

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 539.194

Расчеты коэффициентов сдвига линий SO_2 давлением CO_2 : полоса $\nu_1 + \nu_3$

Т.А. Невзорова, А.С. Дударёнок[✉], Н.Н. Лаврентьева*

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

Поступила в редакцию 29.05.2024;
после доработки 10.10.2024;
принята к печати 11.10.2024

Параметры контура спектральных линий SO_2 – CO_2 необходимы при исследовании атмосфер планет, в которых диоксид углерода является основным газом (Венера, Марс и некоторые экзопланеты). Представлены рассчитанные при комнатной температуре коэффициенты сдвига линий оксида серы давлением углекислого газа в полосе $\nu_1 + \nu_3$; вращательное квантовое число углового момента J варьируется от 0 до 100, число K_a — от 0 до 20. Расчеты проведены по полуэмпирическому методу, в котором используется корректирующий фактор с подгоночными параметрами, зависящими от вращательных квантовых чисел. Немногочисленные литературные данные хорошо согласуются с полученными значениями.

Ключевые слова: параметры контура линий, сдвиг линии, оксид серы, углекислый газ; line profile parameters, line shift, sulfur dioxide, carbon dioxide.

Введение

Знание ударных параметров контура спектральных линий диоксида серы SO_2 при уширении CO_2 необходимо для исследований эволюции и свойств углекислых атмосфер планет земной группы и экзопланет [1]. Сернистый и углекислый газы являются газами вулканического происхождения и могут служить индикаторами вулканической деятельности, поэтому поглощение SO_2 изучается в атмосферах Марса [2] и Венеры [3].

В настоящее время атмосфера Марса исследуется российским спектрометром ACS в диапазоне 2,2–4,4 мкм, разрешающая способность которого превышает 50000 [4]. Низкие давление и температура — условия, характерные для атмосферы Марса и верхней мезосферы Венеры (> 70 км), выше непрозрачного облачного слоя планеты. Верхняя мезосфера Венеры — область, где малые газовые составляющие подробно изучались только инструментом SPICAV/SOIR космической миссии «Венера-Экспресс». Продолжение детальных исследований малых газовых составляющих — одна из ключевых задач, которая решается во время космических миссий на Венеру: Shukrayaan-1 Индийского космического агентства [5] и «Венера-Д» Государственной корпорации по космической деятельности «Роскосмос» [6].

Теоретические исследования экзопланет с большой вероятностью предсказывают CO_2 в качестве доминирующей компоненты в их атмосферах [7]. Недавно с помощью телескопа «Джеймс-Уэбб» было зафиксировано наличие этой молекулы в атмосфере газового гиганта [8] — это первая регистрация CO_2 в атмосфере экзопланеты.

В работе [9] приведены экспертные значения центров и интенсивностей линий поглощения молекулы SO_2 в диапазоне от 0 до 4200 см^{-1} . До 2016 г. в базе спектроскопической информации HITRAN [10] представлены коэффициенты уширения и сдвига линий, индуцированные только давлением воздуха. В дальнейшем с целью расширения возможностей использования HITRAN для планетарных исследований для нескольких молекул, в том числе оксида серы, были добавлены параметры контура линий, индуцированные давлением углекислого газа [11]. Для столкновений SO_2 – CO_2 там были представлены только коэффициенты уширения. В базе HITRAN [12] (последнее обновление) размещены уже экспериментальные [13] и полуэмпирические данные по сдвигу линий.

Измеренные коэффициенты сдвига линий SO_2 – CO_2 [13] были получены в спектральном диапазоне 2450–2530 см^{-1} на Фурье-спектрометре Bruker IFS 125HR с разрешением 0,002–0,003 см^{-1} и отношением сигнала к шуму 1500. Параметры линий были извлечены из спектра с использованием процедуры мультиспектральной подгонки [14, 15], в которой нелинейный метод наименьших квадратов применялся одновременно к спектрам, зарегистрированным в различных экспериментальных условиях.

* Татьяна Алексеевна Невзорова (taalen@iao.ru);
Анна Сергеевна Дударёнок (dudaryon@iao.ru); Нина Николаевна Лаврентьева (lnn@iao.ru).

В работе [13] получены сдвиги в полосе $\nu_1 + \nu_3$ (1417 линии) и в горячей полосе $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ (254 линии) основной изотопической модификации $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, а также сдвиги 116 линий полосы $\nu_1 + \nu_3$ изотополога $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Для вращательных квантовых чисел нижнего состояния J и K_a в пределах от 0 до 70 и от 0 до 21 соответственно значения сдвигов линий в полосе $\nu_1 + \nu_3$ для основной изотопической модификации меняются от $-0,0336$ до $0,0214 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$.

На основе данных [13] мы провели расчеты коэффициентов уширения линий SO_2 давлением CO_2 при комнатной температуре [16]. Получены значения для всех возможных переходов в P -, Q -, R -ветвях перпендикулярной полосы $\nu_1 + \nu_3$ с вращательными квантовыми числами J и K_a , изменяющимися от 0 до 100 и от 0 до 20 соответственно с $|\Delta K_a| = 0, 2, 4$.

Цель работы — сформировать список сдвигов линий оксида серы давлением углекислого газа для колебательно-вращательных переходов полосы $\nu_1 + \nu_3$. Вычисления по полуэмпирическому методу были проведены для ~ 10900 колебательно-вращательных переходов данной полосы. При этом для тех переходов, которые представлены в [17] (~ 1400 переходов), параметры линий обновлены.

Материалы и методы

Для расчета коэффициента сдвига линий нами использовался полуэмпирический метод [18], основанный на полуклассической теории ударного уширения (модель Андерсона [19, 20]), модифицированной включением в расчетную схему корректирующего фактора. В теории Андерсона относительное движение представляется прямолинейным, а межмолекулярный потенциал имеет вид суммы вкладов действующих электростатических сил. Для устранения расходимости при малых значениях ударного параметра используется «процедура прерывания».

Полуэмпирический метод специально разработан для описания процессов уширения линий молекул, характеризующихся так называемыми сильными взаимодействиями, когда расстояние наибольшего сближения сталкивающихся частиц меньше параметра прерывания теории Андерсона ($r_c < b_0$). Альтернативным методом для вычислений ширины линий молекул типа асимметричного волчка (сильные взаимодействия) является метод средних частот [21]. Для расчета коэффициентов уширения и сдвига для сильных взаимодействий можно также использовать метод Робера–Бонами, но для этого случая его основные преимущества (криволинейность траектории и учет близкодистанционной части потенциала) практически бесполезны.

Мы рассматриваем поглощающую молекулу SO_2 как полярную асимметричную молекулу с достаточно большим дипольным моментом, равным $1,61 \text{ Д}$ [22]. Хотя уширяющая молекула CO_2 неполярная, она имеет большой квадрупольный момент $4,02 \text{ Д} \cdot \text{Å}$ [23]. Это позволяет заключить, что

в столкновениях SO_2 и CO_2 основными являются диполь-квадрупольные взаимодействия, которые вносят преобладающий вклад в уширение и сдвиг линий.

Общее выражение для сдвига линии зависит от обобщенных сил линий $D^2(ii'|l)$ и $D^2(ff'|l)$ для различных каналов рассеяния $i \rightarrow i'$, $f \rightarrow f'$, связывающих нижний и верхний уровни перехода с близлежащими уровнями. Эти параметры являются квадратами приведенных матричных элементов молекулярных операторов, таких как дипольный момент или компоненты квадрупольного тензора.

Таким образом, при нашем подходе сдвиг спектральной линии, соответствующий переходу $i \rightarrow f$, может быть представлен выражением [24]:

$$\delta_{if} = B(i, f) + \sum_{l, i'} D^2(ii'|l) P_l(\omega_{ii'}) + \sum_{l, f'} D^2(ff'|l) P_l(\omega_{ff'}), \quad (1)$$

где

$$B(i, f) = -\frac{n}{c} \frac{3\pi}{8\hbar\nu} \alpha_2 \left[(\mu_f^2 - \mu_i^2) + \frac{3I_2(\alpha_f - \alpha_i)}{2(I + I_2)} \right] \times \\ \times \sum_p \rho(p) \int_0^\infty \nu F(\nu) b_0^{-3}(\nu, p, i, f) d\nu,$$

i, f — квантовые числа начального и конечного состояний поглощающей молекулы; $D^2(ii'|l)$ и $D^2(ff'|l)$ — силы дипольных ($l = 1$), квадрупольных ($l = 2$) переходов; $P_l(\omega_{ii'})$ и $P_l(\omega_{ff'})$ — функции эффективности для каналов рассеяния $i \rightarrow i'$ и $f \rightarrow f'$; n — число молекул буферного газа в единице объема; ν — относительная скорость сталкивающихся молекул; α_2 — средняя дипольная поляризуемость уширяющей молекулы; μ_i, μ_f и α_i, α_f — дипольные моменты и средние дипольные поляризуемости поглощающей молекулы в начальном и конечном состояниях; I и I_2 — потенциалы ионизации поглощающей и уширяющей молекул; $\rho(p)$ — заселенность уровня p уширяющей молекулы; $F(\nu)$ — функция распределения Максвелла; $b_0(\nu, p, i, f)$ — параметр прерывания из теории Андерсона [19, 20]. Функция эффективности взаимодействия записывается в виде

$$P_l(\omega) = \frac{n}{c} \sum_p \rho(p) \sum_{l', p'} A_{ll'} D^2(pp'|l') I_{fll'}(k),$$

где $A_{ll'}$ — нормировочный коэффициент; $I_{fll'}(k)$ — резонансная функция от параметра неадиабатичности k (мнимая часть). Параметр k выражается как

$$k_{ii'pp'} = \frac{2\pi cb}{\nu} (\omega_{ii'} + \omega_{pp'}),$$

где b — прицельный параметр.

Второе и третье слагаемые в формуле (1) определяются вторым порядком функции $S_2(b)$ [20], которая для случая $\text{SO}_2\text{—CO}_2$ может быть записана в виде [25]:

$$S_2(b) = S_2^{12e}(b) + S_2^{22e}(b) + S_2^{22p}(b) + S_2^{02p}(b) + S_2^{120p}(b). \quad (2)$$

Здесь верхние индексы *e* и *p* означают электростатическую и поляризационную части межмолекулярного потенциала соответственно. Слагаемые $S_2^{12e}(b)$ и $S_2^{22e}(b)$ обусловлены диполь-квадрупольными ($\sim 1/b_0^6$) и квадруполь-квадрупольными ($\sim 1/b_0^8$) частями потенциала, тогда как $S_2^{22p}(b)$, $S_2^{02p}(b)$, $S_2^{120p}(b)$ — индукционными и дисперсионными ($\sim 1/b_0^{10}$) взаимодействиями [20]. Поскольку b_0 для столкновений $\text{SO}_2\text{—CO}_2$ достаточно большое (~ 10 Å), то вкладом поляризационных взаимодействий можно пренебречь. Таким образом, в (2) учитывались только электростатические взаимодействия.

В табл. 1 приведены необходимые для расчетов параметры: дипольный и квадрупольный моменты молекулы диоксида серы, квадрупольный момент молекулы углекислого газа, потенциалы ионизации и средние дипольные поляризуемости поглощающей и уширяющей молекул [17]. Поскольку нет литературных данных о величине дипольной поляризуемости α_f для молекулы SO_2 в возбужденном состоянии, мы определили значение $\alpha_f = 4,001$ Å³ исходя из сравнения вычисленных и экспериментальных [13] коэффициентов сдвига линий. Расчеты выполнялись для комнатной температуры $T = 296$ К.

Таблица 1
Используемые в расчетах параметры потенциала молекул SO_2 и CO_2 [17]

Параметр	Молекула	
	SO_2	CO_2
Дипольный момент, Д	1,61	0
Квадрупольный момент, Д · Å	4,4	-4,02
Потенциал ионизации, эВ	12,34	13,79
Средняя дипольная поляризуемость, Å ³	3,78	2,59

В нашем подходе функции эффективности взаимодействия $P_l(\omega_{i' i'})$ и $P_l(\omega_{f' f'})$ рассматриваются как произведения функций эффективности из теории Андерсона и корректирующего фактора:

$$P_l(\omega_{i' i'}) = C_l(\omega_{i' i'}) P_l^A(\omega_{i' i'}), \quad (3)$$

$$P_l(\omega_{f' f'}) = C_l(\omega_{f' f'}) P_l^A(\omega_{f' f'}).$$

Форма корректирующего фактора подбирается для каждой рассматриваемой системы взаимодействующих молекул из анализа вращательных зависимостей измеренных значений. Этот фактор компенсирует недостатки и приближения теории Андерсона, в том числе и игнорирование поляризационных взаимодействий, близкоедействующих сил отталкивания, искривление траектории при столкновениях и т.д. В нашем случае (из анализа вращательных зависимостей измеренных сдвигов линий $\text{SO}_2\text{—CO}_2$) корректирующий фактор был выбран в виде двухпараметрического выражения [18]:

$$C(J_i) = \frac{c_1}{1 + c_2 \sqrt{J_i}}, \quad (4)$$

$$C(J_f) = \frac{c_1}{1 + c_2 \sqrt{J_f}}, \quad (5)$$

где c_1 , c_2 — подгоночные параметры, одинаковые для начального и конечного состояний. В результате подгонки к экспериментальным сдвигам *R*-ветви [13] методом наименьших квадратов были определены параметры полуэмпирической модели ($c_1 = 25,0$; $c_2 = 0,1$; обозначим этот набор параметров как подгонка № 1). При этом для обновленных расчетов, относительно приведенных в [17], существенно улучшилось значение среднеквадратичного отклонения (СКО) вычисленных сдвигов от измеренных для линий *R*-ветви при $K_a = 0$, оно теперь составляет $0,0026$ см⁻¹ · атм⁻¹ ($0,0034$ см⁻¹ · атм⁻¹ в [17]). Общая величина СКО не поменялась. Сравнение расчетов между собой показывает, что 90% сдвигов линий (1270 линий) отличаются менее чем на $0,001$ см⁻¹ · атм⁻¹.

Результаты и обсуждение

Мы рассчитали сдвиги линий для всех возможных переходов в *P*-, *Q*-, *R*-ветвях перпендикулярной полосы $\nu_1 + \nu_3$ (вращательные квантовые числа $J'' = 0\text{—}100$, $K'' = 0\text{—}20$, $\Delta K_a = 0$, ~ 10900 линий). Значения сдвигов линий для *P*- и *R*-ветвей находятся в интервале от $-0,019$ до $0,008$ см⁻¹ · атм⁻¹, тогда как для некоторых линий *Q*-ветви они существенно больше по абсолютному значению — до $0,047$ см⁻¹ · атм⁻¹ (рис. 1). На рис. 1 представлено девять таких сдвигов. Чтобы выяснить, для каких переходов получены большие величины δ , были рассмотрены вращательные зависимости для $K_a = 1, 2, 3$. Оказалось, что $|\delta| > 0,020$ см⁻¹ · атм⁻¹ для $J = 7\text{—}14$ ($K_a = 1$), $J = 9\text{—}22$ ($K_a = 2$), $J = 14\text{—}28$ ($K_a = 3$).

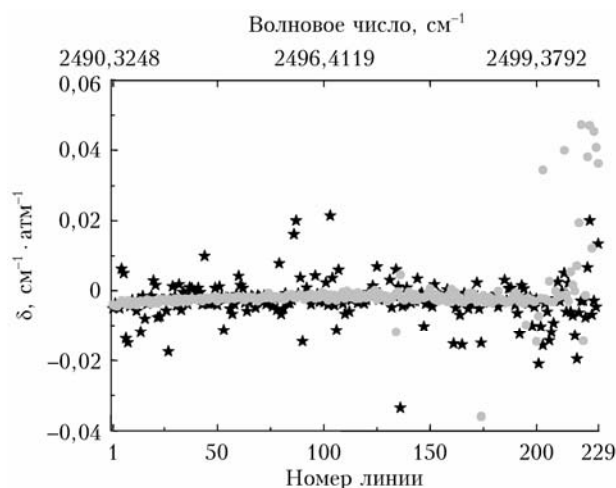


Рис. 1. Вычисленные в настоящей работе (подгонка № 1 — кружки) и измеренные ([13], звездочки) коэффициенты сдвига линий *Q*-ветви SO_2 давлением CO_2 . Номер линии соответствует увеличению частоты перехода

Рассмотрим отдельно сдвиги линий *P*-, *Q*-, *R*-ветвей для переходов с двумя нижними состояниями 15 2 13 и 15 2 14. В табл. 2 приведены

результаты расчетов с использованием начальных значений подгоночных параметров ($c_1 = 1,0$; $c_2 = 0,0$) и полученных в настоящей работе в результате подгонки к экспериментальным сдвигам линий R -ветви (подгонка № 1). Видно, что сдвиги линий Q -ветви без поправочного фактора и с ним различаются более чем в 10 раз, для P -, R -ветвей изменения относительно небольшие.

Таблица 2
Сдвиги линий ($\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$), рассчитанные для двух вариантов параметров полуэмпирической модели

Номер перехода	$J' K'_a K'_c \leftarrow J'' K''_a K''_c$	$c_1 = 1,0$; $c_2 = 0,0$	$c_1 = 25,0$; $c_2 = 0,1$
1	14 2 12 $\leftarrow$ 15 2 13	-0,00308	-0,0037
2	15 2 14 $\leftarrow$ 15 2 13	-0,00641	-0,0503
3	16 2 14 $\leftarrow$ 15 2 13	-0,00275	0,0002
4	14 2 13 $\leftarrow$ 15 2 14	-0,00307	-0,0022
5	15 2 13 $\leftarrow$ 15 2 14	0,00024	0,0453
6	16 2 15 $\leftarrow$ 15 2 14	-0,00339	-0,0037

Анализ составляющих частей в выражении (1) показал, что максимальные вклады каналов рассеяния в сдвиг достигаются при соблюдении двух условий.

1. Значения резонансной функции для верхнего или нижнего состояний находятся вблизи максимума в случае каналов рассеяния, для которых характерны относительно большие силы дипольных переходов.

2. Большие различия в значениях произведений сил столкновительных переходов и корректирующего фактора для начального и конечного состояний. Иллюстрацией служит рис. 2, где представлены резонансные функции для случая диполь-квадрупольного взаимодействия $I f_{dq}$ и силы дипольных переходов, домноженные на корректирующий фактор $\tilde{D}$ (линия 15 2 14 $\leftarrow$ 15 2 13). При значениях корректирующего фактора около единицы различие параметров $\tilde{D}$ для начального и конечного состояний относительно мало, тогда как при увеличении S эти различия возрастают, что с соблюдением первого условия приводит к относительно большому сдвигу для обеих линий Q -ветви, указанных в табл. 2. Для линий P - и R -ветвей из табл. 2 в результате вычислений не получаем одновременно большие разности резонансных функций и большие разности сил столкновительных переходов, домноженных на корректирующий фактор, поэтому сдвиги линий малы ($|\delta| \leq 0,005 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$).

Таким образом, с использованием методики коррекции, описанной в [17], нет возможности подобрать параметры полуэмпирической модели, которые бы адекватно описывали сдвиги линий SO_2 давлением CO_2 в полосе $\nu_1 + \nu_3$ одновременно для P -, Q -, R -ветвей в широком диапазоне вращательных квантовых чисел. Поэтому при вычислениях коэффициентов сдвигов линий Q -ветви расчетная схема была скорректирована. Мы оставили без изменений второе слагаемое в выражении (1), связанное со вкладами столкновительных переходов из начального состояния, а в третье слагаемое был введен корректирующий фактор, как в [17]. Такой

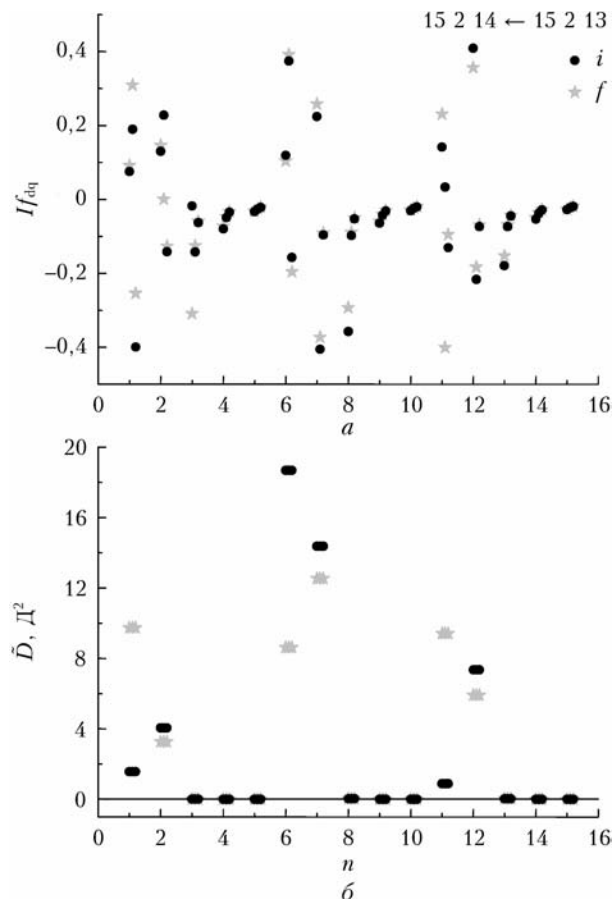


Рис. 2. Резонансная функция $f_{dq}(k)$ (а) и параметр $\tilde{D}$ (б). n — индекс суммирования в выражении (1)

подход представляется логичным, поскольку параметры верхнего состояния, такие как средняя дипольная поляризуемость и квадрупольный момент молекулы SO_2 , известны с меньшей точностью, чем для нижнего состояния.

После процедуры подгонки с применением нового подхода (подгонка № 2) СКО вычисленных и измеренных [13] данных для линий Q -ветви достигло $0,0065 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ (для подгонки № 1 — $0,0100 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$). На рис. 3 представлены результаты

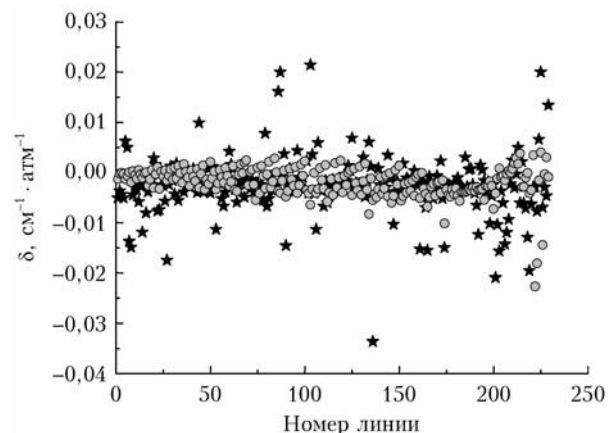


Рис. 3. Вычисленные в настоящей работе (подгонка № 2 — кружки) и измеренные в [13] (звездочки) коэффициенты сдвига линий Q -ветви SO_2 давлением CO_2

расчетов и измерений [13] для Q-ветви. Величина СКО для всех переходов изменилась с 0,0061 [17] на 0,0052 см⁻¹ · атм⁻¹. В табл. 3 приведены корректирующие факторы и параметры модели, использованные в последнем варианте расчетов.

Таблица 3

Детали полуэмпирических вычислений

Расчет	Корректирующий фактор	c_1	c_2	Ветвь
Подгонка № 1	(4), (5)	25,0	0,1	R, P
Подгонка № 2	(5)	7,0	0,3	Q

В Приложении (https://ao.iao.ru/auxiliary/37-12-01/12-01_supplement.txt) приведены данные для всех возможных переходов в P-, Q-, R-ветвях полосы $\nu_1 + \nu_3$ с максимальными значениями вращательных квантовых чисел $J'' = 100$ и $K''_a = 20$ и при $K'_a = K''_a$.

Заключение

Получен большой массив (~10900) вычисленных по полуэмпирическому методу коэффициентов сдвига линий диоксида серы, индуцированного давлением углекислого газа, в полосе $\nu_1 + \nu_3$. Квантовое число полного углового момента достигает 100. Для проведения расчетов в других полосах поглощения требуются новые экспериментальные сдвиги колебательно-вращательных линий для уточнения средней дипольной поляризуемости молекулы оксида серы в возбужденном состоянии.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 24-22-00170).

Список литературы

1. Forget F., Leconte J. Possible climates on terrestrial exoplanets // Philos. Trans. Roy. Soc. A: Math., Phys. Eng. Sci. 2014. V. 372, N 20130084. P. 1–25. DOI: 10.1098/rsta.2013.0084.
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. DOI: 10.1016/j.pss.2010.07.007.
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. DOI: 10.1016/j.icarus.2010.05.008.
4. Korablev O., Montmessin F., Trokhimovskiy A., Fedorova A.A., Shakun A.V., Grigoriev A.V., Moshkin B.E., Ignatiev N.I., Forget F., Lefevre F., Anufreychik K., Dzuban I., Ivanov Y.S., Kalinnikov Y.K., Kozlova T.O., Kungurov A., Makarov V., Martynovich F., Maslov I., Merzlyakov D., Moiseev P.P., Nikolskiy Y., Patrakeev A., Patsaev D., Santos-Skripko A., Sazonov O., Semena N., Semenov A., Shashkin V., Sidorov A., Stepanov A.V., Stupin I., Timonin D., Titov A.Y., Viktorov A., Zharkov A., Altieri F., Arnold G., Belyaev D.A., Bertaux J.L., Betsis D.S., Duxbury N., Encrenaz T., Fouchet, Gérard, Grassi, Guerlet, Harogh P., Kasaba Y., Khatuntsev I., Krasnopolsky V.A., Kuzmin R.O., Lellouch E., Lopez-Valverde M.A., Luginin M., Määttänen A., Marcq E., Martin Torres J.,

Medvedev A.S., Millour E., Olsen K.S., Patel M.R., Quantin-Nataf C., Rodin, Shematovich, Thomas I., Thomas N., Vazquez L., Vincendon M., Wilquet V., Wilson C.F., Zasova L.V., Zelenyi L.M., Zorzano M.P. The Atmospheric Chemistry Suite (ACS) of three spectrometers for the ExoMars 2016 Trace Gas Orbiter // Space Sci. Rev. 2018. V. 214, N 7. P. 1–62. DOI: 10.1007/s11214-017-0437-6.

5. Shaji N. ISRO Venus Orbiter Mission (2019). URL: <https://www.lpi.usra.edu/vexag/meetings/archive/vexag17/presentations/Nigar.pdf> (last access: 10.09.2024).
6. Zasova L.V., Gorinov D.A., Eismont N.A., Kovdalenko I.D., Abbakumov A.S., Bober S.A. Venera-D: A design of an automatic space station for Venus exploration // Solar Syst. Res. 2019. V. 53, N 7. P. 506–510. DOI: 10.1134/S0038094619070244.
7. Forget F., Leconte J. Possible climates on terrestrial Exoplanets // Philos. Trans. Roy. Soc. A: Math., Phys. Eng. Sci. 2014. V. 372, N 20130084. DOI: 10.1098/rsta.2013.0084.
8. JWST Transiting Exoplanet Community Early Release Science Team. Identification of carbon dioxide in an ExoPlanet atmosphere // Nature. 2023. V. 614. P. 649–652. DOI: 10.1038/s41586-022-05269-w.
9. Василенко И.А., Науменко О.В., Horneman V.-M. Экспертный список линий поглощения молекулы ³²S¹⁶O₂ в диапазоне 0–4200 см⁻¹ // Оптика атмосф. и океана. 2023. Т. 36, № 1. С. 5–11. DOI: 10.15372/AOO20230101; Vasilenko I.A., Naumenko O.V., Horneman V.-M. Expert list of absorption lines of the ³²S¹⁶O₂ molecule in the 0–4200 cm⁻¹ spectral region // Atmos. Ocean. Opt. 2023. V. 36, N 3. P. 199–206.
10. 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. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 203, P. 3. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.06.038.
11. Wilzewski J.S., Gordon I., Kochanov R.V., Hill C., Rothman L.S. H₂, He, and CO₂ line-broadening coefficients, pressure shifts and temperature-dependence exponents for the HITRAN database. Part 1: SO₂, NH₃, HF, HCl, OCS, and C₂H₂ // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 168. P. 193–206. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.09.003.
12. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hashemi R., Karlovets E.V., Skinner F.M., Conway E.K., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Wcislo P., Finenko A.A., Nelson K., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Coustenis A., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Mlawer E.J., Nikitin A.V., Perevalov V.I., Rotger M., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Canèw E., Császár A.G., Dudaryonok A., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbay H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneman V.-M., Huang X., Karman T., Karns J., Kass S., Kleiner I., Kofman V., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N.N., Lee T.J., Long D.A.,

- Lukashevskaya A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Mondelain D., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Perrin A., Polyansky O.L., Raddaoui E., Raston P.L., Reed Z.D., Rey M., Richard C., Tóbiás R., Sadiek I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Auwera J.V., Vasilenko I.A., Vigan A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 2022. V. 277, N 1. P. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.
13. Borkov Yu.G., Lyulin O.M., Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A., Deichuli V.M., Perevalov V.I. CO₂-broadening and shift coefficients of sulfur dioxide near 4 μm // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2019. V. 225. P. 119–124. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.12.030.
 14. Carlotti M. Global-fit approach to the analysis of limb-scanning atmospheric measurements // *Appl. Opt.* 1988. V. 27. P. 3250–3254. DOI: 10.1364/AO.27.003250.
 15. Benner D.C., Rinsland C.P., Malathy D.V., Devi V.M., Smith M.A.H., Atkins D. A multispectrum nonlinear least squares fitting technique // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 1995. V. 53. P. 705–721. DOI: 10.1016/0022-4073(95)00015-D.
 16. Невзорова Т.А., Дударёнок А.С., Лаврентьева Н.А., Лаврентьева Н.Н. Расчет коэффициентов уширения линий оксида серы в перпендикулярной полосе $\nu_1 + \nu_3$ давлением углекислого газа при комнатной температуре // *Оптика атмосф. и океана*. 2023. Т. 36, № 2. С. 81–85. DOI: 10.15372/AOO20230201; Nevzorova T.A., Dudaryonok A.S., Lavrentiev N.A., Lavrentieva N.N. Calculation of broadening coefficients of sulfur dioxide lines by carbon dioxide in the $\nu_1 + \nu_3$ A-type band at room temperature // *Atmos. Ocean. Opt.* 2023. V. 36, N 4. P. 287–292.
 17. Nevzorova T.A., Dudaryonok A.S., Lavrentiev N.A., Bykov A.D., Lavrentieva N.N. Coefficients of carbon dioxide pressure-induced line shift of sulfur dioxide at room temperature: The $\nu_1 + \nu_3$ band // *Russ. J. Phys. Chem.* 2024. P. 1–5. DOI: 10.1134/S0036024424700018.
 18. Bykov A.D., Lavrentieva N.N., Sinita L.N. Semi-empirical approach of the calculation of H₂O and CO₂ line broadening and shifting // *Mol. Phys.* 2004. V. 102, N 14–15. P. 1653–1658. DOI: 10.1080/00268970410001725765.
 19. Anderson P.W. Pressure broadening in the microwave and infrared regions // *Phys. Rev.* 1949. V. 76. P. 647–661. DOI: 10.1103/PhysRev.76.647.
 20. Tsao C.J., Curnutte B. Line-width of pressure-broadened spectral lines // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 1961. V. 2. P. 41–91. DOI: 10.1016/0022-4073(62)90013-4.
 21. Дударёнок А.С., Лаврентьева Н.Н., Ма Q. Метод средних частот для расчета полуширин линий молекул типа асимметричного волчка // *Оптика атмосф. и океана*. 2015. Т. 28, № 8. С. 675–681. DOI: 10.15372/AOO20150801; Dudaryonok A.S., Lavrentieva N.N., Ma Q. The average energy difference method for calculation of line broadening of asymmetric tops // *Atmos. Ocean. Opt.* 2015. V. 28, N 6. P. 503–509.
 22. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике М.: Атомиздат, 1980. 280 с.
 23. Graham C., Pierrus J., Raab R.E. Measurement of the electric quadrupole moments of CO₂, CO, and N₂ // *Mol. Phys.* 1989. V. 67, N 4. P. 939–955. DOI: 10.1080/00268978900101551.
 24. Lavrentieva N., Osipova A., Sinita L., Claveau Ch., Valentin A. Shifting temperature dependence of nitrogen-broadened lines in the ν_2 band of H₂O // *Mol. Phys.* 2008. V. 106. P. 1261–1266. DOI: 10.1080/00268970802159948.
 25. Барб А., Буазза С., Плату Ж.Ж., Быков А.Д., Лаврентьева Н.Н., Синица Л.Н. Сдвиг давлением N₂ и O₂ линий поглощения колебательных полос $\nu_1 + \nu_3$, $2\nu_1$ и $2\nu_3$ озона // *Оптика атмосф. и океана*. 1993. Т. 6, № 4. С. 349–359.

T.A. Nevzorova, A.S. Dudaryonok, N.N. Lavrentieva. Calculations of SO₂ line shift coefficients by CO₂ pressure: the $\nu_1 + \nu_3$ band.

The SO₂–CO₂ line profile parameters are important to study the carbon dioxide atmospheres of terrestrial planets (Venus, Mars) and exoplanets. The carbon-dioxide shift coefficients of sulfur dioxide lines in $\nu_1 + \nu_3$ band are calculated at room temperature; the rotational quantum numbers J varies from 0 to 100 and K_a varies from 0 to 20. Calculations were made using a semi-empirical method, which includes a correction factor with adjustable parameters depending on the rotational quantum numbers. The calculated shift coefficients are in a good agreement with few published data.