

Экспертный список линий поглощения молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в диапазоне 2000–3000 см^{-1}

И.А. Василенко, О.В. Науменко*

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

Поступила в редакцию 25.03.2020 г.

Получен подробный высокоточный список линий поглощения молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в важном для атмосферных приложений спектральном диапазоне 2000–3000 см^{-1} на основе объединения высокоточных данных по экспериментальным уровням энергии и вариационных расчетов интенсивностей колебательно-вращательных переходов. Экспертный список содержит 70565 линий поглощения с отсечкой по величине интенсивности 1,0E-27 $\text{см}^2/\text{мол}$. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными.

Ключевые слова: SO_2 , экспериментальные уровни энергии, вариационные расчеты; sulfur dioxide, energy levels, variational calculations.

Введение

Двуокись серы — это газ, который загрязняет атмосферу Земли и может создавать серьезную опасность для окружающей среды. Поэтому измерение концентрации этой молекулы в атмосфере методами дистанционного зондирования является важной задачей. Помимо контроля за состоянием атмосферного воздуха, спектры молекулы SO_2 необходимы для интерпретации астрофизических наблюдений. Линии поглощения SO_2 обнаружены в межзвездной среде и представляют большой интерес при исследовании атмосфер планет Солнечной системы и экзопланет [1]. Двуокись серы — индикатор вулканической деятельности, поэтому поглощение этой молекулой, наряду с другими малыми газовыми составляющими, исследуется в атмосфере Марса [2]. Также SO_2 в достаточно больших концентрациях была обнаружена в атмосфере Венеры при зондировании спутниковыми и наземными ИК-спектрометрами [3].

В последние десятилетия все большее значение приобретает дистанционное зондирование малых газовых составляющих с применением ИК-спектрометров высокого разрешения. Однако возможности такого зондирования ограничиваются атмосферными спектральными окнами прозрачности. Главные атмосферные окна прозрачности приходятся на следующие длины волн: менее 2,5, 3–5 и 8–14 $\mu\text{м}$. Вне этих спектральных окон пропускание резко уменьшается вследствие поглощения парами воды и двуокисью углерода, что затрудняет измерения.

Для молекулы SO_2 наиболее подходящими для ИК-зондирования являются полосы ν_1 , ν_3 и $\nu_1 + \nu_3$ [4, 5].

Точность восстановления концентрации малых газовых составляющих во многом определяется качеством используемой спектроскопической информации, как правило, заимствуемой из базы данных HITRAN [6] или GEISA [7]. В связи с высокой точностью, достигнутой в последние годы в вариационных расчетах центров и интенсивностей линий поглощения малых молекул, все большее внимание привлекает так называемый эмпирический, или экспертный, список линий поглощения молекул, важных для атмосферных и других приложений. Экспертные списки линий формируются путем объединения доступной экспериментальной информации и высокоточного расчета. При этом центры линий поглощения определяются из экспериментальных уровней энергии, а интенсивности представляют собой чисто расчетные значения.

В [8] проведены обзор и экспертиза всей опубликованной информации по колебательно-вращательным (КВ) переходам молекулы SO_2 в диапазоне 0–4500 см^{-1} . Для определения правильности идентификации списков линий использовались вариационные расчеты [9], а также моделирование в рамках метода эффективного гамильтониана (ЭГ). Выверенные экспертные массивы КВ переходов использовались далее для восстановления согласованных высокоточных экспериментальных уровней энергии, исходя из фундаментального принципа Ридберга—Рица и следуя идеологии, разработанной в [10]. Всего было определено 15130 высокоточных экспериментальных уровней энергии.

Высокоточные Фурье-спектры SO_2 в диапазоне 2000–3000 см^{-1} в основном исследовались в [11–15],

* Ирина Александровна Василенко (via@iao.ru);
Ольга Васильевна Науменко (olga@iao.ru).

при этом идентификация спектров проводилась параллельно с моделированием центров и интенсивностей линий методом ЭГ. Самая сильная полоса (101)–(000) была идентифицирована в [11]. Полосы (002)–(000) и (200)–(000) проанализированы в [12] и [13] соответственно. Спектр в диапазоне 2600–2900 см⁻¹ рассматривался в недавней работе [14], где дополнительно к [12] были идентифицированы слабые полосы (012)–(010) и (210)–(000). Сильная «горячая» полоса (111)–(010) изучена в [15]. Полный список опубликованных работ для диапазона 2000–3000 см⁻¹ можно найти в [8].

В настоящей работе представлен экспертный список линий поглощения ³²S¹⁶O₂ в диапазоне 2000–3000 см⁻¹, соответствующем окну прозрачности атмосферы 3–5 мкм, который важен для атмосферных и астрофизических приложений. Выбор спектрального диапазона также обусловлен необходимостью создания спектроскопического обеспечения для выполнения задания по гранту РФФИ, в котором использовалась лазерная система на кристаллах, генерирующих излучение на длинах волн, перекрывающих большую часть диапазона от 2000 до 3000 см⁻¹. При создании экспертного списка линий использовался набор экспериментальных уровней энергии из [8], дополненный новыми данными (см. следующий раздел), а также результаты вариационных расчетов [9].

Составление экспертного списка

Процедура создания экспертного списка линий состоит в корректном сопоставлении экспериментальных и расчетных (вариационных) уровней энергии, что является нетривиальной задачей ввиду значительных объемов вариационных расчетов и отсутствия в них общепринятого КВ лейбеллинга – приписывания колебательных и вращательных квантовых чисел. На первом этапе сравнение расчетных и экспериментальных уровней энергии проводится только с использованием хороших квантовых чисел, а именно полного углового момента J и симметрии молекулы. При этом сравнение уровней по энергии проводится в пределах допустимых расхождений, определяемых точностью вариационного расчета. Дополнительным критерием также служат гладкие, медленно меняющиеся с ростом квантового числа J зависимости отклонений экспериментальных уровней от расчетных для заданного значения квантового числа K_A .

Дополнительно к набору экспериментальных уровней энергии из [8] были определены 544 уровня энергии состояния (101) исходя из анализа экспериментального Фурье-спектра, зарегистрированного V.-M. Horneman [16]. Более 900 экспериментальных уровней энергии с $J \leq 70$ и $K_A \leq 24$ приведены в [17] для состояния (201)–(000), в то время как ранее были известны только 499 уровней [11]. Было также идентифицировано около 600 переходов слабой горячей полосы (211)–(010) по сравнению

с 112 переходами, ранее опубликованными в [18], что позволило получить 450 высокоточных уровней энергии по сравнению с 90 уровнями в [18]. Полоса (101)–(000) является самой сильной в диапазоне 2000–3000 см⁻¹, поэтому новые данные по экспериментальным уровням энергии колебательного состояния (101) позволили существенно уточнить селективное поглощение SO₂ в рассматриваемом диапазоне.

Поскольку для «тяжелой» молекулы SO₂ параметры гамильтониана Уотсона, определенные в [8], обладают хорошими экстраполяционными свойствами, наряду с экспериментальными уровнями при составлении экспертного списка использовались уровни энергии, предсказанные с параметрами ЭГ из [8]. Качество экстраполяционных расчетов по методу ЭГ контролировалось также сравнением с вариационным расчетом. Известно, что для вариационного расчета разность расчетной и экспериментальной энергии уровней с данным значением вращательного квантового числа K_A представляет собой плавную, медленно меняющуюся функцию от квантового числа J . Расчет по ЭГ, напротив, менее стабилен и может расходиться при далекой экстраполяции, особенно по K_A , а также в случае резонансных взаимодействий. Поэтому для всего набора предсказанных по методу ЭГ уровней, включенных в рассмотрение, исследовались отклонения от вариационного расчета и проверялось наличие упомянутых выше плавных и зависимостей.

В итоге был составлен экспертный список линий поглощения молекулы SO₂ в диапазоне 2000–3000 см⁻¹, включающем 70565 линий с отсечкой по интенсивности 1,0E-27 см/мол. и интегральной интенсивностью 6,306E-19 см/мол. Список линий содержит центр и интенсивность КВ перехода, квантовую идентификацию, энергию нижнего уровня, оценку точности центра и его отклонение от вариационного расчета. Точность центров эмпирических КВ переходов определялась исходя из погрешности восстановления соответствующих верхних и нижних эмпирических уровней энергии; для большинства переходов оценка точности составляет 0,001–0,0001 см⁻¹. Центры ~12% (8313 линий) КВ переходов определены из расчетных верхних (либо нижних) уровней энергии и имеют меньшую точность: 0,01–0,001 см⁻¹.

Фрагмент списка линий поглощения SO₂ приведен в табл. 1, а в табл. 2 – спектральные диапазоны и интегральные интенсивности для 15 наиболее сильных полос, включенных в экспертный список. Интересно, что для тяжелой молекулы SO₂ с малыми вращательными энергиями очень интенсивными оказываются так называемые «горячие» полосы (111)–(010), (201)–(100), (210)–(010), поскольку заселенность соответствующего нижнего уровня оказывается достаточно высокой даже при комнатной температуре. Как видно из табл. 2, из 15 полос поглощения в экспертном списке 10 являются «горячими». Для построения экспертных переходов горячих полос потребовалось привлечь уровни энергии, восстановленные из анализа экспериментальных спектров за пределами диапазона

Экспертный список линий поглощения молекулы SO₂ (фрагмент)

Волновое число, см ⁻¹	Интенсивность, см/мол.	v ₁ v ₂ v ₃		J K _A K _C		E _{ниж} , см ⁻¹	E _{верх} , см ⁻¹	σ, см ⁻¹	C	δ, см ⁻¹
		верхнее		нижнее						
2521,929870	1,768E-22	101	46 2 45	000	45 2 44	645,12479	3167,05466	0,000100	4	0,0272
2521,929880	2,449E-22	101	41 4 37	000	40 4 36	561,84357	3083,77345	0,000099	5	0,0304
2521,960080	6,615E-26	101	60 8 53	000	60 6 54	1250,96959	3772,92967	0,000165	4	0,0250
2521,964010	3,511E-25	101	53 1 52	000	53 1 53	854,55463	3376,51864	0,000070	5	0,0348
2521,973330	1,028E-24	101	23 4 19	000	23 2 22	180,63167	2702,60500	0,000071	5	0,0280
2521,968640	1,559E-25	101	61 2 59	000	61 2 60	1160,72252	3682,69116	0,000001	6	0,0373
2521,978210	2,064E-22	101	43 3 40	000	42 3 39	603,69211	3125,67032	0,000073	5	0,0286
2522,043130	1,612E-23	101	51 14 37	000	50 14 36	1146,89366	3668,93679	0,001000	4	0,0122
2522,032430	1,788E-22	101	45 2 43	000	44 2 42	640,02937	3162,06180	0,000071	5	0,0277
2522,048650	1,371E-22	101	44 7 38	000	43 7 37	689,98768	3212,03633	0,000070	5	0,0270
2522,068520	9,911E-26	002	50 6 44	000	49 13 37	1069,59883	3591,66735	0,000237	4	0,0241
2522,091480	6,327E-24	101	54 16 39	000	53 16 38	1347,08717	3869,17865	0,000050	5	0,0057
2522,079090	6,138E-26	101	39 9 30	000	40 7 33	608,95395	3131,03304	0,000100	5	0,0224
2522,082110	1,829E-22	101	44 4 41	000	43 4 40	632,25696	3154,33907	0,000071	5	0,0283
2522,084080	2,308E-26	101	72 4 69	000	72 2 70	1640,46456	4162,54860	0,000130	4	0,0428
2522,144100	2,315E-23	101	50 13 38	000	49 13 37	1069,59883	3591,74293	0,001000	3	0,0118
2522,136990	1,712E-22	101	43 6 37	000	42 6 36	641,913610	3164,050600	0,000071	5	0,0291
2522,144190	1,074E-22	101	45 8 37	000	44 8 36	743,033490	3265,177680	0,000097	5	0,0255
2522,158000	2,783E-26	101	46 10 37	000	47 8 40	831,726940	3353,884940	0,000124	4	0,0224

Примечание. v₁ v₂ v₃ – колебательные квантовые числа; J K_A K_C – вращательные квантовые числа; E_{ниж} – энергия нижнего уровня; E_{верх} – энергия верхнего уровня; σ – оценка точности центра КВ перехода; C – код точности центра КВ перехода, как в базе данных HITRAN2016; δ – отклонение центра экспертного перехода от вариационного расчета.

Таблица 2

Основные полосы поглощения молекулы SO₂ в диапазоне 2000–3000 см⁻¹

v ₁ v ₂ v ₃ верхнее	v ₁ v ₂ v ₃ нижнее	Спектральный диапазон, см ⁻¹	Интегральная интенсивность, см/мол.	Число КВ переходов
(101)	(000)	2199–2745	0,5292E-18	10579
(200)	(000)	2158–2481	0,4730E-19	5651
(111)	(010)	2350–2762	0,4040E-19	6355
(201)	(100)	2418–2564	0,3674E-20	3958
(002)	(000)	2452–2805	0,3520E-20	7327
(210)	(010)	2191–2397	0,3408E-20	3300
(211)	(110)	2419–2508	0,3003E-21	2740
(012)	(010)	2611–2774	0,2588E-21	3503
(210)	(000)	2728–2878	0,2237E-21	2653
(300)	(100)	2175–2378	0,7334E-22	5686
(201)	(001)	2176–2360	0,6896E-22	4175
(120)	(000)	2116–2829	0,3539E-22	3268
(003)	(001)	2605–2757	0,1337E-22	2709
(003)	(100)	2865–2928	0,5052E-23	1293
(211)	(011)	2197–2334	0,4722E-23	1758
Суммарно			0,6284E-18	64953

2000–3000 см⁻¹. Уровни энергии колебательных состояний (003), (120) и (300) были определены в [8] исходя из КВ переходов, измеренных в [19], [20] и [21] соответственно.

Экспертный список линий ³²S¹⁶O₂ доступен по адресу <https://yadi.sk/d/v8U0WJ2c8ySl7w> и может также быть получен по запросу от авторов публикации.

Сравнение экспериментальных и расчетных интенсивностей

Оценка точности результирующих списков линий – очень важный критерий их дальнейшего успешного использования. Точность центров эмпири-

ческих КВ переходов непосредственно определяется качеством экспериментальных уровней энергии. В случае интенсивностей переходов оценить точность вариационного расчета можно только исходя из его сравнения с экспериментом. На рис. 1 приведено отношение экспериментальных интенсивностей КВ переходов в полосах (101)–(000) и (111)–(010) SO₂, недавно измеренных в [5], и соответствующих вариационных значений, при этом СКО составило 4,4 и 7% соответственно. Очевидно, что в целом согласие экспериментальных и расчетных интенсивностей SO₂ очень хорошее. Наблюдаемые отдельные отклонения до 10–20% для сильных линий могут быть обусловлены отсутствием дополнительных идентификаций, связанных с одной и той же

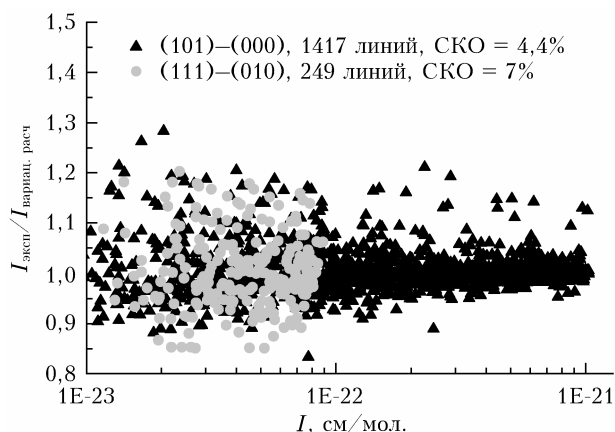


Рис. 1. Отношение экспериментальных [5] и вариационных [9] интенсивностей КВ переходов молекулы SO_2

экспериментальной линией, в [5] по причине высокой плотности экспериментального спектра.

Сравнение экспертного списка линий с литературными данными

Как показало сравнение экспертного списка линий поглощения SO_2 , полученного в настоящей работе, с базой данных HITRAN2016 (рис. 2), последняя содержит значительное количество расчетных данных, происхождение которых неясно. В частности, в диапазоне $2000\text{--}3000\text{ см}^{-1}$ HITRAN2016 содержит 11509 линий поглощения с интенсивностями между $5,0\text{E-}26$ и $1,0\text{E-}21\text{ см}^2/\text{мол.}$, в основном принадлежащих двум полосам: $(101)\text{--}(000)$ и $(002)\text{--}(000)$. Наш список линий включает 70565 линий с отсечкой по интенсивностям $1,0\text{E-}27\text{ см}^2/\text{мол.}$, в том числе линии сильной полосы $(200)\text{--}(000)$ между 2100 и 2400 см^{-1} , которая отсутствует в HITRAN2016.

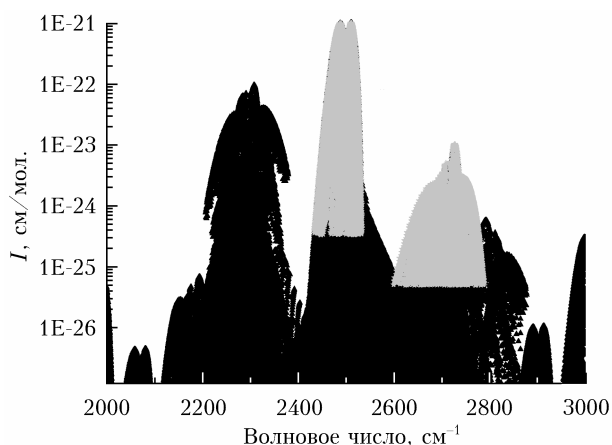


Рис. 2. Сравнение интенсивностей КВ переходов молекулы SO_2 в HITRAN2016 [6] (серый цвет, 11509 линий) и в экспертном списке линий (черный цвет, 70565 линий)

Следует отметить, что в недавней работе группы AMES [22] также был получен эмпирический список линий поглощения молекулы SO_2 в диапазоне $0\text{--}4152\text{ см}^{-1}$, который содержал 195582 КВ перехода.

В списке AMES использовались уровни энергии, определенные в [8]. В рассматриваемом в настоящей работе диапазоне список [22] содержит 27444 линии, что больше, чем HITRAN (11509), но существенно меньше, чем наш список (70565). На рис. 3 приведен эмпирический список линий SO_2 , полученный в настоящей работе. На переднем плане показаны КВ переходы, не включенные в [22].

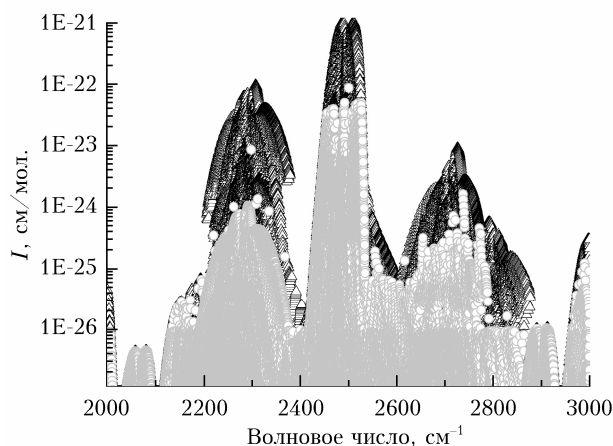


Рис. 3. Линии поглощения молекулы SO_2 из экспертного списка, полученного в настоящей работе (черный цвет, 70565 линий), и КВ переходы, отсутствующие в [22] (серый цвет, 43121 линия)

Видно, что в списке AMES отсутствует значительное количество сильных (до $1,0\text{E-}22\text{ см}^2/\text{мол.}$) линий из нашего массива данных.

Заключение

На основе экспериментальной информации по уровням энергии молекулы SO_2 и высокоточных вариационных расчетов [9] получен подробный экспертный список линий поглощения в диапазоне $2000\text{--}3000\text{ см}^{-1}$, важном для проведения дистанционного лидарного зондирования атмосферы Земли. Список содержит 70565 линий с отсечкой по интенсивности $1,0\text{E-}27\text{ см}^2/\text{мол.}$. Сравнение полученного списка линий с литературными данными показало, что новый массив данных по поглощению данной молекулы является самым полным и точным на настоящее время. Новые данные позволяют уточнить степень загрязнения атмосферы двуокисью серы.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта № АААА-А17-117021310147-0 и гранта РФФИ (проект № 18-35-00575).

1. Ceselin G., Tassinato N., Puzzarini C., Charnet A.P., Stoppa P., Giorgianni S. CO_2 , He-, and H_2 -broadening coefficients of SO_2 for ν_1 band and groundstate transitions for astrophysical applications // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2017. V. 203. P. 367–76.
2. Zurek R.W., Chicarro A., Allen M.A., Bertaux J.L., Clancy R.T., Daerden F., Formisano V., Garvin J.B., Neukum G., Smith M.D. Assessment of a 2016 mission concept: The search for trace gases in the atmosphere of Mars // Planet Space Sci. 2011. V. 59. P. 284–291.

3. *Krasnopolsky V.A.* Spatially-resolved high-resolution spectroscopy of Venus 2. Variations of HDO, OCS, and SO₂ at the cloud tops // *Icarus*. 2010. V. 209. P. 314–322.
4. *Clarisse L., Hurtmans D., Clerbaux C., Hadji-Lazaro J., Ngadi Y., Coheur P.-F.* Atmospheric Measurement Techniques Retrieval of sulphur dioxide from the infrared atmospheric sounding interferometer (IASI) // *Atmos. Meas. Tech.* 2012. V. 5. P. 581–594.
5. *Borkov Y.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.
6. *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., Gamache 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., Kleiner 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.
7. *Jacquinet-Husson N., Armante R., Scott N.A., Chédin A., Crépeau L., Boutammine C., Bouhdaoui A., Crevoisier C., Capelle V., Boone C., Poulet-Crovisier N., Barbe A., Benner Ch.D., Boudon V., Brown L.R., Buldyreva J., Campargue A., Coudert L.H., Devi V.M., Down M.J., Drouin B.J., Fayt A., Fittschen C., Flaud J.-M., Gamache R.R., Harrison J.J., Hill C., Hodnebrog Ø., Hu S.-M., Jacquemart D., Jolly A., Jiménez E., Lavrentieva N.N., Liu A.-W., Lodi L., Lyulin O.M., Massie S.T., Mikhailenko S., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A., Nielsen C.J., Orphal J., Perevalov V., Perrin A., Polovtseva E., Predoi-Cross A., Rotger M., Ruth A.A., Yu S.S., Sung K., Tashkun S.A., Tennyson J., Tyuterev V.I.G., Vander Auwera J., Voronin B.A., Makie A.* The 2015 edition of the GEISA spectroscopic database // *J. Mol. Spectrosc.* 2016. V. 327. P. 31–72.
8. *Tybiás R., Furtenbacher T., Császár A. G., Naumenko O.V., Piorier B.* Critical evaluation of measured rotational vibrational transitions of four sulphur isotopologues of S¹⁶O₂ // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2018. V. 208. P. 152–163.
9. *Underwood D., Tennyson J., Yurchenko S., Huang X., Schwenke D., Lee T., Clausen S., Fateev A.* ExoMol molecular line lists—XIV. The rotation-vibration spectrum of hot SO₂ // *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 2016. V. 459. P. 3890–3899.
10. *Furtenbacher T., Császár A.G.* MARVEL: Measured active rotational-vibrational energy levels. II. Algorithmic improvements // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2012. V. 113. P. 929–935.
11. *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. P. 280–286.
12. *Lafferty W.J., Pine A.S., Flaud J.-M., Camy-Peyret C.* The 2ν₃ band of ³²S¹⁶O₂: Line positions and intensities // *J. Mol. Spectrosc.* 1993. V. 157. P. 499–511.
13. *Lafferty W.J., Flaud J.-M., Guelachvili G.* Analysis of the 2ν₁ band system of SO₂ // *J. Mol. Spectrosc.* 1998. V. 188. P. 106–107.
14. *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Bolotova I.B., Konov I.A., Horneman V.-M., Leroy C.* High resolution analysis of the SO₂ spectrum in the 2600–2900 cm⁻¹ region: 2ν₃, ν₂ + 2ν₃ - ν₂ and 2ν₁ + ν₂ bands // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2012. V. 113. P. 500–517.
15. *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Belova A.S., Bauerecker S., Maul C., Sydov C., Horneman V.-M.* High resolution analysis of the (111) vibrational state of SO₂ // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2014. V. 144. P. 1–10.
16. *Vasilenko I., Naumenko O., Horneman V.-M.* High-resolution FTIR spectrum of SO₂ molecule between 2400 and 2650 cm⁻¹ // *Abstr. of the 25th International Conference High Resolution Molecular Spectroscopy, 2018, September 3–7th, Bilbao (Spain).* P. 286. URL: <http://www.hrms-bilbao2018.com/daily-program.html> (last access: 25.02.2020).
17. *Naumenko O.V., Vasilenko I.A., Horneman V.-M.* High Resolution FTIR Spectrum of SO₂ molecule in the region of the 2ν₁ + ν₃ // *Abstr. of the 26th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy, 26–30 August, 2019, Dijon, France. Saint-Apollinaire, 2019.* P. 74. URL: <http://vesta.u-bourgogne.fr/hrms/Program/AbsBook-HRMS-26-HRefs.pdf> (last access: 25.02.2020).
18. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Alanko S., Horneman V.-M., Leroy C.* Analysis of highly excited “hot” bands in the SO₂ molecule: ν₂ + 3ν₃ - ν₂, 2ν₁ + ν₂ + ν₃ - ν₂ // *Mol. Phys.* 2010. V. 108. P. 1253–1261.
19. *Lafferty W.J., Fraser G.T., Pine A.S., Flaud J.-M., Camy-Peyret C., Dana V., Mandin J.-Y., Barbe A., Plateaux J.J., Bouazza S.* The 3ν₃ band of ³²S¹⁶O₂: Line positions and intensities // *J. Mol. Spectrosc.* 1992. V. 154. P. 51–60.
20. *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Bolotova I.B., Leroy C., Horneman V.-M., Alanko S.* High resolution study of the ν₁ + 2ν₂ - ν₂ and 2ν₂ + ν₃ - ν₂ “hot” bands and ro-vibrational re-analysis of the ν₁ + ν₂/ν₂ + ν₃/3ν₂ polyad of the ³²SO₂ molecule // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2011. V. 112. P. 486–512.
21. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Horneman V.-M., Alanko S., Gromova O.V.* High resolution study of the 3ν₁ band of SO₂ // *J. Mol. Spectrosc.* 2009. V. 255. P. 111–121.
22. *Huang X., Schwenke D.W., Lee T.J.* Quantitative Validation of Ames IR Intensity and New Line Lists for ^{32/33/34}SO₂, ³²S¹⁸O₂, and ¹⁶O³²S¹⁸O // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2019. V. 225. P. 327–336.

I.A. Vasilenko, O.V. Naumenko. Expert list of the SO₂ molecule absorption lines in the 2000–3000 cm⁻¹ spectral region.

A detailed high-accuracy list of the SO₂ molecule absorption lines was obtained in the 2000–3000 cm⁻¹ spectral region, which is important for atmospheric applications, based on a combination of the high-accuracy data on experimental energy levels and variational calculations of the intensities of vibrational-rotational transitions. The expert list contains 70565 absorption lines with an intensity cut-off 1.0E-27 cm/molecule. The results obtained are compared with published data.