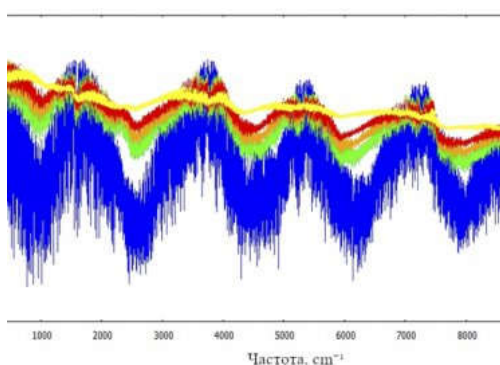


## ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИПФ РАН)

3 апреля 2019 г., 15:37

### Молекулярные спектры для анализа атмосфер Солнечной системы и экзопланет



В ИПФ РАН в сотрудничестве с Университетским колледжем Лондона разработан метод получения рекордной точности глобальных (вплоть до диссоциации) расчетов спектров легких молекул. Такие спектры нужны для более точного прогнозирования погоды и климатических изменений на Земле, контроля загрязнений нашей атмосферы, определения химического состава атмосфер экзопланет, поиска планет пригодных для жизни или таких на которых в настоящее время может быть жизнь.

Предложенный нами метод, позволил провести высокоточные расчеты всевозможных движений важнейших атмосферных молекул ( $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $O_3$ ,  $NH_3$ ,  $HCN$ ,  $H_2O_2$ ) и рассчитать списки, содержащие миллионы линий, большинство которых невозможно измерить экспериментально. Удалось достичь такую точность расчетов частот линий, которая близка к точности эксперимента, а погрешность расчетов интенсивностей оказывается в большинстве случаев меньше погрешности лучших лабораторных измерений. Подтверждением качества рассчитанных спектров является, то, что они прошли экспертную оценку и включены в общедоступные мировые базы спектроскопических данных HITRAN [<http://hitran.org>] и ExoMol [<http://exomol.com>].

Одним из основных направлений фундаментальной молекулярной спектроскопии, результатами которого пользуются прикладные науки, является создание списков линий поглощения различных молекул. Для атмосферных приложений это весьма простые малоатомные молекулы. При исследовании атмосферы Земли это, в основном, азот  $N_2$  и кислород  $O_2$ , а также вода  $H_2O$ , углекислый газ  $CO_2$ , озон  $O_3$ , оксиды азота  $NO$  и  $NO_2$ , угарный газ  $CO$  и более редкие примеси такие, как аммиак  $NH_3$ , метан  $CH_4$  и т. д. Для изучения планет солнечной системы и экзопланет необходимы еще более «экзотичные» молекулы: синильная кислота  $HCN$ , перекись водорода  $H_2O_2$ , фосфин  $PH_3$ , ацетилен  $C_2H_2$ , этилен  $C_2H_4$ , и т. д. Все это молекулы, содержащие не больше 5-6 атомов, и их спектры можно рассчитывать численными методами на современных суперкомпьютерах.

Требования к точности расчета атмосферного поглощения растут с повышением технических возможностей глобального мониторинга атмосферы с помощью действующих (MIPAS, OCO-2, SCISAT-1, ENVISAT и др.) и подготавливаемых спутниковых миссий (TEMPO-8 и др.). Для интерпретации спутниковых измерений нужны списки молекулярных линий, которые можно найти в спектроскопических базах данных, наиболее точной и полной из которых для атмосферы Земли является HITRAN (**H**igh **R**esolution **T**ransmission) [<http://hitran.org>]. Для дистанционного зондирования атмосфер других планет Солнечной системы и экзопланет создают специализированные базы данных, которые предъявляют более высокие требования к спискам линий из-за необходимости моделирования спектров при высоких температурах (до тысяч градусов). Одним из наиболее известных источников достоверной спектроскопической информации такого рода является база ExoMol [<http://exomol.com>].

Зобов Н.Ф., кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ИПФ РАН

На графике: Поглощение молекулой воды в диапазоне до 1 мкм при разных температурах.

[Фото: ИПФ РАН]

☛ атмосфера экзопланет, ипф ран, метод расчета спектра легких молекул, молекулярных спектры, ран, солнечная система, экзопланеты