

Российская академия наук
Сибирское отделение

ОПТИКА АТМОСФЕРЫ И ОКЕАНА

Том 27, № 9 сентябрь, 2014

Научный журнал

Основан в январе 1988 года академиком В.Е. Зуевым

Выходит 12 раз в год

Главный редактор

доктор физ.-мат. наук Г.Г. Матвиенко

Заместители главного редактора

доктор физ.-мат. наук Б.Д. Белан,

доктор физ.-мат. наук Ю.Н. Пономарев

Ответственный секретарь

доктор физ.-мат. наук В.А. Погодаев

Редакционная коллегия

Багаев С.Н., академик РАН, Институт лазерной физики (ИЛФ) СО РАН, г. Новосибирск, Россия;

Банах В.А., д.ф.-м.н., Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева (ИОА) СО РАН, г. Томск, Россия;

Белов В.В., д.ф.-м.н., ИОА СО РАН, г. Томск, Россия;

Букин О.А., д.ф.-м.н., Дальневосточная морская академия им. адмирала Г.И. Невельского, г. Владивосток, Россия;

Голицын Г.С., академик РАН, Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова (ИФА) РАН, г. Москва, Россия;

Еланский Н.Ф., чл.-кор. РАН, ИФА РАН, г. Москва, Россия;

Землянов А.А., д.ф.-м.н., ИОА СО РАН, г. Томск, Россия;

Кандидов В.П., д.ф.-м.н., Международный лазерный центр МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия;

Кулмала М. (Kulmala M.), проф., руководитель Отдела атмосферных наук кафедры физики, Университет г. Хельсинки, Финляндия;

Лукин В.П., д.ф.-м.н., ИОА СО РАН, г. Томск, Россия;

Михайлов Г.А., чл.-кор. РАН, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск, Россия;

Павлов В.Е., д.ф.-м.н., Институт водных и экологических проблем СО РАН, г. Барнаул, Россия;

Панченко М.В., д.ф.-м.н., ИОА СО РАН, г. Томск, Россия;

Ражев А.М., д.ф.-м.н., ИЛФ СО РАН, г. Новосибирск, Россия;

Тарасенко В.Ф., д.ф.-м.н., Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия;

Шабанов В.Ф., академик РАН, Красноярский научный центр СО РАН, г. Красноярск, Россия;

Шайн К. (Shine K.P.), член Английской академии наук, королевский профессор метеорологических и климатических наук, Департамент метеорологии, Университет г. Рединга, Великобритания;

Циас Ф. (Ciais P.), проф., научный сотрудник Лаборатории климатических наук и окружающей среды совместного научно-исследовательского подразделения Комиссариата атомной энергии и Национального центра научных исследований (НЦНИ) Франции, г. Жиф-сюр-Иветт, Франция

Совет редколлегии

Борисов Ю.А., к.ф.-м.н., Центральная аэрологическая обсерватория, г. Долгопрудный Московской обл., Россия;

Заворуев В.В., д.б.н., Институт вычислительного моделирования СО РАН, г. Красноярск, Россия;

Ивлев Л.С., д.ф.-м.н., Научно-исследовательский институт физики им. В.А. Фока при СПбГУ, г. Санкт-Петербург, Россия;

Игнатьев А.Б., д.т.н., ГСКБ концерна ПВО «Алмаз-Антей» им. академика А.А. Расплетина, г. Москва, Россия;

Кабанов М.В., чл.-кор. РАН, Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск, Россия;

Михалев А.В., д.ф.-м.н., Институт солнечно-земной физики СО РАН, г. Иркутск, Россия;

Якубов В.П., д.ф.-м.н., Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Зав. редакцией С.Б. Пономарева

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН

Россия, 634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Адрес редакции: 634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Тел. (382-2) 49-24-31, 49-19-28; факс (382-2) 49-20-86

E-mail: psb@iao.ru

http://www.iao.ru

© Сибирское отделение РАН, 2014

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

Том 27, № 9 (308), с. 757–848

сентябрь, 2014 г.

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

- Перевалов В.И., Лукашевская А.А.** Параметризация матричных элементов оператора эффективного дипольного момента в случае молекул типа асимметричного волчка. Приложение к молекуле NO_2 759

ОПТИКА КЛАСТЕРОВ, АЭРОЗОЛЕЙ И ГИДРОЗОЛЕЙ

- Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Давыдов Д.К., Ивлев Г.А., Козлов А.В., Козлов А.С., Малышкин С.Б., Симоненков Д.В., Антохин П.Н.** Нуклеационные всплески в атмосфере бореальной зоны Западной Сибири. Часть I. Классификация и повторяемость 766
- Полькин В.В., Панченко М.В., Ужегов В.Н., Полькин Вас.В., Терпугова С.А.** О среднedisперсной фракции частиц приземного аэрозоля в переходный период «зима–весна». 775
- Банах В.А., Залозная И.В.** Обратное атмосферное рассеяние короткого светового импульса 782
- Ермолов Ю.В., Махатков И.Д., Худяев С.А.** Фоновые концентрации химических элементов в снежном покрове центрального сектора Западной Сибири. 790
- Суторихин И.А., Букатый В.И., Акулова О.Б.** Сезонные изменения спектральной прозрачности и концентрации хлорофилла *a* в разнотипных озерах 801
- Бурнашов А.В., Коношонкин А.В.** Рассеяние света на ледяных кристаллах перистых облаков вида «пуля» и «усеченная пуля» в условиях их преимущественной ориентации в пространстве 807

ДИСТАНЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ АТМОСФЕРЫ, ГИДРОСФЕРЫ И ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ

- Камардин А.П., Одинцов С.Л., Скорыходов А.В.** Идентификация внутренних гравитационных волн в атмосферном пограничном слое по данным содара 812
- Рокотян Н.В., Imasu R., Захаров В.И., Грибанов К.Г., Хаматнурова М.Ю.** Амплитуда сезонного цикла CO_2 в атмосфере Уральского региона по результатам наземного и спутникового ИК-зондирования 819
- Кашкин В.Б., Рублева Т.В.** Зональное движение масс озона в нижней стратосфере по спутниковым данным. 826

АТМОСФЕРНАЯ РАДИАЦИЯ, ОПТИЧЕСКАЯ ПОГОДА И КЛИМАТ

- Скворцов В.А., Чудненко К.В.** Термодинамическая модель эмиссии парниковых газов в атмосфере и изменение климата. 833

АППАРАТУРА И МЕТОДЫ ОПТИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

- Банах В.А., Смалихо И.Н., Rahm S.** Определение структурной характеристики показателя преломления воздуха из данных, измеряемых когерентным доплеровским лидаром. 841
- Зуев С.В., Гочаков А.В., Красненко Н.П., Колкер А.Б.** Применение RGB- и вейвлет-методов для инструментального определения общего балла облачности 846

CONTENTS

Vol. 27, No. 9 (308), p. 757–848

September 2014

Spectroscopy of ambient medium

- Perevalov V.I., Lukashevskaya A.A.** Parameterization of the effective dipole moment matrix elements in the case of asymmetric top molecules. Application to NO_2 molecule 759

Optics of clusters, aerosols, and hydrosols

- Arshinov M.Yu., Belan B.D., Davydov D.K., Ivlev G.A., Kozlov A.V., Kozlov A.S., Malyskin S.B., Simonenkov D.V., Antokhin P.N.** Nucleation bursts in the atmosphere over boreal zone in West Siberia. Part I. Classification and frequency 766
- Polkin V.V., Panchenko M.V., Uzhegov V.N., Polkin Vas.V., Terpugova S.A.** On medium-sized particles in the ground aerosol during the winter–spring change 775
- Banakh V.A., Zaloznaya I.V.** Atmospheric backscatter of a short optical pulse 782
- Ermolov Yu.V., Makhatkov I.D., Khudyaev S.A.** Background concentration of chemical elements in snow cover of the typical regions of the Western Siberia 790
- Sutorikhin I.A., Bukaty V.I., Akulova O.B.** Seasonal changes of water spectral transparency and concentration of chlorophyll *a* in different-type lakes 801
- Burnashov A.V., Konoshonkin A.V.** Scattering of the light on bullet and droxtal ice crystals of cirrus clouds preferably oriented in a horizontal plane with zenith flutter 807

Remote sensing of atmosphere, hydrosphere, and underlying surface

- Kamardin A.P., Odintsov S.L., Skorokhodov A.V.** Identification of internal gravity waves in the atmospheric boundary layer from sodar data 812
- Rokotyan N.V., Imasu R., Zakharov V.I., Griбанov K.G., Khamaturova M.Yu.** The amplitude of the CO_2 seasonal cycle in the atmosphere of Ural by ground-based and satellite remote sensing techniques 819
- Kashkin V.B., Rubleva T.V.** Estimation of zonal movement of ozone mass in the lower stratosphere based on satellite data 826

Atmospheric radiation, optical weather, and climate

- Skvortsov V.A., Chudnenko K.V.** Thermodynamical model of the emission greenhouse gases in the atmosphere and change of climate 833

Optical instrumentation

- Banakh V.A., Smalikho I.N., Rahm S.** Estimation of the structure characteristics of refractive index of air from a coherent Doppler wind lidar data 841
- Zuev S.V., Gochakov A.V., Krasnenko N.P., Kolker A.B.** Application of RGB- and wavelet methods for instrumental determination of total cloudiness 846

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 539.194

Параметризация матричных элементов оператора эффективного дипольного момента в случае молекул типа асимметричного волчка. Приложение к молекуле NO₂

В.И. Перевалов, А.А. Лукашевская*

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Поступила в редакцию 17.03.2014 г.

Предложена новая параметризация матричных элементов оператора эффективного дипольного момента для молекул типа асимметричного волчка. Она базируется на введении факторов Германа–Уоллиса для матричных элементов. Преимущество этой новой параметризации состоит в использовании параметров матричных элементов, которые явным образом описывают зависимость главного параметра от вращательных квантовых чисел J и K . Обсуждается применение этого подхода к молекуле NO₂ с незамкнутой электронной оболочкой.

Ключевые слова: интенсивность линии, матричные элементы эффективного дипольного момента, асимметричный волчок, двуокись азота, NO₂; line intensity, effective dipole moment matrix elements, asymmetric top, nitrogen dioxide, NO₂.

Введение

Для вычисления интенсивностей спектральных линий молекул типа асимметричного волчка в рамках метода эффективных операторов в настоящее время широко используется параметризация матричных элементов эффективного дипольного момента, предложенная Y.-M. Flaud и H.C. Camy-Peyret [1, 2]. Параметризация базируется на выражении для оператора Z -компоненты эффективного дипольного момента в пространственно-фиксированной системе координат в терминах декартовых компонент эффективного дипольного момента и оператора углового момента в молекулярно-фиксированной системе координат, а также направляющих косинусов.

В настоящей статье предложена модифицированная параметризация оператора эффективного дипольного момента. Она базируется на введении факторов Германа–Уоллиса для матричных элементов. Преимущество этой новой параметризации состоит в использовании параметров матричных элементов, которые явным образом описывают зависимость главного параметра от вращательных квантовых чисел J и K . Эта параметризация применена к молекуле NO₂ с незамкнутой электронной оболочкой.

* Валерий Иннокентьевич Перевалов (vip@lts.iao.ru), Анастасия Александровна Лукашевская (nastya_l@ibmail.com).

Интенсивность линии

Рассмотрим невозмущенную полосу симметричной трехатомной изогнутой вытянутой молекулы. Такая молекула имеет группу симметрии C_{2v} . Для этого типа молекул обычно используется представление I^r (рис. 1).

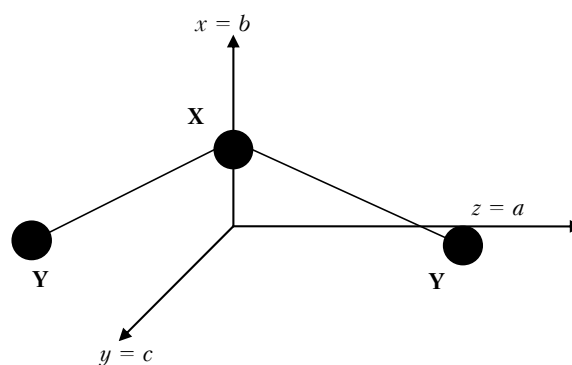


Рис. 1. Представление I^r для трехатомной изогнутой вытянутой молекулы XY₂

Интенсивность линии поглощения $S_{b \leftarrow a}(T)$ в см⁻¹/(молек. · см⁻²) на колебательно-вращательном переходе $b \leftarrow a$ дается хорошо известным выражением

$$S_{b \leftarrow a}(T) = \frac{8\pi^3}{3hc} C v_{b \leftarrow a} \frac{\exp(-hcE_a / kT)}{Q(T)} \times \\ \times [1 - \exp(-hcv_{b \leftarrow a} / kT)] W_{b \leftarrow a}, \quad (1)$$

где T — опорная температура; C — доля рассматриваемого изотопа в образце газа; $\nu_{b \leftarrow a}$ — волновое число, соответствующее колебательно-вращательно-му переходу $b \leftarrow a$; E_a — энергия нижнего состояния; c — скорость света; h — постоянная Планка; k — постоянная Больцмана; $Q(T)$ — статистическая сумма; $W_{b \leftarrow a}$ — квадрат момента перехода. В рамках метода эффективных операторов квадрат момента перехода между состояниями $V'J'K'_aK'_c \leftarrow \leftarrow VJK_aK_c$, которые задаются индексом колебательно-вращательного состояния V , вращательными квантовыми числами J и K_aK_c , дается следующим выражением:

$$\begin{aligned} W_{V'J'K'_aK'_c \leftarrow VJK_aK_c} &= \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{MM'} \left| \left\langle \Psi_{V'J'K'_aK'_cM'}^{eff} \left| M_{\alpha}^{eff} \right| \Psi_{VJK_aK_cM}^{eff} \right\rangle \right|^2 = \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{MM'} \left| \sum_{KK'} (V'J) C_{K'_aK'_c}^{K'} (VJ) C_{K_aK_c}^K \times \right. \\ &\quad \left. \times \langle V' | \langle J'K'M' | M_{\alpha}^{eff} | JKM \rangle | V \rangle \right|^2, \end{aligned} \quad (2)$$

где сумма берется по магнитным квантовым числам верхнего и нижнего состояний M и M' и по компонентам эффективного дипольного момента пространственно-фиксированной системы координат α . Коэффициенты разложения $(V'J) C_{K'_aK'_c}^{K'}$ определяют собственную функцию эффективного гамильтониана, соответствующую нижнему состоянию

$$\Psi_{VJK_aK_cM}^{eff} = \sum_K (VJ) C_{K_aK_c}^K |V\rangle |JKM\rangle. \quad (3)$$

Аналогично коэффициенты разложения $(V'J) C_{K'_aK'_c}^{K'}$ определяют собственную функцию эффективного гамильтониана, соответствующую верхнему состоянию. Здесь $|V\rangle$ и $|JKM\rangle$ — собственные функции гармонических осцилляторов и жесткого симметричного волчка. Мы используем сферические компоненты оператора эффективного дипольного момента и комбинации Ванга собственных функций жесткого симметричного волчка.

Компонента оператора эффективного дипольного момента в пространственно-фиксированной системе координат M_{α}^{eff} получается из компоненты дипольного момента M_{α} тем же самым унитарным преобразованием

$$M_{\alpha}^{eff} = e^{iS} M_{\alpha} e^{-iS}, \quad (4)$$

что и эффективный гамильтониан H^{eff} из колебательно-вращательного гамильтониана H_{VR} :

$$H^{eff} = e^{iS} H_{VR} e^{-iS}. \quad (5)$$

В соотношениях (2) и (4) α , β и γ нумеруют сферические компоненты оператора дипольного момента. В молекулярно-фиксированной системе координат эти компоненты определены как

$$\mu_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\mu_x + i\mu_y), \quad (6)$$

$$\mu_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mu_x - i\mu_y), \quad (7)$$

$$\mu_0 = \mu_z, \quad (8)$$

где μ_x, μ_y, μ_z — декартовы компоненты оператора дипольного момента. Соотношение (4) может быть представлено в следующем виде:

$$M_{\alpha}^{eff} = \frac{1}{2} \sum_{\beta=1,0,-1} \left[D_{\beta\alpha}^{(1)} \mu_{\beta}^{eff} \right]_{+} = \frac{1}{2} \sum_{\beta=1,0,-1} \left(D_{\beta\alpha}^{(1)} \mu_{\beta}^{eff} + \mu_{\beta}^{eff} D_{\beta\alpha}^{(1)} \right), \quad (9)$$

где $D_{\beta\alpha}^{(1)}$ — D -функции Вигнера; μ_{β}^{eff} — сферические компоненты эффективного дипольного момента в молекулярно-фиксированной системе координат. Эти компоненты для трехатомной изогнутой вытянутой молекулы симметрии C_{2v} (см. рис. 1) до квадратичных членов по угловому моменту представлены в Приложении I.

После вычисления матричных элементов в соотношении (2) с использованием соотношения (9) и соотношений, представленных в Приложении I, и после суммирования по индексам α , M и M' получаем следующее выражение для квадрата момента перехода:

$$\begin{aligned} W_{V'J'K'_aK'_c \leftarrow VJK_aK_c} &= \\ &= (2J+1) \left| \sum_{K\Delta K} (V'J) C_{K'_aK'_c}^{K+\Delta K} (VJ) C_{K_aK_c}^K M_{\Delta V}^{|\Delta K|} \times \right. \\ &\quad \left. \times (1 + F_{\Delta J\Delta K}^{\Delta V}(J, K)) \Phi_{\Delta J\Delta K}(J, K) \right|^2. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $\Phi_{\Delta J\Delta K}(J, K)$ равен коэффициенту Клебша—Гордана $(1\Delta K J K | J + \Delta J K + \Delta K)$ для $\Delta K = 0, \pm 1$. Выражения для $\Delta K = \pm 2$ и $\Delta K = \pm 3$ представлены в Приложении II, а выражения для функций типа Германа—Уоллиса $F_{\Delta J\Delta K}^{\Delta V}(J, K)$ даны ниже. Для кратности здесь и далее мы используем обозначение $|\Delta V\rangle \equiv |\Delta V_1 \Delta V_2 \Delta V_3\rangle$. В случае трехатомных изогнутых вытянутых молекул симметрии C_{2v} существуют следующие правила отбора для матричных элементов оператора эффективного дипольного момента:

$$\Delta K = 0, 2, 4, \dots \text{ для } \Delta V_3 = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$$

и

$$\Delta K = 1, 3, 5, \dots \text{ для } \Delta V_3 = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$$

Таким образом, для трехатомных изогнутых вытянутых молекул симметрии C_{2v} для полос с нечетным значением $|\Delta V_3|$ существуют ненулевые матричные элементы только с четным значением $|\Delta K|$.