

С.А. Ташкун

## Моделирование интенсивностей $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ в диапазоне 4377–5703 $\text{cm}^{-1}$

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 20.05.2003 г.

Представлены результаты глобальной подгонки параметров модели оператора эффективного дипольного момента к измеренным интенсивностям линий основного изотопа молекулы углекислого газа  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ , взятых из публикаций. С помощью модели с 14 параметрами удалось воспроизвести интенсивности около 900 линий, принадлежащих к 16 полосам, со среднеквадратическим отклонением (RMS), равным 5,6%. На основе этой модели сгенерирован список линий для температуры  $T = 296 \text{ K}$  и отсечки по интенсивности  $I_{\text{cut}} = 10^{-27} \text{ cm}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})$ , который войдет составной частью в атмосферную версию банка CDSD. Представлено сравнение полученных результатов с данными по молекуле углекислого газа, содержащимися в банке спектроскопической информации HITRAN.

### Введение

Знание радиационных свойств молекулы  $\text{CO}_2$  в диапазоне 2  $\mu\text{m}$  важно не только для атмосферных приложений, но и для моделирования эмиссионного спектра атмосферы темной стороны Венеры [1], а также для построения высокотемпературных диодно-лазерных сенсоров [2]. В 1998–1999 гг. были опубликованы глобальные подгонки центров [3] и интенсивностей [4] колебательно-вращательных линий  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  на основе методов теории эффективных операторов. В работе [4] диапазон 2  $\mu\text{m}$  был представлен интенсивностями 342 линий, взятых из публикаций [5–9] и принадлежащих к 4 полосам.

Используя модель оператора эффективного дипольного момента с 9 варьируемыми параметрами, мы получили  $\text{RMS} = 7,8\%$ .

В течение последних лет появились работы [2, 10–14], в которых были измерены интенсивности новых полос, принадлежащих к данному диапазону. Кроме того, доктор Ваттсон указал [15], что интенсивности полосы 31103–00001, содержащиеся в HITRAN, также являются измеренными. В общей сложности в этих работах представлены интенсивности более 500 линий, принадлежащих к 12 новым полосам. Сравнение измеренных интенсивностей с теми, которые содержатся в базе данных HITRAN [16], приведено на рис. 1.

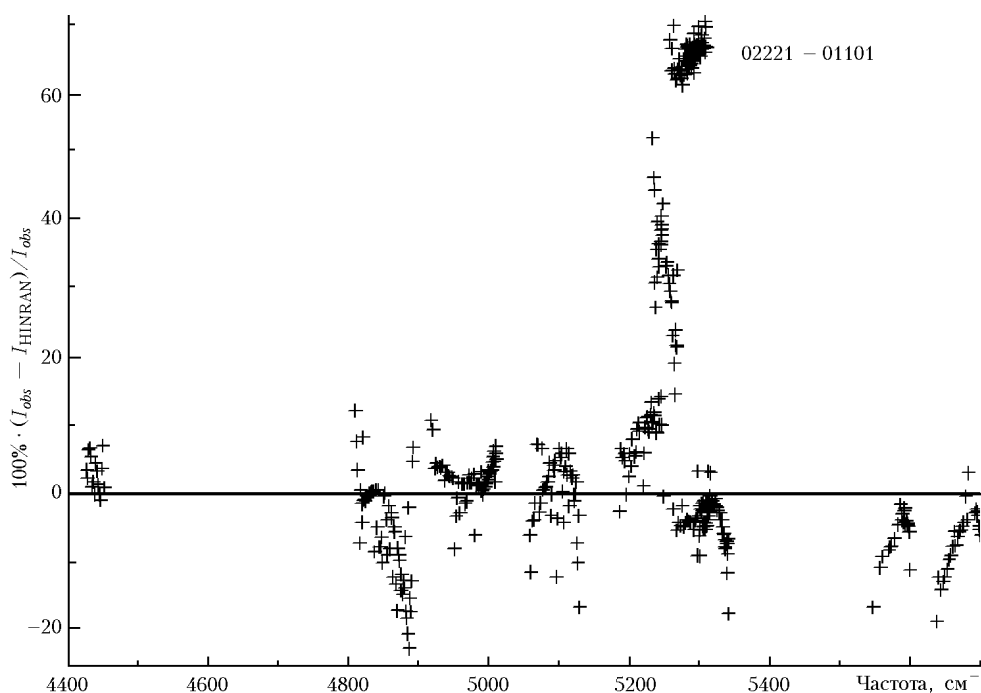


Рис. 1. Сравнение наблюдаемых интенсивностей с HITRAN

Видно, что имеются существенные различия между измерениями и базой данных. Так, для полосы 02221–01101 среднее отклонение по критерию  $100\% \cdot (I_{obs} - I_{HITRAN})/I_{obs}$  составляет  $\sim 70\%$ . Если же сравнивать интенсивности линий непосредственно, то различие может достигать нескольких раз. В качестве примера возьмем линию R-17 указанной полосы с центром  $5303,47 \text{ см}^{-1}$ . Ее измеренная интенсивность составляет  $0,391 \cdot 10^{-25} \text{ см}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})$ , в то время как в базе данных HITRAN она равна  $0,132 \cdot 10^{-25} \text{ см}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})$ . Некоторые же из измеренных полос, например 10021–01101, вообще отсутствуют в HITRAN.

Наличие большого объема вновь измеренных данных, а также большие различия между измеренными и содержащимися в HITRAN интенсивностями делают актуальным проведение новой подгонки. Подогнанные параметры оператора дипольного момента будут использованы для генерации новых версий банка данных CDSD (Carbon Dioxide Spectroscopic Databank) для атмосферных и высокотемпературных [17] приложений.

## Экспериментальные данные

Экспериментальные интенсивности линий были собраны в файл данных из работ [2, 5–14, 16]. Сводка этих данных с указанием полосы, максимального значения вращательного квантового числа  $J$ , числа линий, центра полосы, оценки колебательной интенсивности, а также ссылка на публикации приведены в табл. 1.

Таблица 1

Наблюдаемые данные, использованные в подгонке интенсивностей

Полоса	$J_{\max}$	Число линий	$\nu_0^*$	$S_V^{0**}$	Ссылка
20012–00001	60	194	4978	347,5	[2, 5, 7, 8, 12]
20011–00001	60	91	5100	109,0	[5, 12]
20013–00001	59	143	4854	78,1	[5, 6, 12]
31104–00001	60	51	4416	0,00024	[9]
32203–01101	36	32	4578	–	[10]
40004–01101	44	12	4530	–	[10]
40002–01101	16	1	4808	–	[11]
21113–01101	16	1	4808	–	[11]
01121–00001	60	84	5315	0,476	[11, 14]
00031–10002	50	37	5687	0,0068	[13]
00031–10001	51	29	5584	0,0063	[13]
30011–10002	43	34	5218	0,0228	[14]
10022–01101	40	37	5248	0,0136	[14]
02221–01101	38	88	5291	0,0360	[14]
10021–01101	34	21	5349	0,0051	[14]
31103–00001	60	68	4591	0,00289	[16]

\* Центр полосы,  $\text{см}^{-1}$ . \*\* Колебательная интенсивность полосы,  $\text{см}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2}) \cdot 10^{-22}$ , при  $T = 296 \text{ К}$ .

К сожалению, в большинстве экспериментальных работ отсутствует информация о точности измерений. В тех случаях, когда точности были приведены в публикациях, они и были использованы при подгонке. В остальных случаях использовались значения, взятые исходя из используемого экспериментального оборудования и времени регистрации спектров. Ясно, что эти цифры являются в оп-

ределенной степени субъективными. Точности измерений приведены в четвертой колонке табл. 2.

Таблица 2

Результаты подгонки, упорядоченные по полосам

Полоса	Ветвь	$J_{\max}$	Число линий	RMS, %	MR, %
00031–10001	P	35	8	5,1	–2,8
00031–10001	R	39	14	3,9	0,3
00031–10002	P	51	23	2,7	–0,1
00031–10002	R	37	14	1,4	0,5
01121–00001	P	61	24	6,9	–5,0
01121–00001	Q	61	29	2,5	1,0
01121–00001	R	57	28	5,4	5,1
02221–01101	P	36	24	8,3	4,9
02221–01101	Q	40	31	3,0	–0,5
02221–01101	R	38	31	7,0	–3,8
10021–01101	P	32	9	9,0	7,9
10021–01101	Q	35	12	6,6	–2,9
10022–01101	P	18	6	13,7	8,9
10022–01101	Q	41	14	4,5	–1,3
10022–01101	R	38	15	7,6	–1,5
20011–00001	P	47	41	4,8	1,2
20011–00001	R	45	39	4,2	1,5
20012–00001	P	61	91	3,8	–1,1
20012–00001	R	59	93	2,8	–0,4
20013–00001	P	51	61	4,8	–1,8
20013–00001	R	59	71	6,0	–1,7
21113–01101	R	16	1	8,0	–8,0
30011–10002	P	37	15	5,0	–3,4
30011–10002	R	43	19	2,9	–0,9
31104–00001	P	55	22	10,2	0,2
31104–00001	R	61	29	6,3	1,0
31103–00001	P	57	22	4,1	1,0
31103–00001	Q	35	16	1,0	0,8
31103–00001	R	61	30	3,6	0,0
32203–01101	P	38	13	10,4	–2,7
32203–01101	R	33	17	12,4	–7,1
40002–01101	R	16	1	0,3	–0,3
40004–01101	R	44	10	10,3	9,3

## Подгонка интенсивностей

Интенсивность  $S_{b \leftarrow a}(T)$  [ $\text{см}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})$ ] колебательно-вращательного перехода  $b \leftarrow a$  в условиях локального термодинамического равновесия определяется хорошо известным выражением

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

где  $T$  – температура;  $C$  – долевое содержание данного изотопа;  $\sigma_{b \leftarrow a}$  – частота перехода из нижнего состояния  $a$  в верхнее состояние  $b$ ;  $E_a$  – энергия нижнего состояния;  $k$  – постоянная Больцмана;  $Q(T)$  – статистическая сумма;  $c$  – скорость света;  $h$  – постоянная Планка;  $W_{b \leftarrow a}$  – вероятность перехода из состояния  $a$  в состояние  $b$ .

В данной статье используется феноменологическая модель оператора эффективного дипольного момента. Оператор представляет собой линейную комбинацию разрешенных по симметрии элементарных колебательных и вращательных базисных

операторов, выписанных до заданного порядка теории возмущений. Коэффициенты линейной комбинации объявляются варьируемыми параметрами. Эта модель ведет к сериальному подходу, в котором все колебательные полосы распадаются на непересекающиеся серии. Каждая серия определяется разностью

$$\Delta P = 2(v'_1 - v_1) + (v'_2 - v_2) + 3(v'_3 - v_3),$$

где  $v'_1, v'_2, v'_3$  и  $v_1, v_2, v_3$  представляют собой индексы нормальных мод верхнего и нижнего состояний полосы. Все полосы, рассматриваемые в этой работе, имеют  $\Delta P = 7$ . В рамках данного подхода выражение для вероятности перехода  $W_{b \leftarrow a} = W_{N'J'\epsilon' \leftarrow NJ\epsilon}$  между состояниями, идентифицируемыми колебательным индексом  $N$ , вращательным квантовым числом  $J$  и четностью  $\epsilon = \pm 1$ , имеет следующий вид [4]:

$$\begin{aligned} W_{N'J'\epsilon' \leftarrow NJ\epsilon} &= (2J+1) \times \\ &\times \left| \sum_{v_1 v_2 v_3} \sum_{2\Delta v_1 + \Delta v_2 + 3\Delta v_3 = 7} \sum_{\Delta l_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots} C_{N,\epsilon}^{J, v_1, v_2, l_2, v_3} \times \right. \\ &\times C_{N',\epsilon'}^{J', v_1 + \Delta v_1, v_2 + \Delta v_2, l_2 + \Delta l_2, v_3 + \Delta v_3} M_{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}^{|\Delta l_2|} \times \\ &\times \sqrt{f_{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}^{\Delta l_2}(v_1, v_2, l_2, v_3) (1 + \delta_{l_2, 0} + \delta_{l_2, 0} - 2\delta_{l_2, 0} \delta_{l_2, 0})} \times \\ &\times (1, \Delta l_2, J, l_2 | J', l_2 + \Delta l_2) [1 + \\ &+ \sum_{i=1}^3 \kappa_i^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} v_i + F_{\Delta l_2}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}(l_2, J)]^2. \quad (2) \end{aligned}$$

В (2)  $C_{N,\epsilon}^{J, v_1, v_2, l_2, v_3}$  — коэффициенты смешивания, определяющие разложение собственной функции эффективного гамильтониана нижнего состояния по базисным функциям

$$\Psi_{NJM\epsilon}^{eff} = \sum_{v_1 v_2 v_3} C_{N,\epsilon}^{J, v_1, v_2, l_2, v_3} |v_1, v_2, l_2, v_3, J, M, \epsilon\rangle,$$

где  $M$  — магнитное квантовое число. Аналогичным образом определяются и коэффициенты смешивания  $C_{N',\epsilon'}^{J', v_1, v_2, l_2, v_3}$  верхнего состояния. Фактически коэффициенты смешивания представляют собой компоненты нормированных собственных векторов, отвечающих соответствующим уровням энергии модели эффективного гамильтониана, используемого для вычисления вероятностей переходов. В данной статье в качестве модели эффективного гамильтониана была взята модель, полученная из глобальной подгонки центров линий и представленная в работе [3].

Значения функции  $f_{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}^{\Delta l_2}(v_1, v_2, l_2, v_3)$  для малых  $\Delta v_1$ ,  $\Delta v_2$  и  $\Delta v_3$  приведены в [18].  $(1, \Delta l_2, J, l_2 | J', l_2 + \Delta l_2)$  — коэффициент Клебше–Гордона. Функция  $F_{\Delta l_2}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}(l_2, J)$  зависит от типов полосы и ветви. Для параллельных полос ( $\Delta l_2 = 0$ ) она имеет вид

$$\begin{aligned} F_0^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}(l_2, J) &= b_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} m + \\ &+ d_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} [J(J+1) + m - l_2^2], \quad (3) \end{aligned}$$

где  $m = -J, 0, J+1$  для  $P$ -,  $Q$ -,  $R$ -ветвей соответственно. Для перпендикулярных полос ( $\Delta l_2 \neq 0$ ) значения этой функции зависят от ветви. Для  $Q$ -ветви она может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} F_{\Delta l_2}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}(l_2, J) &= -\frac{1}{2} b_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} (2l_2 \Delta l_2 + 1) + \\ &+ d_{JQ}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} J(J+1) - l_2^2 - \Delta l_2 (l_2 + \frac{\Delta l_2}{2}), \quad (4) \end{aligned}$$

а в случае  $P$ - и  $R$ -ветвей — в виде

$$\begin{aligned} F_{\Delta l_2}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}(l_2, J) &= -\frac{1}{4} (d_{JQ}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} - d_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}) + \\ &+ \frac{1}{2} (b_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} + d_{JQ}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}) (2l_2 \Delta l_2 + 1) + \\ &+ d_{JQ}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} l_2^2 + b_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} m + d_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} m^2 + \\ &+ (d_{JQ}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3} - d_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}) m (l_2 \Delta l_2 + \frac{1}{2}). \quad (5) \end{aligned}$$

Параметры  $M_{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}^{|\Delta l_2|}$ ,  $\kappa_i^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}$ ,  $b_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}$ ,  $d_J^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}$  и  $d_{JQ}^{\Delta v_1, \Delta v_2, \Delta v_3}$  являются варьируемыми. Их значения определяются из подгонки расчетных интенсивностей к экспериментальным.

Целью подгонки интенсивностей является минимизация безразмерного стандартного отклонения  $\chi$ , определенного следующим выражением:

$$\chi = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_l} \left( \frac{S_i^{obs} - S_i^{calc}}{\delta_i} \right)^2} / (N_l - n), \quad (6)$$

в котором  $S_i^{obs}$  и  $S_i^{calc}$  являются соответственно экспериментальной и расчетной интенсивностью  $i$ -й линии;  $\delta_i = S_i^{obs} \sigma_i / 100\%$ , где  $\sigma_i$  — ошибка измерения  $i$ -й линии, %;  $N_l$  — число подгоняемых линий;  $n$  — число варьируемых параметров модели.

Для характеристики качества подгонки в случаях, когда информация об ошибках измерения недостаточно, более удобным является использование среднеквадратичного отклонения, которое определяется так:

$$\text{RMS} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_l} \left( \frac{S_i^{obs} - S_i^{calc}}{S_i^{obs}} \right)^2}{N_l}} \cdot 100\%. \quad (7)$$

Третьей статистической характеристикой, используемой в данной статье для анализа результатов подгонки, является величина среднего остатка (MR) для данной ветви, которая определяется согласно выражению

$$\text{MR} = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} \left( \frac{S_i^{obs} - S_i^{calc}}{S_i^{obs}} \right) \cdot 100\%, \quad (8)$$

в котором  $N_b$  представляет собой число линий ветви. Для идеально подогнанной ветви MR равно 0. Большие положительные или отрицательные значения MR говорят о том, что либо вычисленные значения

интенсивностей систематически смещены относительно экспериментальных, либо подгоняемые данные содержат значительные ошибки.

Результаты подгонки по полосам представлены в табл. 2, RMS для каждой из используемых публикаций – в табл. 3, а подогнанные параметры оператора дипольного момента вместе со стандартными ошибками – в табл. 4. Следует отметить, что для достижения RMS = 5,6% нам пришлось удалить из подгонки 50 линий, которые статистически были идентифицированы как выбросы.

Таблица 3

Результаты подгонки интенсивностей, упорядоченные по ссылкам

Ссылка	Число линий	Число полос	$\sigma^*$ , %	RMS, %
[2]	3	1	3	2,5
[5]	108	3	6	6,2
[6]	54	1	1–30	5,0
[7]	55	1	1–5	1,5
[8]	33	1	7	1,4
[9]	51	1	10	8,2
[10]	40	2	10	11,3
[11]	7	3	10	6,0
[12]	143	2	1–20	3,8
[13]	58	2	2–10	3,3
[14]	252	5	2	6,1
[16]	68	1	5	3,4

\* Используемые погрешности измерений.

Таблица 4

Значения параметров оператора эффективного дипольного момента

Параметр*	Значение	Порядок
$M_{2,0,1}^0$	-0,37516(33)**	$10^{-2}$
$M_{1,2,1}^0$	0,2746(16)	$10^{-3}$
$M_{0,4,1}^0$	-0,827(38)	$10^{-5}$
$M_{-1,0,3}^0$	-0,281(80)	$10^{-5}$
$M_{0,-2,3}^0$	-0,12540(42)	$10^{-3}$
$M_{3,1,0}^1$	-0,4553(59)	$10^{-5}$
$b_J^{3,1,0}$	1,263(14)	$10^{-2}$
$M_{0,1,2}^1$	-0,7596(11)	$10^{-4}$
$b_J^{0,1,2}$	0,1529(80)	$10^{-2}$
$M_{1,-1,2}^1$	-0,1661(25)	$10^{-4}$
$b_J^{1,-1,2}$	1,75(12)	$10^{-1}$
$d_J^{1,-1,2}$	-0,82(42)	$10^{-3}$
$M_{1,5,0}^1$	0,157(28)	$10^{-6}$
$b_J^{1,5,0}$	3,21(43)	$10^{-2}$

\* Параметры  $M$  даны в Д, параметры  $b$  – безразмерны. \*\* Неопределенность в скобках представляет одно стандартное отклонение в единицах последней цифры значения параметра.

## Результаты и обсуждения

Полученное значение подгонки RMS = 5,6% показывает, что используемая модель оператора дипольного момента адекватна в целом экспериментальным данным. Анализ табл. 2 показывает также, что наибольшие отклонения между измерениями

и расчетами наблюдаются для слабых полос. Это вполне понятно, поскольку слабые полосы, как правило, регистрируются с большими погрешностями, чем сильные. Из табл. 3 следует также, что почти для всех экспериментальных источников величина RMS близка к точности измерений. Исключением является лишь источник [14], для которого используемая оценка точности, равная 2%, является, по-видимому, слишком оптимистичной.

С помощью полученных параметров для диапазона 4381–5703  $\text{см}^{-1}$  температуры 296 К и отсечки по интенсивностям  $10^{-27} \text{ см}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})$  был сгенерирован список линий, называемый далее CDS, который будет включен в будущую атмосферную версию банка CDS [17]. Ниже приведено сравнение CDS с данными по  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ , содержащимися в банке HITRAN. В указанном диапазоне HITRAN содержит 3542 линии, в то время как CDS – 5584. При этом каждая линия из HITRAN также присутствует и в CDS. Кроме того, CDS содержит 30 полос, которых нет в HITRAN. Они даны в табл. 5.

Таблица 5

Полосы, отсутствующие в базе данных HITRAN

Полоса	Число линий	Интенсивность, $\text{см}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})^*$
32201–01101	118	$3,817 \cdot 10^{-24}$
31101–00001	72	$2,469 \cdot 10^{-24}$
40001–01101	53	$7,889 \cdot 10^{-25}$
10021–01101	70	$6,511 \cdot 10^{-25}$
24412–04401	56	$1,008 \cdot 10^{-25}$
32212–12201	67	$1,631 \cdot 10^{-25}$
11122–10002	48	$1,391 \cdot 10^{-25}$
32203–01101	54	$1,299 \cdot 10^{-25}$
03321–02201	80	$1,796 \cdot 10^{-25}$
13311–01101	58	$1,033 \cdot 10^{-25}$
13312–01101	56	$9,472 \cdot 10^{-26}$
41101–10001	34	$8,046 \cdot 10^{-26}$
32212–12202	51	$8,110 \cdot 10^{-26}$
01131–11102	51	$8,508 \cdot 10^{-26}$
31111–11102	47	$7,132 \cdot 10^{-26}$
32211–12201	43	$7,259 \cdot 10^{-26}$
40014–20002	32	$6,470 \cdot 10^{-26}$
33302–02201	43	$6,278 \cdot 10^{-26}$
40012–20002	29	$5,663 \cdot 10^{-26}$
40011–20001	28	$5,095 \cdot 10^{-26}$
11121–10001	32	$5,002 \cdot 10^{-26}$
01131–11101	43	$5,947 \cdot 10^{-26}$
32202–01101	26	$4,083 \cdot 10^{-26}$
40013–20003	26	$4,240 \cdot 10^{-26}$
24411–04401	31	$3,728 \cdot 10^{-26}$
40004–01101	17	$3,726 \cdot 10^{-26}$
41102–10002	19	$2,412 \cdot 10^{-26}$
11122–02201	19	$2,030 \cdot 10^{-26}$
22213–10002	7	$7,777 \cdot 10^{-27}$
21122–01111	6	$6,258 \cdot 10^{-27}$

\* Сумма интенсивностей линий полосы при  $T = 296 \text{ К}$ .

Эта ситуация аналогична приведенной в [19], где для изотопа  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$  был также обнаружен ряд полос, отсутствующих в HITRAN. На рис. 2 представлено сравнение CDS и HITRAN. В качестве критерия сравнения интенсивностей использована величина

$$100\% \cdot (I_{\text{HITRAN}} - I_{\text{CDS}}) / I_{\text{CDS}}$$

где  $I_{\text{HITRAN}}$  и  $I_{\text{CDS}}$  — интенсивности HITRAN и CDS, взятые при  $T = 296$  К. Видно, что имеются существенные различия, достигающие 90%. Мы полагаем, что наше моделирование интенсивностей более полное и точное. Поэтому данные по  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ , представленные в банке HITRAN, нуждаются в обновлении.

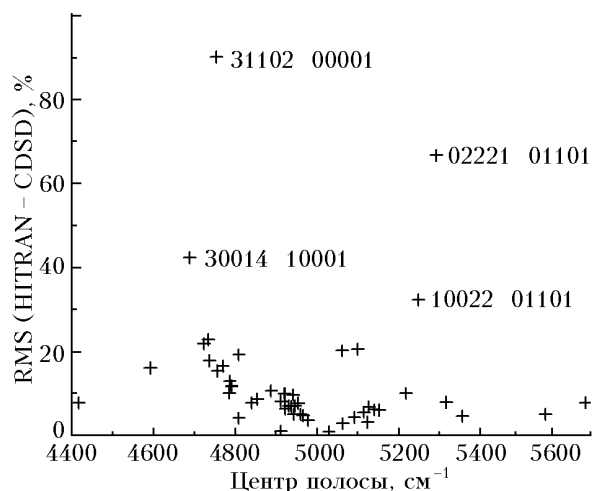


Рис. 2. Сравнение CDS- и HITRAN-интенсивностей

Автор выражает благодарность д.ф.-м.н. В.И. Первалову за полезные обсуждения результатов, представленных в данной статье.

1. Pollack J.B., Dalton J.B., Grinspoon D., Wattson R.B., Freedman R., Crisp D., Allen D.A., Bezard B., DeBergh C., Giver L.P., Ma Q., Tipping R. Near-infrared light from Venus' nightside: a spectroscopic analysis // *Icarus*. 1993. V. 103. P. 1–42.
2. Mihalcea R.M., Baer D.S., Hanson R.K. Diode-laser absorption measurements of CO<sub>2</sub> near 2.0 μm at elevated temperatures // *Appl. Opt.* 1998. V. 37. P. 8341–8347.
3. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L., Rothman L.S., Tyuterev V.I.G. Global fitting of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  vibrational-rotational line positions using the effective Hamiltonian approach // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 1998. V. 60. P. 785–801.
4. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L., Tyuterev V.I.G. Global fit of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  vibrational-rotational line intensities using the effective operator approach // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 1999. V. 62. P. 571–598.
5. Vasilevskii K.P., Danilochkina L.E., Kazbanov V.A. Intensities and halfwidths of CO<sub>2</sub> lines in the vibrational-rotational bands at 2.0 μm // *Opt. Spectrosc.* 1975. V. 38. P. 499–500.
6. Valero F.P.J., Suarez C.B., Boese R.W. Intensities and half-widths at different temperatures for the 200<sub>III</sub>←000 band of CO<sub>2</sub> at 4854 cm<sup>-1</sup> // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 1979. V. 22. P. 93–99.

7. Valero F.P.J., Suarez C.B., Boese R.W. Absolute intensities and pressure broadening coefficients measured at different temperatures for the 201<sub>II</sub>←000 band of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  at 4978 cm<sup>-1</sup> // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 1980. V. 23. P. 337–341.
8. Suarez C.B., Valero F.P.J. Line intensities of CO<sub>2</sub> at different temperatures // *J. Mol. Spectrosc.* 1990. V. 140. P. 407–411.
9. Giver L.P., Chackerian Jr. C. Rovibrational intensities for the (3110)<sub>IV</sub>←(0000) band of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  at 4416 cm<sup>-1</sup> // *J. Mol. Spectrosc.* 1991. V. 148. P. 80–85.
10. Giver L.P., Kshirsagar R.J., Freedman R.S., Chackerian Jr. C., Wattson R.B., Brown L.R. Line intensity and position measurements and derived band parameters of the 31103–00001  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  band and its two nearby hot bands // 5<sup>th</sup> Biennial HITRAN Conference. Bedford, MA. 1998. P. 30.
11. Wattson R.B., Giver L.R., Kshirsagar R.J., Freedman R.S., Chackerian Jr. C. Direct numerical diagonalization line-by-line calculations compared to line parameters in several weak interacting CO<sub>2</sub> bands near 7901 cm<sup>-1</sup> // 5<sup>th</sup> Biennial HITRAN Conference. Bedford, MA. 1998. P. 29.
12. Fukabori M., Aoki T.A., Aoki T.E., Ishida H., Watanabe T. Line strengths and half-widths of CO<sub>2</sub> in the 2.0 μm region // 5<sup>th</sup> Biennial HITRAN Conference. Bedford, MA. 1998. P. 32.
13. Kshirsagar R.J., Giver L.P., Chackerian Jr. C. Rovibrational intensities of the (0003)←(1000) dyad absorption bands of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 199. P. 230–235.
14. Giver L.P., Brown L.R., Chackerian Jr. C., Freedman R.S. The rovibrational intensities of five absorption bands of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  between 5218 and 5349 cm<sup>-1</sup> // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 2003. V. 78. P. 417–436.
15. Wattson R.B. Частное сообщение, 1998.
16. Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A., Massie S.T., Edwards D.P., Flaud J.-M., Perrin A., Camy-Peyret C., Dana V., Mandin J.-Y., Schroeder J., McCann A., Gamache R.R., Wattson R.B., Yoshino K., Chance K.V., Jucks K.W., Brown L.R., Nemtchinov V., Varanasi P. The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 edition // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 1998. V. 60. P. 665–710.
17. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L., Bykov A.D., Lavrentieva N.N. CDS-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 2003. (В печати).
18. Perevalov V.I., Lobodenko E.I., Lulin O.M., Teffo J.-L. // *J. Mol. Spectrosc.* 1995. V. 171. P. 435–452.
19. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L., Lecoutre M., Huet T.R., Campargue A., Bailly D., Esplin M.P.  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$ : Global treatment of vibration-rotation spectra and first observation of the 2ν<sub>1</sub>+5ν<sub>3</sub> and ν<sub>1</sub>+2ν<sub>2</sub>+5ν<sub>3</sub> absorption bands // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 200. P. 162–176.

#### S.A. Tashkun. Modeling of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ line intensities in the region from 4377 to 5703 cm<sup>-1</sup>.

Results of global fitting of parameters of the effective dipole moment operator to measured intensities of the principal isotopic species  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  collected from the literature are presented. Using a model with 14 parameters, we were able to reproduce the intensities of almost 900 lines belonging to 16 bands with RMS = 5,6%. With the help of the fitted model a linelist for temperature  $T = 296$  K and intensity cutoff  $I_{\text{cut}} = +10^{-27}$  cm<sup>-1</sup>/molecule cm<sup>-2</sup> was generated. The linelist will be a part of the future atmospheric version of the CDS databank. The comparison of the linelist with the HITRAN CO<sub>2</sub> data is given as well.