of CO molecule // Proc. SPIE. – 2006. – V. 6580. – P. 65800F (11 p.).
- Lynch R., Gamache R.R., Neshiba S.P. N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> induced halfwidths and line shifts of water vapour transitions in the 301-000 and 221-000 bands // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 1998. – V. 59. – № 4. – P. 595–613.
- Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Стройнова В.Н. Анализ влияния колебательного возбуждения на полуширины линий H<sub>2</sub>O полос  $\nu_2$  // Оптика и спектроскопия. – 1988. – Т. 64. – С. 517–521.
- Зверева Н.А., Набиев Ш.Ш., Пономарев Ю.Н. Структура и свойства молекулярных комплексов воды с малыми газовыми составляющими атмосферы. – Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2003. – 139 с.
- Гордиец Б.Ф., Осипов А.И., Шелепин Л.А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. – М.: Наука, 1980. – С. 416–436.
- Ogilvie F., Rodwell W.R., Tipping R.H. Dipole moment function of the hydrogen halides // J. Chem. Phys. – 1980. – V. 73. – P. 5231–5229.
- Spirko V., Piecuch P., Condo A.E., Paldus J. Molecular quadrupole moment function of HF and N<sub>2</sub>. II. Rovibrational effects // J. Chem. Phys. – 1996. – V. 104. – P. 4716–4727.
- Buldakov M.A., Cherepanov V.N., Nagornova N.S. Polarizability functions of HF and HCl molecules // Proc. SPIE. – 2005. – V. 6160. – P. 51–56.
- Черкасов М.Р. Формализм квантовомеханического оператора Лиувилля в расчетах релаксационных параметров. – Томск: Изд-во ИОА СО АН СССР, 1975. – 47 с. (Препринт № 26).
- Варшавович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. – Л.: Наука, 1975. – 436 с.
- Huiszoon C. Ab initio calculations of multipole moments, polarizabilities and isotropic long range interaction coefficients for dimethylether, methanol, methane, and water // Molecular Physics. – 1986. – V. 88. – P. 865–885.
- Быков А.Д., Стройнова В.Н. Сдвиг центров линий поглощения H<sub>2</sub>O в диапазоне 13550–13950 см<sup>-1</sup> // Оптика атмосферы и океана. – 2006. – Т. 19. – № 1. – С. 31–38.
- Huber K.P., Herzberg G. Molecular spectra and molecular structure. IV. Constants of diatomic molecules. – N.Y.: Van Nostrand Reinhold Company, 1979. – 408 p.
- Стройнова В.Н. Расчеты коэффициентов уширения линий поглощения H<sub>2</sub>O в диапазоне 13550–13950 см<sup>-1</sup> // Оптика атмосферы и океана. – 2005. – Т. 18. – № 9. – С. 820–824.

*Поступила 20.11.2006 г.*