

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 539.194

Расчет коэффициентов уширения линий оксида серы в перпендикулярной полосе $\nu_1 + \nu_3$ давлением углекислого газа при комнатной температуре

Т.А. Невзорова^{1, 2}, А.С. Дударенок^{✉ 2}, Н.А. Лаврентьев²,
Н.Н. Лаврентьева^{2*}

¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36*

² *Институт оптики атмосферы им. В.Е.Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 31.10.2022 г.;
после доработки 14.12.2022 г.;
принята к печати 21.12.2022 г.

Представлены рассчитанные при комнатной температуре коэффициенты уширения углекислым газом линий оксида серы для всех возможных переходов в полосе $\nu_1 + \nu_3$ с вращательными квантовыми числами J и K_a , изменяющимися от 0 до 100 и от 0 до 20 соответственно. На основе анализа экспериментальных данных получены параметры полуэмпирического метода; результаты расчетов находятся в хорошем согласии с литературными данными.

Ключевые слова: параметры контура линий, уширение линий, оксид серы, углекислый газ; line profile parameters, line-broadening, sulfur dioxide, carbon dioxide.

Введение

Оксид серы (диоксид серы, сернистый газ) SO_2 является одним из газов, загрязняющих атмосферу Земли, и имеет неоспоримое значение для химии земной атмосферы, участвуя в круговороте серы. Большие количества SO_2 выбрасываются в воздух при извержении вулканов, разливе нефти, добыче угля, а также при производстве серной кислоты и выплавке металлов. В результате химических реакций с участием кислорода и водяного пара сернистый газ преобразуется в серную кислоту, что может приводить к образованию кислотных дождей. Оксид серы найден в атмосфере Венеры (150 ppm) [1, 2], спутника Юпитера Ио (более 90%) [3], а также на Марсе (в незначительных количествах) [4]. Диоксид серы обнаружен в межзвездной среде и околозвездных оболочках [5].

Параметры контура спектральных линий оксида серы важны в задачах дистанционного зондирования атмосферных газов и мониторинга состояния окружающей среды. В частности, при исследовании динамики SO_2 и CO_2 в случае вулканической активности при регистрации солнечных спектров

с помощью наземных станций на основе Фурье-спектрометров необходимы коэффициенты уширения линий SO_2 основными атмосферными газами, такими как азот, кислород и CO_2 .

Экспериментальные исследования уширения линий молекулы оксида серы давлением углекислого газа представлены в работах [6–8], проведенные расчеты описаны в [6, 9, 10]. В публикации [6] измерено только одно значение для линии $9\ 1\ 9 \leftarrow 8\ 2\ 6$, а также проведены оценки с использованием теории Андерсона–Тсао–Карнатта. В [7] представлены измеренные полуширины для 47 колебательно-вращательных переходов основной изотопической модификации $^{32}\text{SO}_2$ и для семи переходов модификации $^{34}\text{SO}_2$ в полосе поглощения ν_1 . В [9] приведены значения для 41 колебательно-вращательного перехода полосы ν_1 , рассчитанные с использованием полуэмпирического (ПЭ) метода и метода средних частот. Наиболее масштабный массив экспериментальных данных получен в работе [8]: сообщаются параметры для ~1500 колебательно-вращательных переходов изотопических модификаций $^{32}\text{SO}_2$ и $^{34}\text{SO}_2$ в полосах $\nu_1 + \nu_3$ и $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2$. В [10] представлены вычисленные по ПЭ-методу коэффициенты уширения линий R -ветви для 621 перехода из [8].

В 2016 г. к параметрам самоуширения и уширения линий воздухом в банк спектроскопических данных HITRAN добавлены параметры уширения

* Татьяна Алексеевна Невзорова (taalen@iao.ru); Анна Сергеевна Дударенок (dudaryon@iao.ru); Николай Александрович Лаврентьев (lnick@iao.ru); Нина Николаевна Лаврентьева (lnn@iao.ru).

углекислым газом линий для шести молекул, включая оксид серы [11]. При последнем обновлении [12] в банк помещены экспериментальные значения полуширин $\text{SO}_2\text{--CO}_2$ [8] и значения, основанные на вычислениях по полуэмпирическому методу [9].

1. Методика расчетов

Поглощающая частица SO_2 представляет собой полярную асимметричную молекулу с достаточно большим дипольным моментом, равным 1,61 Д [13]. Молекула термостата CO_2 является линейной неполярной молекулой, имеющей квадрупольный момент 6,8 Д · Å [15]. Из вышесказанного следует, что между молекулами SO_2 и CO_2 происходят так называемые сильные взаимодействия диполь-квадрупольного типа, которые вносят определяющий вклад в величину уширения линий.

Расчеты полуширин линий $\text{SO}_2\text{--CO}_2$ проводились полуэмпирическим методом [13], развитым для случая сильных взаимодействий, когда расстояние наибольшего сближения молекул r_c меньше параметра прерывания из теории Андерсона–Цао–Карнатта b_0 . В этом случае прерывание поглощения на данной частоте происходит до того, как траектория относительного движения молекул становится нелинейной. Взаимодействие сильного диполя поглощающей молекулы с квадруполем молекулы буферного газа обеспечивает выполнение условия $r_c < b_0$, влияние короткодействующих сил в этом случае слабое и учитывается с помощью корректирующего фактора. Для сильных взаимодействий можно применять следующие упрощения: 1) приближение ударных столкновений, при которых продолжительность взаимодействия мала по сравнению со временем свободного пробега молекул, 2) приближение бинарных столкновений, 3) приближение классических траекторий при описании поступательного движения частиц, 4) спектральные линии рассматриваются как изолированные, т.е. интерференция линий не учитывается.

Полуэмпирический метод детально описан в работе [14], здесь мы приводим краткое описание. При допущенных приближениях и приближении прямолинейной траектории общее выражение для полуширины спектральной линии радиационного перехода $f \leftarrow i$ может быть записано в следующем виде:

$$\gamma_{fi} = A(f, i) + \sum_l \sum_{i'} D^2(i'i'|l) P_l^A(\omega_{i'}) + \sum_l \sum_{f'} D^2(ff'|l) P_l^A(\omega_{f'}), \quad (1)$$

где $A(f, i) = \frac{n}{c} \sum_r \rho(r) \int_0^\infty v dv v_0^2(v, r, i, f)$ – обычное слагаемое теории Андерсона, обусловленное прерыванием. Силы переходов $D^2(i'i'|l)$ и $D^2(ff'|l)$ для каналов рассеяния $i \rightarrow i'$, $f \rightarrow f'$ определяются только свойствами поглощающей молекулы. Члены с $l = 1$ относятся к дипольным переходам, с $l = 2$ –

к переходам квадрупольного типа. Коэффициенты разложения $P_l^A(\omega_{i'})$ и $P_l^A(\omega_{f'})$, называемые «эффективностями» каналов рассеяния, зависят от взаимодействия поглощающей и возмущающей молекул (потенциала, траектории, колебательно-вращательных уровней, волновых функций). Функция эффективности взаимодействий $P_l^A(\omega_{i'})$ [13] может быть записана в следующем виде:

$$P_l^A(\omega_{i'}) = \frac{n}{c} \sum_r \rho(r) \sum_{l_r, r'} A_{l_r} D^2(rr'|l_r) F_{l_r} \times \left(\frac{2\pi c b_0(r, i, f)}{v} (\omega_{i'} + \omega_{r'}) \right), \quad (2)$$

$P_l^A(\omega_{f'})$ получается заменой $i'i'$ на ff' . Здесь rr' – квантовые числа (индекс r относится к буферной молекуле), l_r характеризует тип мультиполей молекулы термостата. Функции эффективности могут быть представлены как произведение функций эффективности из теории Андерсона и поправочного множителя, форма которого подбирается в зависимости от рассматриваемой молекулярной системы. Для случая $\text{SO}_2\text{--CO}_2$ корректирующий фактор выбран в виде трехпараметрического выражения

$$C(J, K_a) = \frac{c_1 + c_3 K_a}{c_2 \sqrt{J} + 1}, \quad (3)$$

где c_1, c_2, c_3 – подгоночные параметры [10]. Все расчеты выполнены для температуры $T = 296$ К.

В результате анализа литературных данных для определения параметров полуэмпирической модели выбраны полуширины линий R -ветви из работы [8] – по четыре перехода с «малыми», «средними» и «высокими» вращательными квантовыми числами J для каждого K_a от 0 до 17 и по два перехода для $K_a = 18\text{--}20$. Полученные для R -ветви [10] параметры модели ($c_1 = 1,0$; $c_2 = 0,05$; $c_3 = 0,09$) для начального и конечного состояний основной молекулы применялись также и для вычислений в P - и Q -ветвях. Коэффициенты уширения линий, рассчитанные с использованием $C(J, K_a)$, отличаются от полученных значений без корректирующего фактора (т.е. при $c_1 = 1,0$; $c_2 = 0,0$; $c_3 = 0,0$) менее чем на пять процентов для ~40% переходов, при этом отличие растет с увеличением J для малых значений K_a и остается примерно постоянным при изменении J для больших значений K_a .

Для расчета уровней энергии оксида серы в основном состоянии и состоянии (101) использовалась модель эффективного гамильтониана, спектроскопические постоянные модели взяты из [14, 15]. Необходимые при вычислениях параметры межмолекулярного потенциала взаимодействий молекул оксида серы и диоксида углерода даны в табл. 1.

В расчетах учитывались диполь-квадрупольные, квадруполь-квадрупольные, а также индукционные и дисперсионные части межмолекулярного потенциала. Основной вклад в уширение углекислым газом линий оксида серы вносит диполь-квадрупольное взаимодействие. Вклад квадруполь-квадрупольного

Таблица 1

Используемые в расчетах параметры потенциала молекул SO₂ и CO₂

Молекула	Потенциал ионизации, эВ	Средняя дипольная поляризуемость, Å ³	Дипольный момент, Д	Квадрупольный момент, Д·Å
SO ₂	12,34 [16]	3,78 [16]	1,61 [16]	4,4 [17]
CO ₂	13,79 [16]	2,59 [16]	0,0	-4,02 [18]

и поляризационного взаимодействий в величины полуширин линий составляет менее 2 и 0,2% соответственно.

При вычислениях использованы некоторые упрощения: в результате тестирования расчетной программы получено, что вкладом каналов рассеяния [19] при $\Delta K_a \geq 4$ для молекулы SO₂ можно пренебречь, а также ограничиться вращательными квантовыми числами буферной молекулы до $r = 60$ (для молекулы CO₂ заселенность уровня $\rho(60) = 0,00045$).

2. Обсуждение результатов

В Приложении (https://ao.iao.ru/auxiliary/36-02-01/SO2-CO2_Nitran.txt, https://ao.iao.ru/auxiliary/36-02-01/SO2-CO2_J=0-100.txt) приведены два списка рассчитанных по полуэмпирическому методу полуширин линий. В первом списке содержатся данные для всех переходов А-типа, представленных в HITRAN. Во втором списке даны результаты расчетов для всех возможных переходов в P-, Q-, R-ветвях перпендикулярной полосы $\nu_1 + \nu_3$ (вращательные квантовые числа $J = 0-100$, $K_a = 0-20$, $|\Delta K_a| = 0, 2, 4$), пример для P-ветви и $K_a = 0$, $\Delta K_a = 0$ приведен в табл. 2. Совокупность вычисленных вращательных зависимостей для P-ветви при нескольких квантовых числах K_a и $\Delta K_a = 0$ показана на рис. 1.

На рис. 2 приведены вычисленные нами и измеренные [8] полуширины линий оксида серы в полосе $\nu + \nu_3$ в зависимости от номера линии (нуме-

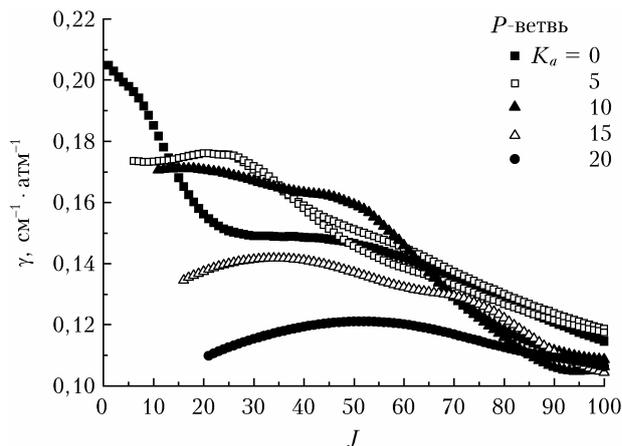


Рис. 1. Вычисленные коэффициенты уширения линий SO₂ давлением CO₂ для случая $\Delta K_a = 0$ в зависимости от вращательного квантового числа J

рация соответствует увеличению частоты перехода). Для большинства переходов согласие между теоретическими и экспериментальными параметрами находится в пределах 5%, среднеквадратичные отклонения (СКО) для всех переходов P- и Q-ветвей по отдельности составляют 0,0088 и 0,0106 см⁻¹·атм⁻¹. Для более детального сравнения мы представили данные для P-ветви (рис. 3, а) и Q-ветви (рис. 3, б) отдельно для каждого K_a аналогично тому, как это сделано на рис. 1 (R-ветвь) в работе [10]. Все переходы из [8] были разделены на группы с одинаковыми значениями K_a , для каждой группы в табл. 3 приведены число переходов, минимальные и максимальные квантовые числа J и величины СКО.

Представленные в [7] измеренные коэффициенты уширения линий существенно ниже полученных в [8] и наших величин (при одинаковых вращательных квантовых числах J и K_a и для одного типа ветви). Например, для линии 16 14 2 ← 16 15 1 полуширина равна 0,0916(38) см⁻¹·атм⁻¹ [7], 16 15 2 ← 16 15 1 = 0,1339(2) см⁻¹·атм⁻¹ [8], 0,1350 см⁻¹·атм⁻¹ (ПЭ-расчет), для линии

Таблица 2

Коэффициенты уширения γ линий SO ₂ давлением CO ₂ для перпендикулярных полос					
$J' K'_a K'_c \leftarrow J'' K''_a K''_c$	γ , см ⁻¹ ·атм ⁻¹	$J' K'_a K'_c \leftarrow J'' K''_a K''_c$	γ , см ⁻¹ ·атм ⁻¹	$J' K'_a K'_c \leftarrow J'' K''_a K''_c$	γ , см ⁻¹ ·атм ⁻¹
1 0 1 ← 2 0 2	0,2030	35 0 35 ← 36 0 36	0,1488	69 0 69 ← 70 0 70	0,1353
3 0 3 ← 4 0 4	0,1994	37 0 37 ← 38 0 38	0,1489	71 0 71 ← 72 0 72	0,1337
5 0 5 ← 6 0 6	0,1963	39 0 39 ← 40 0 40	0,1486	73 0 73 ← 74 0 74	0,1322
7 0 7 ← 8 0 8	0,1915	41 0 41 ← 42 0 42	0,1484	75 0 75 ← 76 0 76	0,1309
9 0 9 ← 10 0 10	0,1852	43 0 43 ← 44 0 44	0,1482	77 0 77 ← 78 0 78	0,1293
11 0 11 ← 12 0 12	0,1781	45 0 45 ← 46 0 46	0,1477	79 0 79 ← 80 0 80	0,1278
13 0 13 ← 14 0 14	0,1712	47 0 47 ← 48 0 48	0,1473	81 0 81 ← 82 0 82	0,1264
15 0 15 ← 16 0 16	0,1652	49 0 49 ← 50 0 50	0,1466	83 0 83 ← 84 0 84	0,1249
17 0 17 ← 18 0 18	0,1602	51 0 51 ← 52 0 52	0,1458	85 0 85 ← 86 0 86	0,1235
19 0 19 ← 20 0 20	0,1562	53 0 53 ← 54 0 54	0,1451	87 0 87 ← 88 0 88	0,1221
21 0 21 ← 22 0 22	0,1534	55 0 55 ← 56 0 56	0,1440	89 0 89 ← 90 0 90	0,1207
23 0 23 ← 24 0 24	0,1514	57 0 57 ← 58 0 58	0,1429	91 0 91 ← 92 0 92	0,1195
25 0 25 ← 26 0 26	0,1503	59 0 59 ← 60 0 60	0,1419	93 0 93 ← 94 0 94	0,1181
27 0 27 ← 28 0 28	0,1496	61 0 61 ← 62 0 62	0,1406	95 0 95 ← 96 0 96	0,1169
29 0 29 ← 30 0 30	0,1491	63 0 63 ← 64 0 64	0,1394	97 0 97 ← 98 0 98	0,1158
31 0 31 ← 32 0 32	0,1490	65 0 65 ← 66 0 66	0,1381	99 0 99 ← 100 0 100	0,1146
33 0 33 ← 34 0 34	0,1489	67 0 67 ← 68 0 68	0,1366		

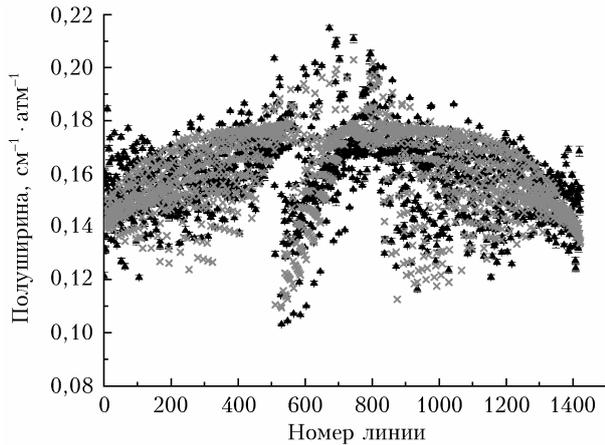


Рис. 2. Вычисленные (крестики) и измеренные [8] (треугольники) коэффициенты уширения линий SO_2 давлением CO_2 в полосе $\nu_1 + \nu_3$

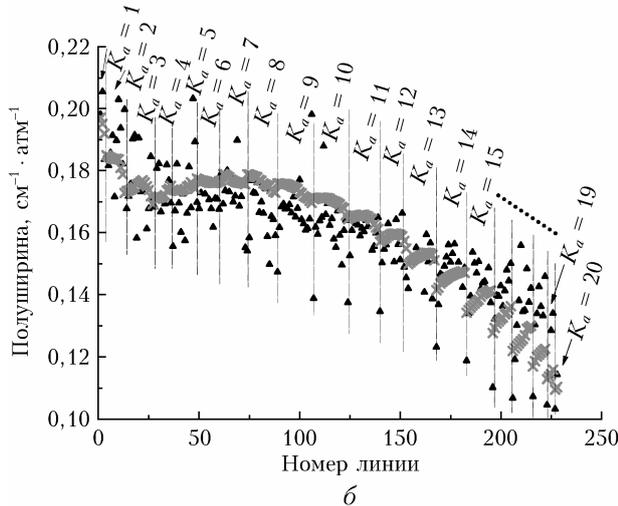
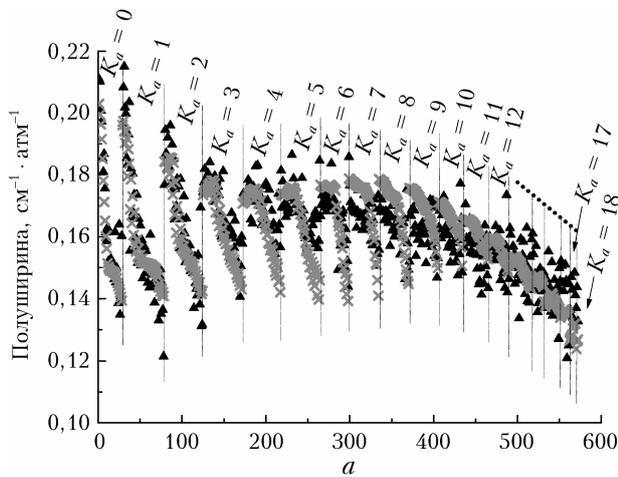


Рис. 3. Вычисленные (крестики) и измеренные [8] (треугольники) коэффициенты уширения линий SO_2 давлением CO_2 для случая $\Delta K_a = 0$ для P -ветви (а) и Q -ветви (б)

23 14 10 ← 23 15 9 — $0,12085(94) \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ [7],
 23 15 8 ← 23 15 9 — $0,1419(2) \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ [8],
 $0,1394 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ (ПЭ-расчет). Возможно, большие отличия связаны с тем, что в [7] рассмотрены данные в параллельной полосе ν_1 (переходы В-типа),

Таблица 3

Среднеквадратичные отклонения рассчитанных и измеренных [8] коэффициентов уширения линий SO_2 давлением CO_2 для P - и Q -ветвей

K_a	Число переходов	$J_{\text{мин}} - J_{\text{макс}}$	СКО, $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$
<i>P-ветвь</i>			
0	28	2–64	0,0083
1	50	3–65	0,0080
2	46	3–63	0,0080
3	47	5–63	0,0070
4	46	5–60	0,0088
5	47	6–59	0,0109
6	34	8–56	0,0077
7	36	9–56	0,0098
8	36	9–57	0,0102
9	35	10–56	0,0100
10	29	13–57	0,0089
11	31	13–55	0,0081
12	24	17–56	0,0066
13	26	16–52	0,0075
14	17	17–53	0,0076
15	18	20–51	0,0074
16	11	26–48	0,0118
17	8	24–42	0,0131
18	3	29–37	0,0131
<i>Q-ветвь</i>			
1	3	3–7	0,0077
2	10	2–19	0,0124
3	14	3–25	0,0104
4	9	4–17	0,0063
5	12	5–27	0,0133
6	13	6–23	0,0069
7	12	9–30	0,0086
8	15	8–34	0,0131
9	18	9–32	0,0123
10	17	10–33	0,0124
11	16	11–34	0,0086
12	14	12–38	0,0084
13	14	14–37	0,0059
14	15	14–35	0,0071
15	13	15–29	0,0090
16	10	16–33	0,0106
17	10	17–30	0,0147
18	7	18–26	0,0160
19	4	19–23	0,0122
20	2	20–21	0,0052

а в [8] и в нашей работе — данные в перпендикулярной полосе $\nu_1 + \nu_3$ (переходы А-типа). Для более детального установления причин расхождения требуются дополнительные исследования в параллельных полосах поглощения.

Заключение

Полуэмпирический метод применен для вычисления параметров уширения линий полярной молекулы оксида серы давлением углекислого газа для большого числа колебательно-вращательных переходов А-типа. Диапазон вращательных квантовых чисел

полуширин линий, представленных нами в предыдущей работе [10], расширен в соответствии с диапазоном квантовых чисел банка спектроскопических данных HITRAN. Параметры для большинства переходов получены впервые.

Сравнение рассчитанных в работе полуширин линий с имеющимися литературными данными демонстрирует хорошее согласие для перпендикулярной полосы. Для проверки возможности использования полученных величин в других полосах поглощения требуются новые измерения параметров уширения линий.

В связи с отсутствием данных при температурах, отличных от комнатной, для решения задач атмосферной физики необходимы дальнейшие вычисления коэффициентов уширения линий оксида серы давлением углекислого газа при температурах земной атмосферы.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

Список литературы

1. Bézard B., Bergh C., Fegley B., Maillard J.-P., Crisp D., Owen T., Pollack J.B., Grinspoon D. The abundance of sulfur dioxide below the clouds of Venus // *Geophys. Res. Lett.* 1993. V. 20, N 15. P. 1587–1590.
2. Marcq E., Bertaux J.-L., Montmessin F., Belyaev D. Variations of sulphur dioxide at the cloud top of Venus's dynamic atmosphere // *Nat. Geosci.* 2013. V. 6, N 1. P. 25–28.
3. Roth L., Boissier J., Moullet A., Sánchez-Monge A., Kleer K., Yoneda M., Hikida R. An attempt to detect transient changes in Io's SO₂ and NaCl atmosphere // *Icarus*. 2020. V. 350. P. 113925.
4. Khayat A., Villanueva G., Mumma M., Tokunaga A. A search for and above Tharsis and Syrtis volcanic districts on Mars using ground-based high-resolution submillimeter spectroscopy // *Icarus*. 2015. V. 253. P. 130–141.
5. Herbst E., Dishoeck E.F. Complex organic interstellar molecules // *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 2009. V. 47. P. 427–480.
6. Krishnaji, Chandra S. Molecular interaction and line-width of the asymmetric molecule SO₂. II. SO₂–CO₂ collisions // *J. Chem. Phys.* 1963. V. 38, N 4. P. 1019–1021.
7. Ceselin G., Tasinato N., Puzzarini C., Charmet A.P., Stoppa P., Giorgianni S. CO₂, He- and H₂-broadening coefficients of SO₂ for ν₁ band and ground state transitions for astrophysical applications // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2017. V. 203. P. 367–376.
8. Borkov Yu.G., Lyulin O.M., Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A., Deichuli V.M., Perevalov V.I. CO₂-broadening and shift coefficients of sulfur dioxide near 4 μm // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2019. V. 225. P. 119–124.
9. Dudaryonok A.S., Lavrentieva N.N. Theoretical estimation of SO₂ line broadening coefficients induced by carbon dioxide in the 150–300 K temperature range // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2018. V. 219. P. 360–365.
10. Dudaryonok A.S., Nevzorova T.A., Lavrentiev N.A., Lavrentieva N.N. Calculation of SO₂–CO₂ line broadening coefficients // *Proc. SPIE*. 2022. V. 12341. DOI: 10.1117/12.2645079.
11. Wilzewski J.S., Gordon I., Kochanov R.V., Hill C., Rothman L.S. H₂, He, and CO₂ line-broadening coefficients, pressure shifts and temperature-dependence exponents for the HITRAN database. Part 1: SO₂, NH₃, HF, HCl, OCS and C₂H₂ // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2016. V. 168. P. 193–206.
12. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hashemi R., Karlovets E.V., Skinner F.M., Conway E.K., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Wcislo P., Finenko A.A., Nelson K., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Coustenis A., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Mlawer E.J., Nikitin A.V., Perevalov V.I., Rotger M., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Canu E., Császár A.G., Dudaryonok A., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbaey H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneman V.-M., Huang X., Karman T., Karns J., Kassi S., Kleiner I., Kofman V., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N.N., Lee T.J., Long D.A., Lukashovskaya A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Mondelain D., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Perin A., Polyansky O.L., Raddaoui E., Raston P.L., Reed Z.D., Rey M., Richard C., Tybías R., Sadiek I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Auwera J.V., Vasilenko I.A., Viganin A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2022. V. 277, N 1. 107949.
13. Müller H.S.P., Brumken S. Accurate rotational spectroscopy of sulfur dioxide, SO₂, in its ground vibrational and first excited bending states, ν₂ = 0, 1, up to 2 THz // *J. Mol. Spectrosc.* 2005. V. 232, N 2. P. 213–222.
14. Bykov A.D., Lavrentieva N.N., Sinitsa L.N. Semi-empirical approach of the calculation of H₂O and CO₂ line broadening and shifting // *Mol. Phys.* 2004. V. 102, N 14–15. P. 1653–1658.
15. Lafferty W.J., Pine A.S., Hilpert G., Sams R.L., Flaud J.-M. The ν₁ + ν₃ and 2ν₁ + ν₃ band systems of SO₂: Line positions and intensities // *J. Mol. Spectrosc.* 1996. V. 176, N 2. P. 280–286.
16. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 280 с.
17. Gray C.G., Gubbins K.E. Theory of Molecular Fluids, Volume 1: Fundamentals. Oxford: Clarendon Press, 1984. 626 p.
18. Graham C., Pierrus J., Raab R.E. Measurement of the electric quadrupole moments of CO₂, CO and N₂ // *Mol. Phys.* 1989. V. 67, N 4. P. 939–955.
19. Быков А.Д., Лаврентьева Н.Н., Синица Л.Н. Сдвиги линий H₂O давлением азота, кислорода и воздуха в ударной теории Андерсона // *Оптика атмосф. и океана*. 1999. Т. 12, № 10. С. 959–966.

T.A. Nevzorova, A.S. Dudaryonok, N.A. Lavrentiev, N.N. Lavrentieva. Calculation of carbon dioxide broadening coefficients of sulfur dioxide lines in the ν₁ + ν₃ A-type band at room temperature.

Calculated carbon dioxide broadening coefficients of sulfur dioxide lines at a room temperature are presented. The calculations are performed for the ν₁ + ν₃ band, rotational quantum numbers vary in the ranges of J up to 100 and of K_a up to 20. Based on the experimental data the semi-empirical method parameters are determined; the computed broadening coefficients are in good agreement with the literature data.