

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 539.194

Анализ экспериментальных частот переходов молекулы ^{16}OH в состоянии $X^2\Pi$ с помощью принципа Ритца

О.Н. Сулакшина, Ю.Г. Борков*

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

Поступила в редакцию 14.03.2019 г.

Выполнен критический анализ доступных экспериментальных данных для частот вращательных и колебательно-вращательных переходов молекулы OH в основном электронном состоянии $X^2\Pi$ с помощью комбинированного принципа Ритца. Частоты переходов, взвешенные в соответствии с экспериментальными погрешностями, были обработаны программным кодом РИТЦ. Анализ безразмерных взвешенных отклонений позволил исключить «плохие частоты» из рассмотрения и провести обработку со стандартным отклонением 1,8. В результате был получен набор из 1056 экспериментальных РИТЦ-уровней энергии с соответствующей погрешностью для каждого уровня. Проведено сравнение найденных эмпирических РИТЦ-уровней энергий с рассчитанными уровнями, приведенными в базе спектроскопической информации HITRAN.

Ключевые слова: экспериментальные частоты переходов, молекула ^{16}OH , состояние $X^2\Pi$, принцип Ритца; measured transition frequencies, OH molecule, ground electronic state, Ritz principle.

Введение

Радикал OH является одним из самых распространенных радикалов в атмосфере. В силу своей высокой реактивности он играет важную роль в химии атмосферы. Гидроксил не имеет прямых природных и антропогенных источников, а образуется непосредственно в воздухе из примесей-прекурсоров [1]. За исключительно высокую окислительную способность его называют чистильщиком тропосферы [2]. Гидроксил также обнаружен в звездах [3], межзвездных облаках [4], во внеземных атмосферах [5, 6] и часто наблюдается в относительно больших концентрациях в пламенах [7–9]. Спектроскопическая информация по радикалу OH важна для понимания широкого круга физических и химических процессов, протекающих в атмосфере. Поскольку спектр молекулы – единственный в своем роде источник полных и надежных данных о ее внутренних состояниях и физико-химических свойствах, то необходимым и важным остается его тщательный анализ.

Радикал OH , находящийся в основном электронном состоянии $^2\Pi$, характеризуется единичной проекцией орбитального момента электронов на межъядерную ось (квантовое число Λ) и суммарным спином (квантовое число Σ), равным $1/2$. Состояние $^2\Pi$ представляет собой мультиплет из двух компонент $^2\Pi_{3/2}$ и $^2\Pi_{1/2}$, имеющих проекцию полного электронного момента относительно межъядерной

оси, которая обозначается $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$ и может принимать значения $3/2$ и $1/2$. Расщепление дублета на две компоненты происходит за счет спин-орбитального взаимодействия. Каждая компонента дублета, в свою очередь, остается дважды вырожденной по знаку Λ (Λ -удвоение). Колебательно-вращательный спектр молекулы в этом случае состоит из спектра для состояния $^2\Pi_{3/2}$ и спектра для состояния $^2\Pi_{1/2}$.

Кроме переходов внутри состояний $^2\Pi_{1/2} \rightarrow ^2\Pi_{1/2}$, $^2\Pi_{3/2} \rightarrow ^2\Pi_{3/2}$, называемых основными полосами, наблюдаются переходы между компонентами $^2\Pi_{1/2} \leftrightarrow ^2\Pi_{3/2}$, которые называются спутными полосами. Интенсивность полос-спутников примерно на четыре порядка слабее интенсивности основных полос. Особый интерес в спектре представляет система полос Мейнеля [10, 11], состоящая из вращательных и колебательно-вращательных переходов в основном электронном состоянии молекулы OH и обнаруженная в свечении ночного неба земной атмосферы.

Имеющийся экспериментальный материал по частотам переходов в системе полос Мейнеля позволяет проводить глобальную обработку спектральных линий с целью получения новой информации о молекулярных параметрах и уровнях энергии для основного электронного состояния молекулы OH . Глобальная обработка может включать одновременное использование большого числа экспериментальных частот переходов, собранных из разных источников и полученных из разных по точности измерений, к которым подгоняются параметры используемой модели. Для достижения точности глобального описания, сравнимой с точностью измерений, необходимо

* Ольга Николаевна Сулакшина (son@iao.ru); Юрий Геннадьевич Борков (geo@iao.ru).

в первую очередь провести анализ экспериментального массива данных на предмет их согласованности в пределах представленных экспериментальных погрешностей, т.е. выявления ошибок идентификации, опечаток, оценки точности калибровки спектра и оценки влияния сдвига давлением.

Целью данной работы является критический анализ доступных экспериментальных данных для частот вращательных и колебательно-вращательных переходов молекулы ОН в основном электронном состоянии $X^2\Pi$ и определение эмпирических значений энергетических уровней на основе комбинационного метода Ритца. Этот метод позволяет определить эмпирические значения энергетических уровней, когда число переходов больше числа связанных энергетических уровней. Такие уровни могут быть связаны по крайней мере одной цепью переходов, наблюдаемых в спектре [12]. Выполнить критический анализ и определить эмпирические значения энергетических уровней позволяет программа, основанная на комбинационном принципе Ритца [13–16]. Наличие такого набора эмпирических энергий является очень важным с точки зрения генерации частот переходов для любых колебательных полос, а также для использования их в решениях обратной спектроскопической задачи – нахождения спектроскопических и молекулярных параметров. В настоящее время список эмпирических уровней энергии для этой молекулы отсутствует.

Анализируемые данные

Доступные для анализа экспериментальные данные по частотам вращательных и колебательно-

вращательных переходов молекулы ^{16}OH в состоянии $X^2\Pi$ с учетом Λ -расщепления были собраны из публикаций [7, 9, 17–24]. Полный набор составил 4362 перехода в спектральном интервале 101–10358 cm^{-1} . Большая часть данных была взята из работ [7, 9, 21]. Погрешности измерений частот переходов меняются от $0,001 \cdot 10^{-3}$ [23] до $0,095 \text{ cm}^{-1}$ [7]. Самой высоковозбужденной колебательной полосой в анализируемых данных была колебательная полоса 8-12 [18], а наибольшее значение вращательного квантового числа J достигало 50 для вращательного спектра [21]. Информация о собранных данных приведена в табл. 1, где в первом столбце указаны источник информации и ссылка на него, во втором – техника эксперимента. Точность измерений, число частот переходов, участвовавших в обработке и исключенных из нее, указаны в столбцах 3, 4, 5 соответственно. Диапазон измерений для каждого источника приведен в 6-м и 7-м столбцах. Следует отметить, что данные по частотам микроволновых переходов из [22], а также 71 частота переходов из [19] и 11 частот переходов из [9] не анализировались с помощью комбинационного принципа Ритца из-за недостаточности данных по связанным энергетическим уровням [12, 25].

Метод и результаты

Частоты переходов являются экспериментально измеряемыми величинами и содержат информацию об энергетических уровнях молекулы, которые экспериментально не наблюдаемы. В спектроскопии известен фундаментальный комбинационный принцип Ридберга–Ритца, позволяющий извлекать

Таблица 1

Экспериментальные данные для частот переходов молекулы ^{16}OH в состоянии $X^2\Pi$

Источник	Тип измерения	Экспериментальная погрешность $\times 10^{-3}, \text{ cm}^{-1}$	Число частот, участвовавших в обработке	Число исключенных из обработки частот	$\nu_{\min}, \text{ cm}^{-1}$	$\nu_{\max}, \text{ cm}^{-1}$	Взвешенное СКО1	Невзвешенное СКО2 $\times 10^{-3}, \text{ cm}^{-1}$
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Maillard J.P. et al., 1976 [7]	Фурье* Эмиссия	0,5–95	1014	105	2696,0	10358,3	1,8	18,0
Abrams M.C. et al., 1990 [17]	Фурье Эмиссия	0,5–20	280	8	2211,7	3922,0	1,43	7,9
Sappey A.D. et al., 1990 [18]	Лазер Поглощение	50	41	0	7657,3	7803,5	0,68	34
Hardwick J.L. et al., 1991 [19]	Фурье Эмиссия	20	28	1	101,3	330,3	1,1	22,3
Farmer C.B. et al., 1994 [20]	Фурье Эмиссия	3–5	29	0	814,3	961,4	1,0	3,0
Abrams M.C. et al., 1994 [9]	Фурье Эмиссия	0,3–70	1936	15	2066,7	8666,5	1,8	14,2
Melen F. et al., 1995 [21]	Фурье Эмиссия	0,2–25	539	0	361,1	3407,6	1,11	5,4
Nizkorodov S.A. et al., 2001 [22]	Фурье Поглощение	10	24	0	3558,1	3838,4	–	–
Martin-Drumel M.A. et al., 2011 [23]	Фурье Поглощение	0,001–0,8	214	0	101,3	942,6	0,42	0,09

* Фурье-спектрометр.

информацию об энергетических уровнях из экспериментально найденных частот переходов в молекуле:

$$v_{i \rightarrow j} = E_i - E_j, \quad (1)$$

где $v_{i \rightarrow j}$ — измеряемая частота перехода; E_i и E_j — энергии верхнего и нижнего уровней. Индексы i и j определяют совокупности квантовых чисел, идентифицирующих энергетический уровень. В случае молекулы ОН эти индексы включают в себя колебательное квантовое число v ; квантовое число Ω ; вращательное квантовое число J , характеризующее полный угловой момент, а также индексы e либо f , обозначающие четность уровня.

Когда число переходов больше числа энергетических уровней, то с помощью соотношения (1) для каждого измеренного перехода составляется переопределенная система линейных уравнений с неизвестными значениями энергии E_i , которые находятся методом наименьших квадратов с оценкой статистической неопределенности каждого найденного значения. Возможен случай определенной системы, когда находится единственное решение, зависящее от точности используемых экспериментальных частот. Такой подход на основе комбинационного принципа Ридберга—Ритца был реализован в [12–16, 25].

В нашей работе использовалась программа РИТЦ, созданная С. Ташкуном [13]. Поскольку в анализируемом наборе собраны данные из разных источников, измеренные в разных условиях, то соотношение (1) записывалось в следующем виде:

$$c^s v_{i \rightarrow j}^s = E_i - E_j + \varepsilon_{i \rightarrow j}^s, \quad (2)$$

где s — индекс источника данных; c^s — корректирующий фактор для данных из источника s ; $\varepsilon_{i \rightarrow j}^s$ — ошибка измерений для соответствующего источника s ; i и j изменяются от 1 до n и являются индексами нумерации энергетических уровней; индекс $i \rightarrow j$ изменяется от 1 до N и нумерует число переходов, при этом $N \geq n$.

Соотношение (2) представляет собой одну или несколько систем взаимосвязанных линейных уравнений. Для поиска решения каждой системы используется метод наименьших квадратов. Включение корректирующего фактора необходимо при анализе спектроскопических данных, взятых из различных источников [13]. Для высокоточных измерений частот переходов корректирующий фактор принимается за единицу. Для спектров, зарегистрированных с помощью Фурье- и ЗИР-спектроскопии, корректирующий фактор определяется вместе со значениями энергетических уровней.

Все доступные частоты переходов (см. табл. 1), включенные в один файл и взвешенные в соответствии с экспериментальными погрешностями, приведенными в работах [7, 9, 17–23], обрабатывались программным кодом РИТЦ [13]. Анализ безразмерных взвешенных отклонений $r_{i \rightarrow j}$ для каждого уравнения из системы (2) позволил нам исключить из обработки те частоты переходов $v_{i \rightarrow j}$, для которых $r_{i \rightarrow j}$ было больше пяти:

$$r_{i \rightarrow j} = [c^s v_{i \rightarrow j}^s - (E_i - E_j)] / \Delta_{i \rightarrow j}^s \quad (3)$$

($\Delta_{i \rightarrow j}^s$ — погрешность измерений для каждого источника данных). Число частот переходов, исключенных из анализа, приведено в столбце 5.

Корректирующий фактор находился для всех источников, указанных в табл. 1. Отличным от единицы он оказался для данных из работ [17] (0,999999800) и [21] (0,999999500). Разница между скорректированными и измеренными частотами оказалась в пределах погрешности измерений, поэтому корректирующий фактор не приведен в табл. 1.

Общее число частот переходов, участвовавших в обработке, составило 4105. Данный набор частот позволил провести обработку методом наименьших квадратов системы линейных уравнений (2) со стандартным взвешенным отклонением 1,8 и получить 1056 эмпирических значений волновых чисел для энергетических уровней. Поскольку в спектроскопии используется волновое число энергетического уровня $\tilde{E} = E/hc$ (см^{-1}), то найденные эмпирические значения будем называть РИТЦ-уровнями энергии (их значения E (см^{-1}) приведены в Приложении).

$$\text{Взвешенное (СКО1} = \sqrt{\left(\sum_{i \rightarrow j \in S} r_{i \rightarrow j}^2 \right) / N_s} \text{) и невзве-}$$

$$\text{шенное (СКО2} = \sqrt{\left(\sum_{i \rightarrow j \in S} [c^s v_{i \rightarrow j}^s - (E_i - E_j)]^2 \right) / N_s} \text{)}$$

среднеквадратичные отклонения указаны в столбцах 8 и 9 табл. 1 для каждого источника s . Значение СКО1 позволяет оценить точность воспроизведения наблюдаемых частот переходов. Если $\text{СКО1} \leq 1$, то в среднем частоты переходов для данного источника воспроизводятся с экспериментальной погрешностью. Значение СКО2 дает оценку действительных экспериментальных погрешностей для указанного источника.

Для данных из работ [7, 9, 17] $\text{СКО1} > 1$, что говорит о заниженной погрешности измерений в этих работах. В столбце 3 табл. 1 даны погрешности, которые мы использовали при анализе этих данных. Они примерно в 2 раза отличаются от приведенных в [7, 9, 17]. Так, Абрамс с соавт. [9, 17] декларируют минимальную погрешность измерений, возникающую за счет калибровки, в $0,2 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$, мы же выбираем минимальную погрешность $0,3 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$. Причиной изменения экспериментальных погрешностей стала невозможность обработки всего собранного набора частот переходов с указанными в источниках погрешностями [7, 9, 17] со стандартным отклонением, близким к единице [26]. Даже увеличение погрешности измерений в 2 раза не позволило нам получить для этих работ СКО1, равное единице. Как видно из табл. 1, для работы [22], в которой экспериментально измерены частоты переходов колебательной полосы 9-11, СКО не определяются, поскольку число уравнений совпадает с числом неизвестных.

В табл. 2 мы приводим максимальные значения вращательных квантовых чисел для найденных эмпирических энергетических уровней (РИТЦ-уровни

Таблица 2

Максимальные значения вращательных квантовых чисел для найденных экспериментальных уровней энергии*

Колебательное состояние ν	Четность уровня	Электронное состояние	
		${}^2\Pi_{3/2}$ J_{\max}^{RITZ}	${}^2\Pi_{1/2}$ J_{\max}^{RITZ}
0	<i>e</i>	50,5	40,5
	<i>f</i>	50,5	50,5
1	<i>e</i>	41,5	41,5
	<i>f</i>	42,5	26,5
2	<i>e</i>	41,5	28,5
	<i>f</i>	29,5	32,5
3	<i>e</i>	32,5	27,5
	<i>f</i>	34,5	22,5
4	<i>e</i>	18,5	18,5
	<i>f</i>	17,5	18,5
5	<i>e</i>	17,5	16,5
	<i>f</i>	17,5	16,5
6	<i>e</i>	17,5	15,5
	<i>f</i>	16,5	17,5
7	<i>e</i>	16,5	15,5
	<i>f</i>	16,5	15,5
8	<i>e</i>	12,5	12,5
	<i>f</i>	12,5	12,5
9	<i>e</i>	13,5	11,5
	<i>f</i>	13,5	10,5
10	<i>e</i>	11,5	9,5
	<i>f</i>	11,5	9,5
11	<i>e</i>	8,5	5,5
	<i>f</i>	4,5	5,5
12	<i>e</i>	7,5	6,5
	<i>f</i>	7,5	6,5

* Минимальное значение вращательного квантового числа для состояния ${}^2\Pi_{3/2}$ $J = 1,5$; для состояния ${}^2\Pi_{1/2}$ $J = 0,5$.

энергии). На рис. 1, *a* показаны РИТЦ-уровни энергии, упорядоченные по квантовым числам (ν , Ω , J). Для каждого колебательного квантового числа видны четыре серии уровней энергии: две (*e* и *f*) для состояния ${}^2\Pi_{3/2}$ и две для ${}^2\Pi_{1/2}$.

На рис. 1, *b* приведены погрешности ΔE_i найденных эмпирических РИТЦ-уровней энергии, которые определяются методом наименьших квадратов и представляют собой стандартные отклонения для каждого варьируемого параметра E_i . Значение погрешности ΔE_i для каждого найденного эмпирического РИТЦ-уровня энергии приведено в Приложении. В [12] ΔE_i называется доверительным интервалом эмпирического энергетического уровня. Большая часть погрешностей РИТЦ-уровней энергии, а именно 90%, попадает в интервал $0,0002-0,0067 \text{ см}^{-1}$. Максимальные погрешности, от $0,066$ до $0,094 \text{ см}^{-1}$, наблюдались для РИТЦ-уровней энергии в колебательном состоянии $\nu = 12$, при этом экспериментальная погрешность частот переходов, из которых определялись энергетические уровни, составляла $0,050 \text{ см}^{-1}$ [18].

Найденные эмпирические РИТЦ-уровни энергии мы сравнили с волновыми числами, рассчитанными на основе полученных спектроскопических констант [24, 27]. Результаты сравнения показаны на рис. 2, где разности между эмпирическими РИТЦ-уровнями энергии и рассчитанными в [24, 27] даны в зависимости от номера уровня. Следует отметить, что, проводя сравнение с [24], мы сравниваем также с известной базой спектроскопической информации HITRAN [28], в которой для молекулы ОН используются вычисленные в [24] уровни энергии.

Как видно из рис. 2, наиболее явно отличие экспериментальных и рассчитанных данных [24, 27]

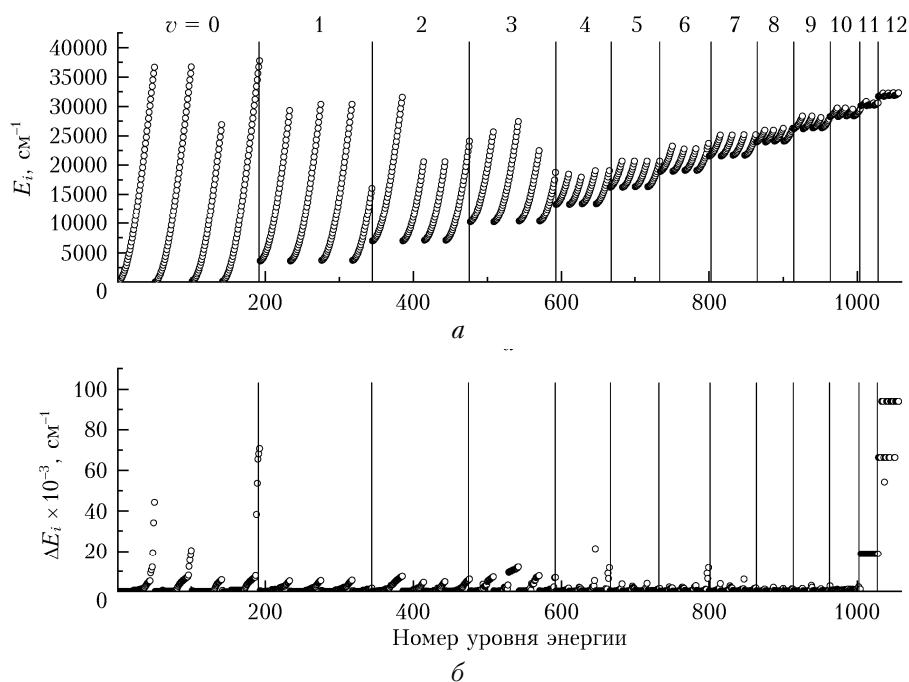


Рис. 1. Волновые числа эмпирических энергетических уровней, найденные по принципу Ритца E_i (*a*), и погрешности ΔE_i , представляющие 1σ стандартные отклонения (*b*)

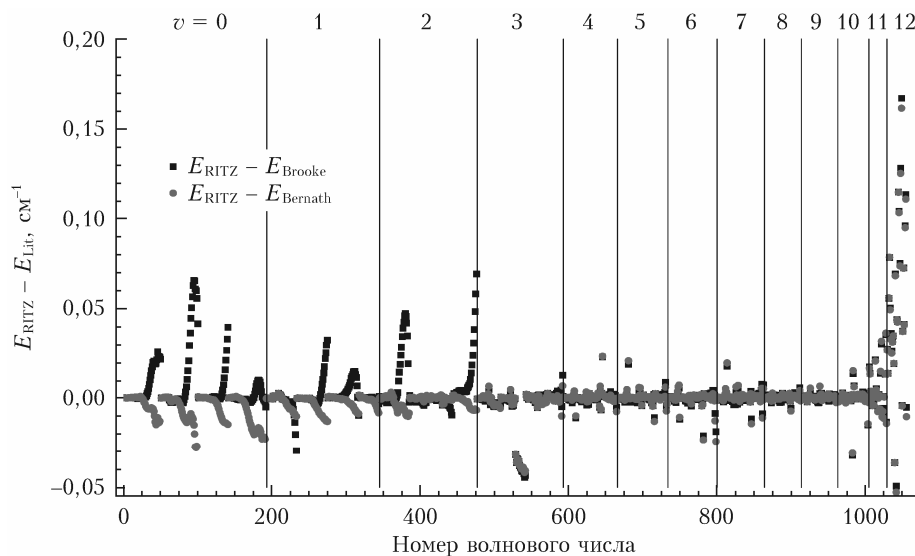


Рис. 2. Сравнение найденных по принципу Ритца волновых чисел эмпирических уровней энергии с рассчитанными в [24, 27]

наблюдается для колебательных состояний $v = 0-2$ и 12. Зависимость же разности энергий $E_{\text{RITZ}} - E_{\text{Brooke}}$ от квантового числа J представлены на рис. 3, где отмечается возрастание разности энергий с ростом J для состояний $v = 0-2$. Для колебательных состояний $v > 2$ существенные отличия между эмпирическими РИТЦ-уровнями энергии и рассчитанными ($E_{\text{RITZ}} - E_{\text{Lit}}$) возникают в тех случаях, когда E_{RITZ} находятся из определенной системы уравнений. Так, в случае $v = 3$ для состояния ${}^2\Pi_{3/2}$, начиная с $J = 21$ для уровней f , мы имеем данные

только по частотам вращательных переходов. Отсутствие достаточной информации по частотам переходов часто не позволяет использовать принцип Ритца для определения эмпирических уровней энергии.

Численные значения разности $\Delta \cdot 10^3 (\text{cm}^{-1}) = E_{\text{RITZ}} - E_{\text{Brooke}}$ приведены в Приложении (столбцы 4, 7, 10, 13). В целом сравнение показывает, что для обоих состояний ${}^2\Pi_{3/2}$ и ${}^2\Pi_{1/2}$ 90% эмпирических РИТЦ-уровней энергии совпадает с рассчитанными волновыми числами [25] в пределах указанных погрешностей.

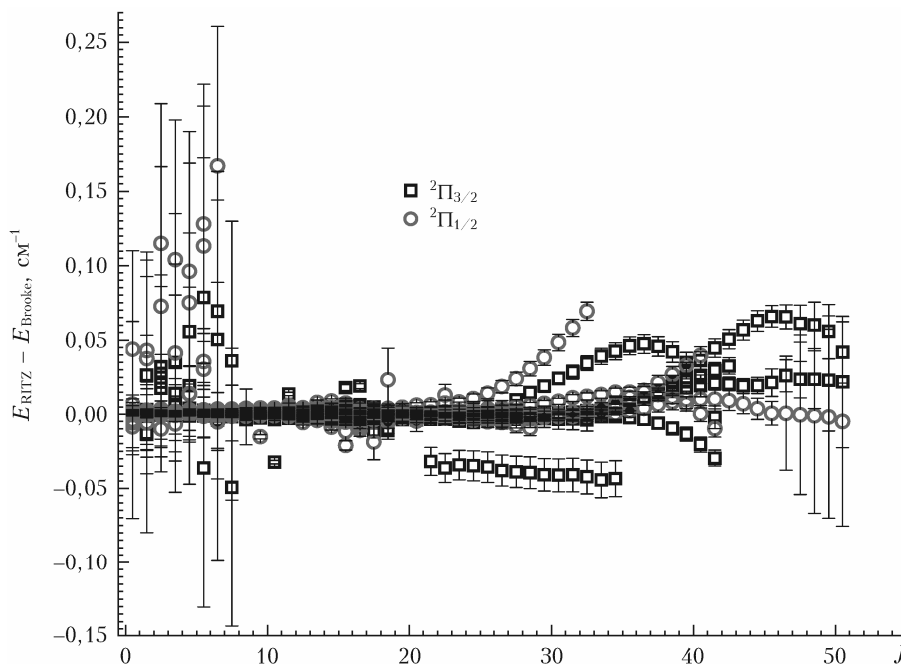


Рис. 3. Сравнение эмпирических РИТЦ-уровней энергии с рассчитанными в [27]. Разности волновых чисел приведены в зависимости от квантового числа J . Вертикальные прямые линии соответствуют погрешностям эмпирических РИТЦ-уровней энергии

Заключение

В настоящей работе с помощью комбинационного принципа Ритца выполнен анализ 4362 доступных экспериментальных частот вращательных и колебательно-вращательных переходов молекулы ОН в состоянии Х²П из работ [7, 9, 17–24]. Переходы со сверхтонким расщеплением не рассматривались. Частоты переходов, взвешенные в соответствии с экспериментальными погрешностями, приведенными в [7, 9, 17–24], были обработаны программным кодом РИТЦ [13–15]. Те частоты переходов, для которых величина взвешенного отклонения превышала пять, были исключены из рассмотрения. Полученный набор из 4105 частот переходов дал

возможность провести обработку со стандартным отклонением 1,8 и получить 1056 эмпирических РИТЦ-уровней энергии с соответствующей погрешностью для каждого уровня. Проведенное сравнение эмпирических РИТЦ-уровней энергий с рассчитанными в [27] показало совпадение в пределах указанных погрешностей для 90% уровней энергии.

Найденный набор эмпирических РИТЦ-уровней энергии дает возможность решить обратную спектроскопическую задачу по определению молекулярных коэффициентов «типа Данхэма» для молекулы ¹⁶ОН в основном электронном состоянии, которые на настоящий момент в литературе отсутствуют.

Работа выполнена в рамках бюджетного проекта № АААА-А17-117021310147-0.

Приложение

Экспериментальные значения уровней энергии для молекулы ¹⁶ОН, найденные с использованием принципа Ритца. Все величины даны в см⁻¹. Обозначения 1 и 2 соответствуют ²П_{3/2} и ²П_{1/2}

$v = 0$												
J	E_{1e}			E_{1f}			E_{2e}			E_{2f}		
	Значение	$\Delta E \cdot 10^3$	$\Delta \cdot 10^3$	Значение	$\Delta E \cdot 10^3$	$\Delta \cdot 10^3$	Значение	$\Delta E \cdot 10^3$	$\Delta \cdot 10^3$	Значение	$\Delta E \cdot 10^3$	$\Delta \cdot 10^3$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
0,5							126,2929	0,6	0,6	126,4502	0,7	0,0
1,5	0,0000	0,0	0,0	0,0555	0,1	-0,1	187,4929	0,2	0,1	187,7530	0,0	-0,1
2,5	83,7234	0,2	0,1	83,9246	0,2	0,0	288,7721	0,2	0,1	289,0446	0,1	-0,1
3,5	201,9314	0,2	0,1	202,3797	0,2	0,1	429,2792	0,2	0,2	429,4628	0,1	-0,1
4,5	355,1203	0,2	0,0	355,9150	0,2	0,0	608,1988	0,2	0,2	608,1943	0,1	-0,1
5,5	543,5955	0,3	0,0	544,8294	0,2	0,0	824,8166	0,2	0,1	824,5314	0,1	-0,1
6,5	767,4816	0,3	0,0	769,2406	0,2	0,1	1078,5100	0,2	0,2	1077,8584	0,1	-0,2
7,5	1026,7553	0,3	0,1	1029,1189	0,2	0,3	1368,7162	0,2	0,1	1367,6190	0,1	-0,2
8,5	1321,2760	0,3	-0,0	1324,3183	0,2	0,3	1694,9029	0,2	0,1	1693,2862	0,1	-0,2
9,5	1650,8104	0,3	0,0	1654,6004	0,2	0,3	2056,5457	0,2	0,0	2054,3408	0,1	-0,1
10,5	2015,0484	0,3	0,1	2019,6506	0,2	0,3	2453,1136	0,2	0,1	2450,2558	0,1	-0,2
11,5	2413,6145	0,3	0,1	2419,0890	0,8	0,0	2884,0581	0,2	0,0	2880,4874	0,1	-0,4
12,5	2846,0769	0,3	0,2	2852,4786	0,6	-1,1	3348,8085	0,2	-0,1	3344,4690	0,8	-0,7
13,5	3311,9521	0,3	0,2	3319,3333	0,5	-1,6	3846,7668	0,2	-0,2	3841,6074	0,8	-0,8
14,5	3810,7104	0,3	-0,0	3819,1178	0,5	-2,5	4377,3067	0,2	-0,1	4371,2801	0,8	-1,0
15,5	4341,7787	0,3	-0,1	4351,2557	0,5	-2,5	4939,7713	0,2	-0,1	4932,8351	0,8	-1,0
16,5	4904,5434	0,3	-0,0	4915,1277	0,5	-2,4	5533,4736	0,3	-0,0	5525,5897	0,8	-1,1
17,5	5498,3522	0,3	-0,0	5510,0778	0,5	-1,7	6157,6965	0,3	-0,0	6148,8318	0,8	-1,1
18,5	6122,5172	0,3	-0,1	6135,4120	0,5	-1,3	6811,6932	0,3	0,1	6801,8192	0,8	-0,8
19,5	6776,3157	0,3	-0,5	6790,4032	0,5	-1,1	7494,6880	0,3	0,4	7483,7806	0,8	-0,8
20,5	7458,9938	0,3	-0,4	7474,2918	0,5	-0,8	8205,8768	0,3	0,6	8193,9171	0,8	-0,7
21,5	8169,7654	0,3	-0,3	8186,2870	0,5	-0,7	8944,4286	0,3	0,8	8931,4028	0,8	-0,6
22,5	8907,8159	0,8	0,2	8925,5690	0,5	-0,5	9709,4866	0,3	0,8	9695,3856	0,8	-0,6
23,5	9672,3026	0,8	0,8	9691,2899	0,5	-0,4	10500,1692	0,3	0,7	10484,9888	0,8	-0,9
24,5	10462,3560	0,8	0,8	10482,5756	0,5	-0,7	11315,5712	0,3	0,5	11299,3124	0,8	-1,2
25,5	11277,0831	0,8	0,7	11298,5280	0,5	-0,8	12154,7650	0,3	0,2	12137,4337	0,8	-1,6
26,5	12115,5673	0,8	0,7	12138,2248	0,5	-1,1	13016,8025	0,3	0,3	12998,4096	0,8	-1,5
27,5	12976,8696	0,8	0,6	13000,7221	0,5	-1,4	13900,7139	0,3	-0,2	13881,2749	0,8	-2,2
28,5	13860,0304	0,8	0,3	13885,0550	0,5	-2,0	14805,5130	0,4	-0,0	14785,0481	0,8	-2,5
29,5	14764,0715	1,1	0,8	14790,2401	0,5	-2,3	15730,1928	0,4	-0,6	15708,7287	1,1	-2,4
30,5	15687,9943	1,1	0,7	15715,2747	0,5	-2,7	16673,7334	0,8	-0,0	16651,2997	1,1	-1,6
31,5	16630,7857	1,2	1,2	16659,1405	1,8	-2,2	17635,0959	2,0	0,7	17611,7264	2,1	-1,7
32,5	17591,4148	1,2	2,3	17620,8017	2,6	-0,9	18613,2283	2,7	2,2	18588,9625	2,8	-1,0
33,5	18568,8357	1,4	3,6	18599,2076	3,2	0,9	19607,0638	3,3	4,4	19581,9453	3,4	0,0
34,5	19561,9882	1,6	5,4	19593,2933	3,7	3,4	20615,5224	3,8	7,4	20589,5982	3,9	0,3
35,5	20569,7984	1,8	7,5	20601,9799	4,2	6,2	21637,5113	4,2	11,2	21610,8349	4,3	2,1
36,5	21591,1794	1,9	10,1	21624,1767	4,6	10,4	22671,9249	4,6	15,8	22644,5528	4,7	3,9
37,5	22625,0310	2,1	12,6	22658,7790	5,0	15,3	23717,6455	5,0	21,1	23689,6390	5,1	6,4

Продолжение таблицы

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
38,5	23670,2411	2,8	15,2	23704,6697	5,3	20,8	24773,5425	5,3	26,7	24744,9664	5,4	8,1
39,5	24725,6844	3,4	17,5	24760,7221	5,6	29,4	25838,4735	5,7	32,8	25809,3967	5,7	9,6
40,5	25790,2237	3,9	19,7	25825,7892	5,9	36,1	26911,2823	6,0	39,4	26881,7774	6,0	10,1
41,5	26862,7067	4,3	20,6	26898,7189	6,2	44,4				27960,9422	6,3	9,9
42,5	27941,9677	4,7	20,3	27978,3373	6,5	50,3				29045,7090	6,6	9,0
43,5	29026,8256	5,0	18,9	29063,4613	6,8	56,5				30134,8771	6,8	6,9
44,5	30116,0834	5,4	19,3	30152,8865	7,0	62,7				31227,2257	7,1	3,6
45,5	31208,5208	9,2	21,2	31245,3852	7,3	65,6				32321,5112	8,0	0,6
46,5	32302,8943	10,8	25,8	32339,7087	8,2	65,4				33416,4626	38,4	0,5
47,5	33397,9207	12,2	23,2	33434,5781	12,4	60,8				34510,7681	53,7	-0,5
48,5	34492,3022	19,3	23,2	34528,6896	15,6	59,8				35603,0795	65,5	-1,3
49,5	35584,6866	34,2	22,8	35620,6830	18,2	55,5				36691,9974	68,1	-2,0
50,5	36673,6743	44,3	21,6	36709,1487	20,5	41,5				37776,0594	70,7	-5,0

$v = 1$

0,5							3695,3558	0,6	0,0	3695,5080	0,5	1,4
1,5	3568,4709	0,5	-0,4	3568,5222	0,5	-0,4	3754,0428	0,5	0,8	3754,2935	0,5	1,2
2,5	3649,2040	0,3	-0,2	3649,3907	0,3	-0,2	3851,2116	0,3	0,6	3851,4769	0,2	0,1
3,5	3763,1084	0,3	-0,2	3763,5263	0,3	-0,2	3986,0865	0,3	0,6	3986,2715	0,2	0,1
4,5	3910,6333	0,3	-0,2	3911,3772	0,3	-0,2	4157,9056	0,3	0,6	4157,9158	0,2	0,2
5,5	4092,0584	0,3	-0,2	4093,2173	0,3	-0,1	4365,9884	0,3	0,6	4365,7348	0,2	0,2
6,5	4307,4976	0,3	-0,2	4309,1539	0,3	-0,1	4609,7327	0,3	0,5	4609,1334	0,2	0,3
7,5	4556,9254	0,3	-0,3	4559,1555	0,3	-0,1	4888,5901	0,3	0,7	4887,5684	0,2	0,3
8,5	4840,2043	0,3	-0,4	4843,0793	0,3	-0,0	5202,0381	0,3	0,6	5200,5234	0,2	0,1
9,5	5157,1064	0,3	-0,6	5160,6921	0,3	-0,2	5549,5618	0,3	0,4	5547,4884	0,2	0,0
10,5	5507,3308	0,4	1,1	5511,6870	0,3	-0,2	5930,6390	0,3	-0,0	5927,9456	0,2	-0,3
11,5	5890,5070	0,4	0,8	5895,6929	0,3	-0,3	6344,7315	0,3	0,0	6341,3609	0,2	-0,3
12,5	6306,2147	0,4	0,7	6312,2830	0,3	-0,3	6791,2777	0,3	-0,0	6787,1770	0,2	-0,4
13,5	6753,9804	0,4	0,3	6760,9801	0,3	-0,2	7269,6902	0,3	0,0	7264,8111	0,2	-0,3
14,5	7233,2860	0,4	0,5	7241,2604	0,3	-0,4	7779,3533	0,3	0,2	7773,6519	0,8	0,1
15,5	7743,5691	0,4	0,6	7752,5582	0,3	-0,4	8319,6213	0,3	0,0	8313,0578	0,8	0,1
16,5	8284,2278	0,4	0,7	8294,2667	0,3	-0,3	8889,8197	0,3	0,1	8882,3588	0,8	0,3
17,5	8854,6242	1,1	2,5	8865,7417	0,3	-0,1	9489,2434	0,3	0,4	9480,8544	0,8	0,5
18,5	9454,0786	1,0	2,0	9466,3025	0,3	-0,1	10117,1574	0,3	0,1	10107,8143	0,8	0,1
19,5	10081,8843	0,9	1,8	10095,2346	0,3	-0,5	10772,8002	1,0	0,9	10762,4809	0,8	-0,2
20,5	10737,2987	0,9	1,3	10751,7915	0,3	-0,8	11455,3789	1,0	1,0	11444,0681	1,3	-0,1
21,5	11419,5492	1,2	0,4	11435,1957	0,3	-1,1	12164,0763	1,0	1,2	12151,7617	1,3	-0,7
22,5	12127,8343	1,1	-0,5	12144,6403	0,6	-1,1	12898,0482	1,0	1,7	12884,7233	1,3	-1,1
23,5	12861,3251	1,1	-0,5	12879,2899	0,8	-1,6	13656,4253	1,1	2,2	13642,0877	1,3	-2,1
24,5	13619,1643	1,1	-0,7	13638,2833	0,9	-2,3	14438,3145	1,3	3,0	14422,9678	1,4	-2,6
25,5	14400,4707	1,2	-1,0	14420,7339	1,0	-3,2	15242,7993	1,4	3,5	15226,4519	1,6	-3,0
26,5	15204,3393	1,3	-1,0	15225,7324	1,1	-3,4	16068,9418	1,5	4,0	16051,6070	1,7	-3,3
27,5	16029,8419	1,5	-1,0	16052,3446	1,3	-3,7	16915,7836	1,7	5,0			
28,5	16876,0277	2,1	-2,1	16899,6164	1,5	-3,4	17782,3453	1,9	6,0			
29,5	17741,9283	2,2	-2,3	17766,5719	1,7	-3,1	18667,6290	2,0	7,2			
30,5	18626,5533	2,4	-2,2	18652,2163	1,9	-2,4	19570,6181	2,1	8,6			
31,5	19528,8936	2,5	-2,2	19555,5357	2,0	-1,6	20490,2792	2,3	10,9			
32,5	20447,9221	2,6	-2,3	20475,4984	2,1	-0,2	21425,5586	2,4	11,9			
33,5	21382,5950	2,7	-2,0	21411,0550	2,3	1,9	22375,3895	2,5	13,1			
34,5	22331,8501	2,8	-1,8	22361,1386	2,4	4,4	23338,6869	2,6	14,8			
35,5	23294,6081	2,9	-2,3	23324,6657	2,5	7,7	24314,3467	3,2	14,7			
36,5	24269,7732	3,4	-3,6	24300,5341	3,1	10,5	25301,2515	3,7	14,8			
37,5	25256,2317	3,9	-6,2	25287,6267	3,6	13,9	26298,2622	4,2	13,1			
38,5	26252,8528	4,3	-9,6	26284,8067	4,1	17,6	27304,2243	4,6	11,3			
39,5	27258,4864	4,7	-13,6	27290,9187	4,5	22,0	28317,9582	4,9	6,7			
40,5	28271,9590	5,1	-20,5	28304,7843	4,9	25,3	29338,2651	5,3	0,3			
41,5	29292,0774	5,4	-29,6	29325,2060	5,2	29,5	30363,9179	5,6	-9,8			
42,5				30350,9562	5,6	32,4						

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
$v = 2$												
0,5							7098,8267	0,5	0,0	7098,9705	0,5	1,1
1,5	6971,3458	0,5	0,8	6971,3935	0,4	1,4	7155,0413	0,4	-1,0	7155,2817	0,4	0,9
2,5	7049,1180	0,4	1,0	7049,2898	0,4	0,4	7248,1657	0,4	-0,9	7248,4251	0,4	2,4
3,5	7158,7674	0,4	-0,0	7159,1553	0,4	0,1	7377,4911	0,4	-0,9	7377,6775	0,4	1,9
4,5	7300,6977	0,3	-0,9	7301,3920	0,3	-0,0	7542,3081	0,4	-0,8	7542,3321	0,4	2,0
5,5	7475,1638	0,3	-0,5	7476,2482	0,3	-0,2	7741,9695	0,3	-0,7	7741,7470	0,4	2,9
6,5	7682,2654	0,3	-1,2	7683,8200	0,4	-0,2	7975,8937	0,3	-0,9	7975,3458	0,4	3,3
7,5	7921,9752	0,3	-1,4	7924,0721	0,4	-0,8	8243,5455	0,3	-1,4	8242,5993	0,4	3,3
8,5	8194,1577	0,5	-1,1	8196,8638	0,4	-1,5	8544,4145	0,3	-0,9	8543,0021	0,4	3,9
9,5	8498,5877	0,5	-1,8	8501,9673	0,4	-2,1	8877,9934	0,3	-0,2	8876,0515	0,4	4,1
10,5	8834,9713	0,6	-1,2	8839,0818	0,4	-2,2	9243,7671	0,3	-0,5	9241,2382	0,4	4,0
11,5	9202,9460	0,7	-2,5	9207,8437	0,4	-2,1	9641,2070	0,3	0,1	9638,0365	0,5	4,2
12,5	9602,1007	0,5	-2,5	9607,8340	0,4	-2,1	10069,7583	0,3	-0,5	10065,8973	0,5	4,0
13,5	10031,9698	0,5	-2,8	10038,5848	0,4	-1,8	10528,8458	0,7	1,1	10524,2467	0,5	3,8
14,5	10492,0443	0,5	-2,7	10499,5811	0,4	-2,1	11017,8592	0,7	1,0	11012,4830	0,5	4,2
15,5	10981,7718	0,5	-2,5	10990,2681	1,1	-1,4	11536,1595	0,8	-4,0	11529,9734	0,9	3,8
16,5	11500,5611	1,0	-1,5	11510,0477	1,1	-1,4	12083,0916	0,8	-3,8	12076,0580	0,9	3,4
17,5	12047,7832	1,1	0,7	12058,2866	1,1	-1,2	12657,9552	0,8	-3,7	12650,0470	0,9	3,8
18,5	12622,7693	1,1	0,7	12634,3132	1,1	-2,4	13260,0294	1,8	-0,4	13251,2193	0,9	3,6
19,5	13224,8217	1,5	-0,2	13237,4252	1,5	-3,4	13888,5546	1,6	-0,3	13878,8274	1,6	3,9
20,5	13853,2103	1,4	-0,2	13866,8862	1,6	-4,0	14542,7511	1,6	-1,7	14532,0958	1,9	5,8
21,5	14507,1704	1,5	-1,5	14521,9303	1,9	-2,4	15221,8128	1,8	-2,1	15210,2176	2,1	6,3
22,5	15185,9129	1,7	-0,9	15201,7562	1,8	-2,7	15924,9032	2,0	-2,8	15912,3641	2,2	7,2
23,5	15888,6148	1,7	-0,6	15905,5406	1,8	-2,4	16651,1616	2,7	-3,5	16637,6787	2,5	8,1
24,5	16614,4294	1,9	0,4	16632,4321	2,1	0,1	17399,7023	3,3	-4,2	17385,2818	3,1	10,4
25,5	17362,4823	2,6	1,6	17381,5470	2,8	-0,1	18169,6151	3,8	-5,3	18154,2683	3,7	13,9
26,5	18131,8747	3,2	3,1	18151,9838	3,4	-0,2	18959,9678	4,2	-5,8	18943,7097	4,1	18,4
27,5	18921,6882	3,3	9,4	18942,8143	3,9	-0,4	19769,8029	4,6	-7,9	19752,6551	4,5	23,8
28,5	19730,9707	3,4	14,4	19753,0880	4,3	0,3	20598,1447	5,0	-9,6	20580,1325	4,9	30,6
29,5	20558,7540	3,9	18,7	20581,8299	4,7	0,8				21425,1469	5,2	38,1
30,5	21404,0493	4,4	24,0							22286,6848	5,6	48,1
31,5	22265,8427	4,7	28,4							23163,7074	5,9	57,9
32,5	23143,1030	5,1	34,2							24055,1589	6,2	69,2
33,5	24034,7729	5,4	39,0									
34,5	24939,7756	5,7	42,3									
35,5	25857,0137	6,0	45,9									
36,5	26785,3622	6,3	47,2									
37,5	27723,6731	6,6	45,5									
38,5	28670,7725	6,9	41,9									
39,5	29625,4539	7,1	34,6									
40,5	30586,4744	7,4	19,1									
41,5	31552,5593	7,6	-2,2									

 $v = 3$

0,5							10338,6195	0,5	1,9	10338,7544	0,5	0,9
1,5	10210,5447	0,4	-0,6	10210,5890	0,5	0,6	10392,3972	0,5	0,3	10392,6282	0,4	2,6
2,5	10285,3729	0,5	-0,6	10285,5314	0,4	-0,7	10481,5285	0,4	1,5	10481,7780	0,5	1,8
3,5	10390,8008	0,4	-0,5	10391,1595	0,4	-0,3	10605,3644	0,5	-0,8	10605,5518	0,5	1,2
4,5	10527,1856	0,4	-0,5	10527,8298	0,4	-0,1	10763,2531	0,5	0,9	10763,2891	0,4	0,7
5,5	10694,7540	0,4	-0,8	10695,7643	0,4	-0,5	10954,5738	0,5	0,0	10954,3809	0,4	0,9
6,5	10893,5954	0,4	-0,8	10895,0471	0,4	-0,6	11178,7698	0,5	0,2	11178,2717	0,4	1,3
7,5	11123,6767	0,4	-0,4	11125,6389	0,5	-0,8	11435,3176	0,5	0,1	11434,4447	0,5	1,1
8,5	11384,8613	0,5	-0,9	11387,3993	0,5	-1,1	11723,7159	0,4	0,4	11722,4040	0,6	1,6
9,5	11676,9313	0,5	0,1	11680,1037	0,5	-0,9	12043,4654	0,5	0,4	12041,6526	0,5	-0,4
10,5	11999,5916	0,6	-1,1	12003,4553	0,5	-1,2	12394,0580	0,5	-1,0	12391,6939	0,6	1,0
11,5	12352,4931	0,6	-0,4	12357,0975	0,5	-1,1	12774,9735	0,6	-0,2	12772,0046	0,8	1,8
12,5	12735,2242	0,7	-1,7	12740,6175	0,7	-1,6	13185,6612	0,8	-2,4	13182,0412	0,7	0,3
13,5	13147,3324	0,6	-0,7	13153,5547	0,7	-1,9	13625,5558	0,7	-1,1	13621,2426	0,9	2,5
14,5	13588,3121	0,7	-0,8	13595,4084	1,0	3,7	14094,0530	1,0	-1,4	14089,0091	1,4	3,9
15,5	14057,6208	1,0	0,2	14065,6142	2,2	-0,2	14590,5221	1,7	-5,4	14584,7143	1,1	2,2

Продолжение таблицы

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
16,5	14554,6727	1,1	0,5	14563,5923	2,0	-4,7	15114,3195	0,8	1,4	15107,7093	1,2	2,3
17,5	15078,8504	1,4	4,8	15088,7254	1,6	-0,6	15664,7400	4,0	1,7	15657,3082	1,4	1,7
18,5	15629,4823	3,7	-0,9	15640,3346	1,1	-4,1	16241,0695	3,6	-0,9	16232,8014	1,8	3,8
19,5	16205,8890	1,8	-3,7	16217,7371	1,3	-1,3	16842,5652	3,8	-2,5	16833,4428	2,3	4,5
20,5	16807,3481	2,6	-1,1	16820,1946	3,4	-0,4	17468,4551	4,0	0,6	17458,4528	6,9	-4,8
21,5	17433,0925	2,9	-3,6	17446,9149	9,5	-31,9	18117,9267	5,5	-0,4			
22,5	18082,3426	3,1	-3,6	18097,1655	9,7	-36,3	18790,1530	5,8	-1,1	18778,4218	7,0	12,8
23,5	18754,2784	3,4	-4,7	18770,1038	9,9	-34,4	19484,2784	6,9	1,2			
24,5	19448,0572	5,0	-4,8	19464,8713	10,1	-34,8	20199,4131	7,1	1,3			
25,5	20162,8067	5,3	-3,6	20180,5918	10,3	-35,8	20934,6490	7,4	1,5			
26,5	20897,6257	5,6	-3,2	20916,3601	10,4	-38,0	21689,0495	7,6	1,4			
27,5	21651,5887	5,9	-3,4	21671,2478	10,6	-38,9	22461,6545	7,8	1,9			
28,5	22423,7457	6,2	-2,8	22444,2969	10,8	-39,5						
29,5	23213,1185	6,5	-2,5	23234,5235	10,9	-40,9						
30,5	24018,7032	6,8	-3,5	24040,9211	11,1	-41,2						
31,5	24839,4730	7,0	-3,5	24862,4544	11,2	-41,0						
32,5	25674,3707	7,3	-4,2	25698,0596	11,4	-42,4						
33,5				26546,6481	12,0	-44,5						
34,5				27407,1044	12,1	-43,5						

$v = 4$

0,5							13415,8225	0,6	2,4	13415,9498	0,5	1,7
1,5	13287,1655	0,4	1,0	13287,2040	0,4	0,2	13467,1881	0,5	1,4	13467,4051	0,5	1,7
2,5	13359,0523	0,4	-0,1	13359,1976	0,4	0,2	13552,3555	0,4	0,0	13552,5960	0,5	1,6
3,5	13460,2697	0,4	0,1	13460,5989	0,4	-0,1	13670,7441	0,5	-0,0	13670,9278	0,4	1,0
4,5	13591,1290	0,4	-0,2	13591,7230	0,4	-0,4	13821,7414	0,4	-0,2	13821,7886	0,4	1,0
5,5	13751,8299	0,4	-0,5	13752,7657	0,4	-0,4	14004,7658	0,4	-0,3	14004,5998	0,5	0,9
6,5	13942,4472	0,4	-0,5	13943,7953	0,4	-0,9	14219,2769	0,4	-0,7	14218,8272	0,4	1,4
7,5	14162,9412	0,4	-0,4	14164,7678	0,4	-1,2	14464,7663	0,4	-0,7	14463,9654	0,5	0,9
8,5	14413,1748	0,5	-0,6	14415,5407	0,5	-2,0	14740,7412	0,5	0,3	14739,5276	0,5	0,7
9,5	14692,9296	0,5	-0,9	14695,8929	0,5	-1,1	15046,7062	0,5	-1,1	15045,0275	0,5	2,0
10,5	15001,9176	0,6	-1,2	15005,5283	0,5	-1,8	15382,1648	0,6	0,0	15379,9671	0,6	3,7
11,5	15339,7902	0,6	-1,0	15344,0965	0,5	-1,3	15746,5941	0,7	-0,7	15743,8274	0,6	1,1
12,5	15706,1437	0,6	-1,0	15711,1882	0,7	-1,6	16139,4582	0,8	1,9	16136,0790	0,8	1,6
13,5	16100,5247	0,9	-2,6	16106,3487	0,7	-1,2	16560,1832	1,2	0,8	16556,1545	1,5	0,6
14,5	16522,4407	0,9	-1,1	16529,0780	2,2	1,7	17008,1729	2,3	-5,1	17003,4656	1,0	0,4
15,5	16971,3493	1,2	0,7	16978,8211	2,0	-3,9	17482,8248	2,4	5,8	17477,3933	1,4	2,1
16,5	17446,6705	1,3	2,5	17455,0116	1,4	-0,2	17983,4440	2,9	-6,8	17977,2835	9,1	1,4
17,5	17947,7819	1,4	-0,3	17957,0106	1,4	-3,6	18509,3912	5,5	2,5	18502,4579	6,4	0,5
18,5	18474,0257	1,8	-11,2				19059,9405	21,4	23,0	19052,2014	11,8	-5,1

$v = 5$

0,5							16330,5242	0,7	0,8	16330,6457	0,7	2,4
1,5	16201,3066	0,5	0,2	16201,3417	0,5	-0,1	16379,4884	0,5	1,7	16379,6905	0,6	-0,5
2,5	16270,2386	0,4	0,2	16270,3704	0,4	0,3	16460,7043	0,4	0,7	16460,9327	0,5	1,1
3,5	16367,2298	0,4	-0,2	16367,5308	0,4	0,3	16573,6483	0,5	-0,1	16573,8285	0,5	1,2
4,5	16492,5510	0,4	0,5	16493,0950	0,4	0,1	16717,7561	0,4	0,1	16717,8115	0,4	0,7
5,5	16646,3708	0,4	-0,0	16647,2311	0,4	-0,1	16892,4766	0,4	0,2	16892,3361	0,6	1,4
6,5	16828,7490	0,4	0,1	16829,9920	0,4	-0,8	17097,2889	0,4	-0,2	17096,8849	0,6	1,2
7,5	17039,6371	0,4	-0,3	17041,3256	0,4	-1,3	17331,6971	0,5	-0,3	17330,9657	0,6	-0,1
8,5	17278,8955	0,5	-0,6	17281,0876	0,5	-1,1	17595,2153	0,5	-0,2	17594,1016	0,5	1,5
9,5	17546,3054	0,6	-0,7	17549,0521	0,6	-2,2	17887,3555	0,5	-0,8	17885,8060	0,5	1,8
10,5	17841,5794	0,6	-0,4	17844,9300	0,6	-1,9	18207,6207	0,6	-1,1	18205,5866	0,6	2,1
11,5	18164,3678	0,7	-2,2	18168,3672	0,6	-2,7	18555,4955	0,8	-0,5	18552,9312	0,8	2,0
12,5	18514,2748	0,7	-0,6	18518,9607	0,8	-2,1	18930,4373	0,9	-2,7	18927,3055	1,0	2,1
13,5	18890,8469	1,0	1,1	18896,2602	1,1	4,0	19331,8890	1,4	0,8	19328,1490	1,3	3,2
14,5	19293,5891	1,2	3,3	19299,7501	2,8	-0,2	19759,2426	1,8	-4,3	19754,8756	1,4	8,8
15,5	19721,9566	1,4	-0,4	19728,9067	2,1	4,2	20211,8946	1,2	1,9	20206,8428	1,5	-4,2
16,5	20175,3997	1,7	18,8	20183,1288	1,9	-1,0	20689,1605	4,1	-11,0	20683,4369	1,6	0,0
17,5	20653,2380	3,8	-2,2	20661,8062	1,5							

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
$v = 6$												
0,5							19081,5966	0,7	1,5	19081,7083	0,6	2,4
1,5	18951,8572	0,5	0,1	18951,8892	0,5	0,4	19128,1485	0,5	0,7	19128,3395	0,5	1,9
2,5	19017,7952	0,4	0,6	19017,9136	0,4	0,7	19205,3964	0,5	1,5	19205,6097	0,5	1,0
3,5	19110,5128	0,4	1,0	19110,7837	0,4	0,2	19312,8632	0,4	0,6	19313,0350	0,5	1,2
4,5	19230,2361	0,4	0,6	19230,7301	0,4	0,2	19450,0299	0,4	0,5	19450,0895	0,4	1,0
5,5	19377,1077	0,4	0,9	19377,8909	0,4	-0,1	19616,3754	0,4	-0,2	19616,2560	0,4	0,8
6,5	19551,1661	0,4	0,8	19552,3026	0,4	0,1	19811,3991	0,4	-0,8	19811,0380	0,5	1,1
7,5	19752,3537	0,4	0,6	19753,9008	0,4	-0,4	20034,6161	0,4	-0,3	20033,9536	0,5	1,2
8,5	19980,5241	0,5	-0,1	19982,5350	0,5	-1,7	20285,5442	0,5	-1,0	20284,5284	0,5	1,8
9,5	20235,4557	0,5	-0,6	20237,9801	0,5	-1,7	20563,7018	0,5	-0,3	20562,2827	0,6	2,8
10,5	20516,8583	0,6	-1,7	20519,9410	0,6	-1,8	20868,5909	0,8	0,9	20866,7199	0,7	0,4
11,5	20824,3848	0,7	-1,6	20828,0634	0,9	-3,0	21199,6930	0,8	0,7	21197,3349	0,7	2,0
12,5	21157,6302	0,8	-2,4	21161,9445	0,8	-0,9	21556,4681	1,2	0,1	21553,5878	1,2	4,3
13,5	21516,1463	2,3	-0,2	21521,1226	2,2	-0,9	21938,3447	2,5	-4,3	21934,9080	1,1	0,8
14,5	21899,4315	1,5	2,0	21905,0948	2,3	-3,0	22344,7346	2,6	-2,8			
15,5	22306,9441	1,6	4,6	22313,3210	1,7	-0,7	22774,9831	3,0	-21,2	22770,3694	9,1	1,5
16,5	22738,0984	1,7	5,6	22745,2027	1,7	-4,4				23223,2148	6,5	-8,6
17,5	23192,2533	2,0	-12,0							23698,5692	11,9	-18,7
$v = 7$												
0,5							21666,3927	0,7	1,3	21666,4916	0,9	-0,4
1,5	21536,1985	0,5	-1,2	21536,2285	0,6	0,7	21710,5051	0,7	1,4	21710,6784	0,6	1,7
2,5	21599,0725	0,4	-0,6	21599,1786	0,4	0,3	21783,7257	0,5	0,3	21783,9216	0,6	-0,2
3,5	21687,4242	0,4	0,3	21687,6656	0,4	-0,8	21885,6320	0,5	1,2	21885,7903	0,4	0,1
4,5	21801,4357	0,4	-0,3	21801,8789	0,4	-0,4	22015,7386	0,4	-0,4	22015,7991	0,6	1,3
5,5	21941,2193	0,4	0,0	21941,9239	0,4	-1,5	22173,5581	0,5	-1,3	22173,4554	0,5	0,3
6,5	22106,7926	0,4	-0,0	22107,8177	0,4	-2,0	22358,6069	0,5	-1,1	22358,2843	0,5	2,1
7,5	22298,0834	0,4	-0,7	22299,4839	0,5	-1,9	22570,4071	0,5	-1,0	22569,8078	0,5	1,0
8,5	22514,9384	0,5	-0,2	22516,7602	0,5	-3,8	22808,4821	0,5	-1,4	22807,5592	0,6	2,1
9,5	22757,1266	0,6	-0,1	22759,4175	0,6	-2,7	23072,3485	0,7	-1,1	23071,0556	0,6	2,6
10,5	23024,3510	0,7	-2,1	23027,1510	0,6	-3,7	23361,5052	0,7	-0,9	23359,7996	0,8	1,0
11,5	23316,2617	0,8	-0,9	23319,6110	1,1	2,9	23675,4316	0,8	0,4	23673,2761	1,0	-0,1
12,5	23632,4472	1,0	1,3	23636,3649	1,1	-1,5	24013,5777	1,2	0,9	24010,9461	1,1	4,2
13,5	23972,4470	1,3	4,2	23976,9619	3,0	-3,4	24375,3636	1,4	-2,0	24372,2304	1,7	7,7
14,5	24335,7477	1,7	1,8	24340,8977	2,2	4,8	24760,1923	1,6	3,8	24756,5049	1,8	-8,8
15,5	24721,8198	2,0	17,8	24727,5901	2,1	-1,6	25167,3921	6,2	-11,6	25163,1844	1,9	7,3
16,5	25130,0130	3,9	-1,5	25136,4582	1,7	-2,2						
$v = 8$												
0,5							24080,3531	0,7	1,1	24080,4424	0,6	1,9
1,5	23949,8192	0,5	0,3	23949,8438	0,5	0,5	24121,9683	0,5	2,6	24122,1206	0,6	2,3
2,5	24009,5185	0,4	1,0	24009,6108	0,5	1,7	24191,0613	0,5	1,9	24191,2352	0,5	2,2
3,5	24093,3527	0,4	1,7	24093,5646	0,4	1,1	24287,2501	0,5	-0,3	24287,3927	0,5	1,4
4,5	24201,4622	0,4	1,4	24201,8523	0,4	1,3	24410,0955	0,5	-0,1	24410,1493	0,5	2,9
5,5	24333,9246	0,5	1,4	24334,5487	0,4	1,5	24559,1300	0,5	-0,5	24559,0370	0,6	2,1
6,5	24490,7338	0,5	1,0	24491,6433	0,4	0,1	24733,8858	0,6	-0,8	24733,5928	0,5	1,6
7,5	24671,8015	0,5	1,7	24673,0452	0,5	-0,2	24933,8931	0,5	-0,7	24933,3514	0,5	1,9
8,5	24876,9551	0,6	-0,3	24878,5802	0,5	0,0	25158,6748	0,5	-1,1	25157,8395	0,6	1,9
9,5	25105,9583	0,7	0,0	25108,0004	0,6	-1,6	25407,7435	0,6	-0,0	25406,5712	0,7	0,4
10,5	25358,5008	0,7	-0,5	25360,9967	0,7	-2,4	25680,5896	0,9	1,8	25679,0448	1,1	0,3
11,5	25634,2145	0,8	-2,7	25637,1981	0,9	-1,7	25976,6736	1,1	-1,7	25974,7348	1,6	5,7
12,5	25932,6840	1,4	1,5	25936,1741	2,2	-2,2	26295,4370	1,7	-5,7	26293,0663	1,4	0,5
$v = 9$												
0,5							26316,4838	0,6	2,1	26316,5584	0,6	2,2
1,5	26185,7895	0,5	0,5	26185,8100	0,5	0,4	26355,5023	0,5	2,5	26355,6281	0,6	0,2
2,5	26242,1482	0,4	1,2	26242,2253	0,5	0,5	26420,2965	0,6	-1,1	26420,4436	0,7	1,0
3,5	26321,2352	0,4	0,6	26321,4171	0,4	1,1	26510,5328	0,5	1,8	26510,6469	0,6	0,8
4,5	26423,1506	0,5	1,3	26423,4846	0,4	0,6	26625,7901	0,6	-0,3	26625,8256	0,5	0,5
5,5	26547,9321	0,5	1,3	26548,4692	0,5	1,0	26765,6344	0,5	-0,0	26765,5399	0,5	1,3
6,5	26695,5449	0,5	0,1	26696,3322	0,5	0,6	26929,6073	0,5	0,9	26929,3329	0,5	0,4
7,5	26865,8785	0,6	0,4	26866,9560	0,6	-1,1	27117,2390	0,6	0,3	27116,7446	0,6	1,9

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
8,5	27058,7418	0,6	0,3	27060,1509	0,6	-0,6	27328,0505	0,8	0,6	27327,2932	0,6	1,5
9,5	27273,8722	0,7	-2,2	27275,6483	0,7	-1,4	27561,5393	0,7	0,3	27560,4815	0,9	-1,3
10,5	27510,9494	0,7	-0,3	27513,1183	0,7	-2,0	27817,1820	0,8	1,1	27815,7954	0,8	0,7
11,5	27769,5798	0,9	1,4	27772,1672	0,9	-2,7	28094,4182	1,5	-1,8			
12,5	28049,3124	1,1	-0,2	28052,3438	3,1	-2,4						
13,5	28349,6526	1,7	4,6	28353,1430	2,2	2,4						
$v = 10$												
0,5							28364,6308	1,1	6,7	28364,6801	1,1	0,2
1,5	28234,0711	2,8	0,6	28234,0856	1,1	-1,7	28400,9006	1,0	1,9	28400,9937	0,8	0,3
2,5	28286,8462	0,8	0,9	28286,9094	0,6	0,3	28461,1473	1,3	0,0	28461,2537	0,9	3,4
3,5	28360,8481	0,7	-1,1	28360,9994	0,7	0,8	28545,0594	1,4	1,1	28545,1321	1,0	1,4
4,5	28456,1342	0,9	0,2	28456,4125	0,7	1,6	28652,2496	0,7	-0,7	28652,2522	0,8	2,8
5,5	28572,6979	0,9	-0,6	28573,1438	0,6	-0,9	28782,3015	0,8	1,4	28782,1827	1,5	-0,5
6,5	28710,4733	0,8	0,5	28711,1284	0,9	0,4	28934,7583	1,3	0,9	28934,4844	0,7	0,3
7,5	28869,3126	1,0	0,0	28870,2135	0,7	0,9	29109,1503	0,8	0,1	29108,6835	2,5	0,2
8,5	29049,0017	0,8	2,7	29050,1745	1,0	-1,5	29304,9829	1,1	-0,5	29304,2902	1,2	0,8
9,5	29249,2412	0,9	-0,5	29250,7244	0,9	1,2	29521,7354	1,3	1,1	29520,7688	1,4	-15,2
10,5	29469,6823	1,2	0,7	29471,4584	1,2	-32,3						
11,5	29709,8937	1,2	0,1	29712,0626	1,2	13,6						
$v = 11$												
0,5							30210,5423	18,8	-6,0	30210,5581	18,8	-8,5
1,5	30080,5982	18,8	-1,7	30080,6153	18,8	2,8	30243,8765	18,8	1,0	30243,8936	18,8	-5,7
2,5	30129,4652	18,8	17,3	30129,5171	18,8	21,3	30299,2228	18,8	1,9	30299,2169	18,8	-10,0
3,5	30197,9006	18,8	13,8	30198,0046	18,8	5,3	30376,2901	18,8	-6,7	30376,2556	18,8	1,0
4,5	30285,9221	18,8	3,8	30286,1292	18,8	1,4	30474,7544	18,8	13,8	30474,6299	18,8	13,2
5,5	30393,4949	18,8	2,6				30594,1673	18,8	30,2	30593,9329	18,8	35,3
6,5	30520,4885	18,8	-4,3									
7,5	30666,7318	18,8	0,8									
8,5	30831,9422	18,8	-2,0									
$v = 12$												
0,5							31835,0054	66,3	43,8	31834,9619	66,3	-4,0
1,5	31706,3711	66,3	-13,5	31706,4200	66,3	26,1	31865,0219	66,3	42,7	31865,0154	66,3	37,4
2,5	31750,8221	66,3	27,2	31750,8623	54,2	31,6	31914,9383	93,8	114,8	31914,8706	93,8	72,4
3,5	31812,9666	66,3	13,8	31813,0717	66,3	34,6	31984,3313	93,8	103,8	31984,1952	93,8	41,1
4,5	31892,8625	66,3	55,5	31892,9834	66,3	19,0	32072,9201	93,8	74,9	32072,7927	93,8	96,0
5,5	31990,3322	93,8	78,4	31990,4723	93,8	-36,4	32180,3955	93,8	127,9	32180,1293	93,8	113,2
6,5	32105,1746	93,8	50,2	32105,5687	93,8	69,2	32306,2000	93,8	166,9	32305,6470	93,8	-5,3
7,5	32237,2138	93,8	35,9	32237,6433	93,8	-49,4						

1. Белан Б.Д. Озон в тропосфере. Томск: ИОА СО РАН, 2010. 488 с.
2. Ortega J., Helming D., Guenter A., Harley P., Pressley S., Vogel Ch. Flux estimates and OH reaction potential of reactive biogenic volatile organic compounds (BVOCs) from mixed northern hardwood forest // Atmos. Environ. 2007. V. 41, N 26. P. 5479–5495.
3. Wilson W.J., Schwartz P.R., Neugebauer G., Harvey P.M., Becklin E.E. Infrared stars with strong 1665/1667-MHz OH microwave emission // Astrophys. J. 1972. V. 177. P. 523–540.
4. Heiles C.E. Normal OH emission and interstellar dust clouds // Astrophys. J. 1968. V. 151. P. 919–934.
5. Piccioni G., Drossart P., Zasova L., Migliorini A., Gérard J.C., Mills F.P. Virtis-Venus Express Technical Team Collaboration, et al. First detection of hydroxyl in the atmosphere of Venus // Astron. Astrophys. 2008. V. 483. P. L29–L33.
6. Atreya S.K., Gu Z.G. Stability of the Martian atmosphere: Is heterogeneous catalysis essential // J. Geophys. Res. 1994. V. 99, N E6. P. 13133–13145.
7. Maillard J.P., Chauville J., Mantz A.W. High-resolution emission spectrum of OH in an oxyacetylene flame

- from 3.7 to 0.9 μm // J. Mol. Spectrosc. 1976. V. 63. P. 120–141.
8. Ewart P., O'Leary S.V. Detection of OH in a flame by degenerate four-wavemixing // Opt. Lett. 1986. V. 11, N 5. P. 279–281.
9. Abrams M.C., Davis S.P., Rao M.L.P., Engleman Jr.R., Braut J.W. High-resolution Fourier transform spectroscopy of the Meinel system of OH // Astrophys. J. Suppl. Ser. 1994. V. 93. P. 351–395.
10. Meinel A.B. OH emission bands in the spectrum of the night sky // Astrophys. J. I. 1950. V. 111. P. 555–564; II. V. 112. P. 120–130.
11. Cosby P.C., Slanger T.G. OH spectroscopy and chemistry investigated with astronomical sky spectra // Can. J. Phys. 2007. V. 85, N 2. P. 77–99.
12. Claud J.-M., Camy-Peyret C., Maillard J.P. Higher rovibrational levels of H₂O deduced from high resolution oxygen-hydrogen flame spectra between 2800–6200 cm⁻¹ // Mol. Phys. 1976. V. 32. P. 499–521.
13. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L., Bykov A.D., Lavrentieva N.N. CDSD-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2003. V. 82. P. 165–196.

14. *Mikhailenko S.N., Tashkun S.A., Putilova T.A., Starikova E.N., Daumont L., Jenouvrier A., Fally S., Carleer M., Hermans C., Vandaele A.C.* Critical evaluation of measured rotation-vibration transitions and an experimental dataset of energy levels of HD¹⁸O // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2009. V. 110. P. 597–608.
15. *Tashkun S.A., Velichko T.I., Mikhailenko S.N.* Critical evaluation of measured pure-rotational and rotation-vibration line positions and experimental dataset of energy levels of ¹²C¹⁶O in X¹Σ state // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2010. V. 111. P. 1106–1116.
16. *Sulakshina O.N., Borkov Yu.G.* Critical evaluation of measured line positions of ¹⁴N¹⁶O in X²Π state // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2018. V. 209. P. 171–179.
17. *Abrams M.C., Davis S.P., Rao M.L.P., Engleman R.Jr.* Highly excited rotational states of Meinel system of OH // *Astrophys. J.* 1990. V. 363. P. 326–330.
18. *Sappey A.D., Copeland R.A.* Laser double-resonance study of OH (X²Π_i, v = 12) // *J. Mol. Spectrosc.* 1990. V. 143. P. 160–168.
19. *Hardwick J.L., Whipple G.C.* Far infrared emission spectrum of the OH radical // *J. Mol. Spectrosc.* 1991. V. 147. P. 267–273.
20. *Farmer C.B., Delbouille L., Roland G., Servais Ch.* The solar spectrum between 16 and 40 microns. Technical report. 1994. Unpublished.
21. *Melen F., Sauval A.J., Grevesse N., Farmer C.B., Servais Ch., Delbouille L., Roland G.* A new analysis of the OH radical spectrum from solar infrared observations // *J. Mol. Spectrosc.* 1995. V. 174. P. 490–509.
22. *Nizkorodov S.A., Harper W.W., Nesbitt D.J.* Fast vibrational relaxation of OH (v = 9) by ammonia and ozone // *Chem. Phys. Lett.* 2001. V. 341. P. 107–114.
23. *Martin-Drumel M.A., Pirali O., Balcon D., Brchignac P., Roy P., Vervoet M.* High resolution far-infrared Fourier transform spectroscopy of radicals at the AILES beamline of SOLEIL synchrotron facility // *Rev. Sci. Instrum.* 2011. V. 82, N 11. P. 113106.
24. *Bernath P.F., Colin R.* Revised molecular constants and term values for the X²Π and B²Σ⁺ states of OH // *J. Mol. Spectrosc.* 2009. V. 257. P. 20–23.
25. *Furtenbacher T., Császár A.G., Tennyson J.* MARVEL: Measured active rotational-vibrational energy levels // *J. Mol. Spectrosc.* 2007. V. 245. P. 115–125.
26. *Sulakshina O.N., Borkov Yu.G.* Critical evaluation of measured rotation-vibration line positions of ¹⁶OH in the X²Π state using Ritz method // *Proc. SPIE.* 2018. V. 10833. P. 108330D.
27. *Brooke J.S.A., Bernath P.F., Western C.M., Sneden C., Afsar M., Li G., Gordon I.E.* Line strengths of rovibrational and rotational transitions in the X²Π ground state of OH // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2016. V. 168. P. 142–157.
28. *Gordon I.E., Rothman L.S., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gama-che R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Perevalov V.I., Perrin A., Shine K.P., Smith M.-A.H., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Barbe A., Császár A.G., Devi V.M., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Jolly A., Johnson T.J., Karman T., Klei-neri I., Kyuberis A.A., Loos J., Lyulin O.M., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Moazzen-Ahmadi N., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Polyansky O.L., Rey M., Rotger M., Sharpe S.W., Sung K., Starikova E., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Wagner G., Wilzewski J., Wcislo P., Yu S., Zak E.J.* The HITRAN2016 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2017. V. 203. P. 3–69.

O.N. Sulakshina, Yu.G. Borkov. Critical evaluation of measured transition frequencies of the ¹⁶OH molecule in the X²Π state using the Ritz principle.

Critical evaluation of the available experimental data on the frequencies of the rotational and vibrational-rotational transitions of the OH molecule in the ground electronic state X²Π is performed using the Ritz combination principle. The transition frequencies weighted in accordance with the experimental errors have been processed by the RITZ program code. The analysis of the dimensionless weighted deviations made it possible to exclude "bad frequencies" from consideration and to carry out processing with a standard deviation of 1.8. As a result of critical evaluation, a set of 1056 empirical RITZ energy levels is obtained with an appropriate uncertainty for each level. The empirical Ritz energy levels are compared with the calculated levels given in the HITRAN spectroscopic database.