

01

Анализ и аналитическое представление коэффициентов сдвига центров линий поглощения водяного пара давлением воздуха в видимом диапазоне

© В.И. Стариков

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
Томск, Россия

e-mail: vstarikov@yandex.ru

Поступила в редакцию 21.04.2025 г.

В окончательной редакции 21.04.2025 г.

Принята к публикации 21.12.2025 г.

Предложена аналитическая модель $\delta(sur)$ для расчета коэффициентов сдвига δ центров линий поглощения молекулы водяного пара давлением воздуха в видимом диапазоне. Модель $\delta(sur)$ зависит от подгоночных параметров и линейно зависит от коэффициента уширения линии. Выделено два набора из 642 и 3241 экспериментальных значений δ , полученных для линий из диапазонов 10150–14000 cm^{-1} и 10150–22637 cm^{-1} . Средняя точность восстановления коэффициентов δ по модели $\delta(sur)$ составила 16,9 и 22,9% для первого и второго набора соответственно. Проведено сравнение расчетов по модели $\delta(sur)$ с расчетами по полуклассическому методу и с базой данных HITRAN.

Ключевые слова: водяной пар, сдвиги линий, воздух, аналитическое представление.

DOI: 10.61011/OS.2026.01.62609.7849-25

Введение

Знание сдвигов центров линий молекулы водяного пара давлением атмосферных газов в видимой области спектра является важным для атмосферных приложений. В работе [1], например, показано, что пренебрежение сдвигом центра линии $\lambda = 634,38 \text{ nm}$ приводит к погрешности в 10 и 20% при зондировании вертикального профиля влажности атмосферы на высотах до 10 и 20 km. К настоящему времени получен большой набор экспериментальных и расчетных данных для коэффициентов уширения (γ) и сдвига (δ) колебательно-вращательных (КВ) линий поглощения водяного пара давлением воздуха. Наиболее полная информация по этим коэффициентам содержится в базе данных HITRAN [2].

Анализ экспериментальных данных (включающий поиск ошибочных значений) для коэффициентов γ для линий молекулы H_2O из диапазона 380–22593 cm^{-1} дан в работе [3]. Там же предложена аналитическая модель $\gamma(sur)$ („sur“ обозначает „поверхность“), позволяющая проводить вычисления коэффициентов γ для линий любой колебательной полосы $(0, 0, 0) \rightarrow (v_1, v_2, v_3)$ из указанного диапазона; v_1, v_2, v_3 — колебательные квантовые числа. Зависимость модели $\gamma(sur)$ от вращательных квантовых чисел J, K_a, K_c молекулы H_2O является нелинейной. В работе [4] были получены экспериментальные данные для коэффициентов уширения γ и сдвига δ линий 4 колебательных полос H_2O с верхним колебательным состоянием $(v_1, v_2, v_3) = (3, 0, 1), (2, 2, 1), (2, 0, 2)$ и $(1, 4, 1)$, лежащих в спектральном диапазоне 13338–13966 cm^{-1} . При анализе этих данных

в [4] найдены эмпирические соотношения, связывающие коэффициенты δ и γ для линий, уширенных давлением воздуха, азота, кислорода и аргона. Для уширения линий H_2O давлением воздуха это соотношение имеет вид

$$\text{Sh} = 0.363\Gamma - 0.0476. \quad (1)$$

Здесь коэффициенты сдвига (Sh) и уширения (Γ) определены в $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$.

Цель настоящей работы заключается в том, чтобы, 1) используя аналитическую модель $\gamma(sur)$ из [2] для коэффициентов уширения γ , получить аналитическое соотношение для коэффициентов сдвига $\delta(sur)$, подобное соотношению (1), но применимое для более широкого спектрального диапазона, 2) провести анализ совместности экспериментальных данных для коэффициентов сдвига. Для уширения линий водяного пара давлением азота и кислорода подобная задача решена в работе [5].

Аналитическая модель для коэффициентов δ и анализ совместности экспериментальных данных

Аналитическое соотношение $\delta(sur)$ для коэффициентов сдвига δ имеет вид

$$\delta(sur) = q_1\gamma(sur) + q_2(1 + q_3v_1 + q_4v_2 + q_5v_3) \quad (2)$$

и вводится как обобщение формулы (1). В этой формуле $\gamma(sur)$ определяет коэффициенты уширения линий H_2O

Таблица 1. Параметры модели $\gamma(sur)$ (3)–(5)*

x_{20}	$0.4892 (25) \cdot 10^{-1}$	x_{30}	$0.2387 (36)$
x_{21}	$0.2972 (367) \cdot 10^{-1}$	x_{31}	$-0.1697 (225) \cdot 10^{-2}$
x_{22}	$-0.9190 (464) \cdot 10^{-1}$	t_{121}	$0.2560 (115) \cdot 10^{-1}$
x_{23}	$-0.5114 (404) \cdot 10^{-2}$	t_{122}	0.0
x_{24}	$0.3692 (361) \cdot 10^{-2}$	t_{123}	$0.2002 (169) \cdot 10^{-1}$
x_{25}	0.0	t_{221}	$-0.2767 (340) \cdot 10^{-1}$
x_{26}	$0.1349 (75) \cdot 10^{-2}$	t_{222}	$0.1638 (392) \cdot 10^{-1}$
x_{27}	0.0	t_{223}	$-0.4953 (506) \cdot 10^{-1}$

*Параметры x_{20} и x_{26} имеют размерность $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$, другие параметры безразмерны, в формуле (3) $x_4 = 0$.

и имеет вид [3]

$$\gamma(sur) = x_2 \{ 1/\text{Cosh}[x_3(K_i - x_4)] + 1/\text{Cosh}[x_3(K_f - x_4)] \}, \quad (3)$$

в котором

$$\begin{aligned} x_2 &= (x_{20} + x_{26}|K_{ai} - K_{af}| + x_{27}(J_f - K_{cf})) \\ &\times f_1(v)/\text{Cosh}[(x_{21}(J_i + J_f) + x_{22}(K_{ci} + K_{cf}) \\ &+ x_{23}(K_{ci} + K_{cf})^2 + x_{24}(J_i + J_j)(K_{ci} + K_{cf}) \\ &+ x_{25}(J_i + J_j^2))f_2(v)], \\ x_3 &= x_{30} + x_{31}(J_i + J_f), \\ x_4 &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

а функции

$$\begin{aligned} f_1(v) &= 1 + t_{121}v_1 + t_{122}v_2 + t_{123}v_3, \\ f_2(v) &= 1 + t_{221}v_1 + t_{222}v_2 + t_{223}v_3 \end{aligned} \quad (5)$$

определяют колебательную зависимость $\gamma(sur)$. Индексы i и f относятся к начальному и конечному состояниям в переходе $i \rightarrow f$. Для удобства применения соотношения (2) все параметры из формул (3)–(5) выписаны в табл. 1 (таблица взята из работы [3]).

В работе [3] параметры модели $\gamma(sur)$ найдены из подгонки к формулам (3)–(5) 4110 измеренных ($T = 296 \text{ K}$) коэффициентов уширения линий H_2O давлением воздуха и азота 76 колебательных полос H_2O из спектрального диапазона $380\text{--}22593 \text{ cm}^{-1}$.

Формула (2) для $\delta(sur)$ зависит от пяти варьируемых параметров q_i ($i = 1\text{--}5$). Первоначально модель $\delta(sur)$ тестировалась при подгонке экспериментальных коэффициентов сдвига $\delta(\text{exp})$, найденных в [3–12] для линий из диапазона $380\text{--}22593 \text{ cm}^{-1}$, к выражению (2). Этот тест показал, что модель (2) может быть применима для линий, приблизительно лежащих выше 10000 cm^{-1} . В частности, она не описывает положительные сдвиги линий в полосах с малым увеличением колебательных квантовых чисел. По этой причине далее в этом разделе проводится анализ сдвигов линий для колебательных полос, лежащих выше 10000 cm^{-1} .

Анализ совместимости экспериментальных коэффициентов сдвига проведен путем прямого сравнения коэффициентов $\delta(\text{exp})$, измеренных для одних и тех же линий в различных работах, и определения параметра $R_{[a],[b]} = \delta[a]/\delta[b]$, в котором $\delta[a]$ и $\delta[b]$ — измеренные коэффициенты сдвига в работах [a] и [b] соответственно. Наибольшее число таких линий найдено для полос $3v_1 + v_3$, $2v_1 + 2v_2 + v_3$ и $2v_1 + 2v_3$ в работах [4] и [12]. Для 72 линий из полосы $3v_1 + v_3$ отношение $R_{[12],[4]} = \delta[12]/\delta[4]$ варьирует от 0.67 до 2.19, среднее значение $\langle R_{[12],[4]} \rangle$ для 72 линий составляет 2.18. Аналогично для 21 линии из полосы $2v_1 + 2v_2 + v_3$ $1.1 < R_{[12],[4]} < 1.58$ и среднее значение $\langle R_{[12],[4]} \rangle = 1.31$. Все данные работы [12] превышают данные работы [4] приблизительно на 30% для полосы $2v_1 + 2v_2 + v_3$. Наконец, для пяти линий из полосы $2v_1 + 2v_3$ $0.85 < R_{[12],[4]} < 1.2$ и $\langle R_{[12],[4]} \rangle = 1.31$. Таким образом, данные работ [12] и [4] очень разные. Среднее различие между $\delta[12]$ и $\delta[4]$ для 98 линий составляет 28.8%.

В общей сложности было проанализировано более 4000 значений $\delta(\text{exp})$. Из этого списка были удалены $\delta(\text{exp})$, которые, по нашему мнению, являются ошибочными. К ним относятся положительные значения $\delta(\text{exp})$ из [12] и те значения $\delta(\text{exp})$, которые отличаются от $\delta(\text{exp})$ для линий из соседних колебательных полос более чем на 30%. Для рассматриваемого диапазона для всех линий из [4,6,10,11] значения $\delta(\text{exp})$ отрицательны. Они отрицательны и в расчетах с применением полуклассического метода Андерсона–Тсао–Карната (АТС) [13]. В этих расчетах (см., например, [3]) вычисленные значения коэффициентов δ при изменении колебательных квантовых чисел на единицу изменяются не более чем на 10%. Изменения в 30% в коэффициентах $\delta(\text{exp})$ считаются в настоящей работе ошибочными.

Таким образом был сформирован набор из 3241 значений $\delta(\text{exp})$. Этот набор явным образом разбивается на два набора. Один из них (набор 1) состоит из 642 значений $\delta(\text{exp})$ для линий из диапазона $10150\text{--}14000 \text{ cm}^{-1}$, измеренных в [4,6,10,11], второй набор (набор 2) — из 2599 значений $\delta(\text{exp})$ для линий из диапазона $13000\text{--}22637 \text{ cm}^{-1}$, измеренных в [12]. В спектральном диапазоне от 13000 до 14000 cm^{-1} оба набора содержат значения $\delta(\text{exp})$ для одних и тех же линий, и эти значения систематически отличаются друг от друга приблизительно на 30%. Поэтому параметры q_1, \dots, q_5 для модели $\delta(sur)$ (2) были определены отдельно для каждого набора данных путем их подгонки к формуле (2). Для первого набора параметры приведены во второй колонке табл. 2, для второго набора — в третьей колонке той же таблицы. Параметры модели $\gamma(sur)$ (3)–(5) из формулы (2) фиксировались на значениях из табл. 1. В последних строчках табл. 2 приведены значения ста-

Таблица 2. Параметры модели $\delta(sur)$ (2), найденные из подгонки 642 и 3241 значений коэффициентов сдвига центров линий $\delta(\text{exp})$ молекулы H_2O давлением воздуха ($T = 296 \text{ K}$) для двух наборов экспериментальных данных *

Параметр	Набор 1, 10150–14000 cm^{-1}	Набор 2 10150–22637 cm^{-1}
q_1	0.2374 (90)	0.2811(62)
q_2	$-0.2889 (97) \cdot 10^{-1}$	$-0.9355(638) \cdot 10^{-2}$
q_3	$0.7127 (861) \cdot 10^{-1}$	0.9791 (730)
q_4	0.0	0.4075(329)
q_5	$0.9586(1068) \cdot 10^{-1}$	1.0917 (833)
N	642	3241
rms	$3.2 \cdot 10^{-3}$	$6.8 \cdot 10^{-3}$
$\chi_{av}, \%$	16.9	22.9

* Параметры $q_1, q_3 - q_5$ — безразмерные, параметр q_2 и rms определены в $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$.

Таблица 3. Значения rms (6) и χ_{av} (7), найденные для отдельных наборов экспериментальных данных с параметрами из второй колонки табл. 2

$v_1 v_2 v_3$	N	$rms, 10^{-3} \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$	$\chi_{av}, \%$	Источник
003, 022, 102, 121, 201, 300	423	3.1	17.1	[6]
301, 221, 202, 103	114	3.3	16.3	[10,11]
301, 221, 202	105	3.3	15.2	[4]

статистических величин

$$rms = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\delta_i(\text{calc}) - \delta_i(\text{exp}))^2}{N}}, \quad (6)$$

$$\chi_{av} = 100\% \sum_{i=1}^N |1 - \delta_i(\text{calc})/\delta_i(\text{exp})|/N, \quad (7)$$

характеризующих качество подгонки, N — число используемых данных. Значения rms и χ_{av} для отдельных наборов данных приведены в табл. 3.

Качество расчетов коэффициентов сдвига δ по модели $\delta(sur)$, характеризуемое величинами rms и χ_{av} , сравнимо с качеством расчета этих же коэффициентов по полуклассическому методу АТС, примененному к линиям из диапазона ниже 10000 cm^{-1} [3,9,14].

Сравнение с базой данных HITRAN и вычислениями по методу АТС

Сравнение вычислений коэффициентов сдвига δ по модели $\delta(sur)$ (2) с вычислениями по полуклассическому методу АТС и с базой данных HITRAN [2] проведено для двух колебательных полос $(0, 0, 0) \rightarrow (3, 0, 1)$

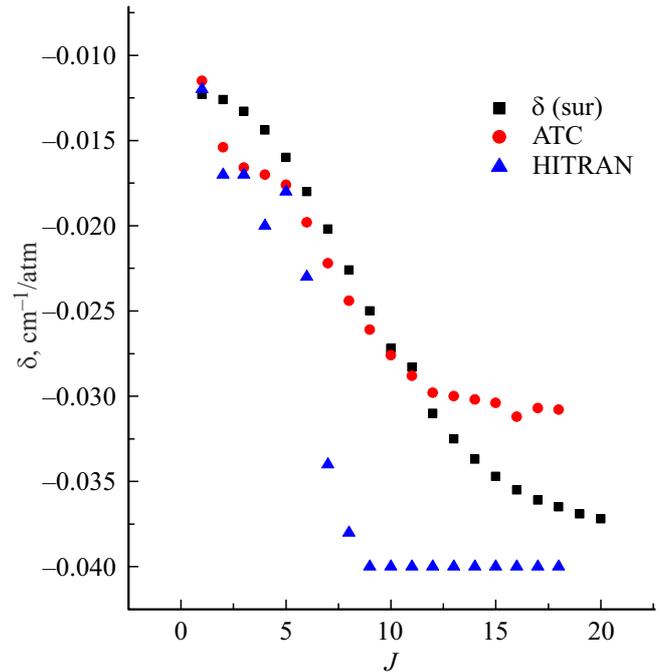


Рис. 1. Сравнение коэффициентов сдвига δ , представленных в базе данных HITRAN, с коэффициентами δ , вычисленными по модели $\delta(sur)$ (2) и по методу АТС для серии переходов $[J + 1 K_a = 0 J + 1] \rightarrow [J K_a = 0 J]$ в полосе $3v_1 + v_3$.

и $(0, 0, 0) \rightarrow (3, 6, 3)$, локализованных в диапазоне $10150 - 14000 \text{ cm}^{-1}$ и выше 25000 cm^{-1} . На рис. 1, 2 представлена зависимость вычисленных коэффициентов δ от вращательных квантовых чисел J и K_a для двух вращательных серий в колебательной полосе $(0, 0, 0) \rightarrow (3, 0, 1)$.

Первая серия переходов на рис. 1 определяет зависимость δ от вращательного квантового числа J при фиксированных квантовых числах K_{ai} и K_{af} . Вторая серия на рис. 2 определяет зависимость δ от вращательного квантового числа $K_a = K_{ai}$ при фиксированных J_i и J_f . Здесь и далее в расчетах по модели $\delta(sur)$ (2) использованы параметры из второй колонки табл. 2. В расчетах по методу АТС значения дипольного момента $\mu(v_1, v_2, v_3)$ для верхнего колебательного состояния $(3, 0, 1)$ были взяты из [15], а для высоковозбужденного колебательного состояния $(3, 6, 3)$ были получены путем интерполяции значений $\mu(v_1, v_2, v_3)$ из работы [15] на это состояние с использованием модели, полиномиальной по v_1, v_2, v_3 . Поляризуемость $\alpha(v_1, v_2, v_3)$ (в \AA^3), также необходимая для расчетов коэффициентов δ , вычислялась по формуле

$$\alpha(v_1, v_2, v_3) = 1.4613 + 0.045v_1 + 0.021v_2 + 0.043v_3, \quad (8)$$

предложенной в [16].

Рисунок 1 показывает удовлетворительное согласие между расчетами по моделям $\delta(sur)$ и АТС для $J \leq 11$, согласие между $\delta(sur)$ и базой данных HITRAN наблюдается только для $J \leq 5$. Для квантовых чисел $J > 8$

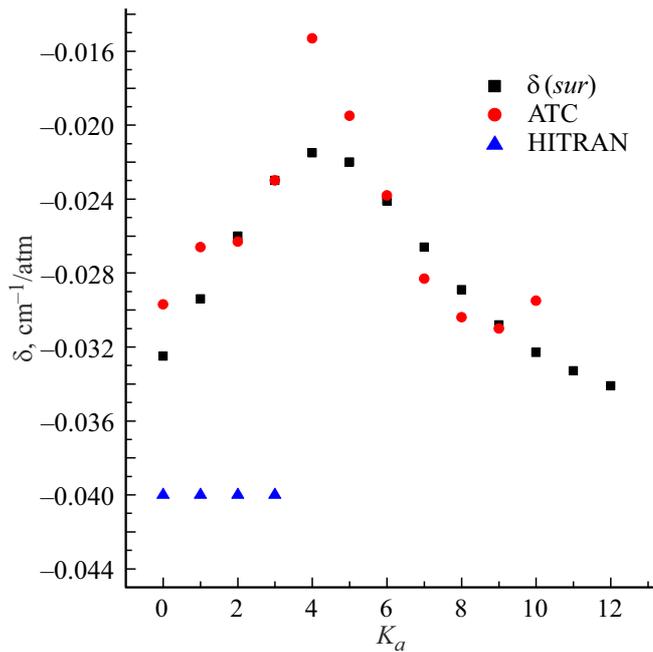


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для переходов $[J = 13 K_a K_c = 13 - K_a] \rightarrow [J = 12 K_a K_c = 12 - K_a]$.

коэффициентам δ в базе данных HITRAN приписано значение $-0.04 \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$. На рис. 2 наблюдается удовлетворительное (за исключением одного перехода) согласие между $\delta(sur)$ и АТС и крайне неудовлетворительное совпадение этих вычислений с данными из базы HITRAN.

Рисунки 3,4 показывают зависимость коэффициентов δ от квантовых чисел J и K_a для двух серий вращательных переходов в колебательной полосе $(0, 0, 0) \rightarrow (3, 6, 3)$, локализованной выше 25000 cm^{-1} .

Снова наблюдается резкое отличие вычислений по модели $\delta(sur)$ (2) и по методу АТС от значений δ из базы данных HITRAN. Приведенные в этой базе сдвиги рассмотренных линий не зависят от вращательного квантового числа K_a . В асимптотике, при $J, K_a \rightarrow \infty$, вычисленные по модели $\gamma(sur)$ (3)–(5) значения коэффициентов уширения γ обращаются в ноль, так что модель $\delta(sur)$ (2) для больших квантовых чисел J и K_a приводит к постоянным для каждой полосы сдвигам центров линий, равным $q_2(1 + q_3v_1 + q_4v_2 + q_5v_3)$.

Заключение

Проанализированы экспериментальные данные для коэффициентов сдвига $\delta(\text{exp})$ центров линий молекулы H_2^{16}O давлением воздуха в диапазоне $10150\text{--}22637 \text{ cm}^{-1}$. Для рассмотренных колебательных полос максимальные значения колебательных квантовых чисел $v_1 = 7, v_2 = 9$ и $v_3 = 4$, а максимальные значения вращательных квантовых чисел в переходах $J = 15$ и $K_a = 8$ для нижнего колебательного состояния. Было

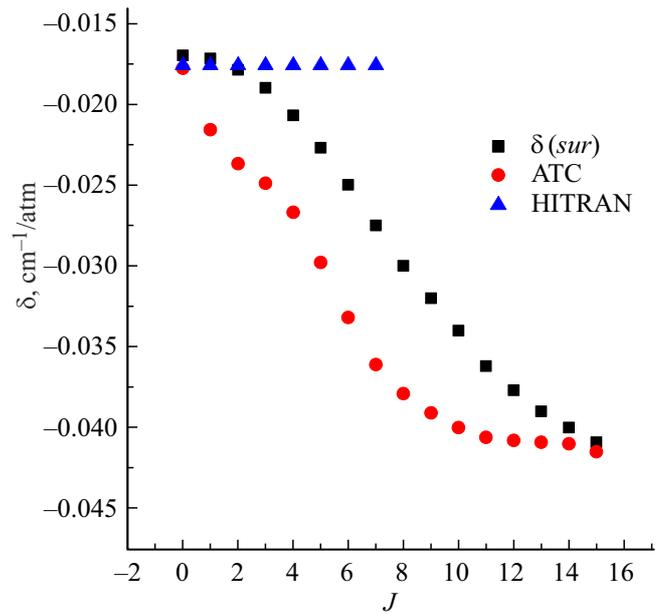


Рис. 3. Сравнение коэффициентов сдвига δ , представленных в базе данных HITRAN, с коэффициентами δ , вычисленными по модели $\delta(sur)$ (2) и по методу АТС для серии переходов $[J K_a = 0 J] \rightarrow [J + 1 K_a = 0 J + 1]$ в полосе $(0, 0, 0) \rightarrow (3, 6, 3)$.

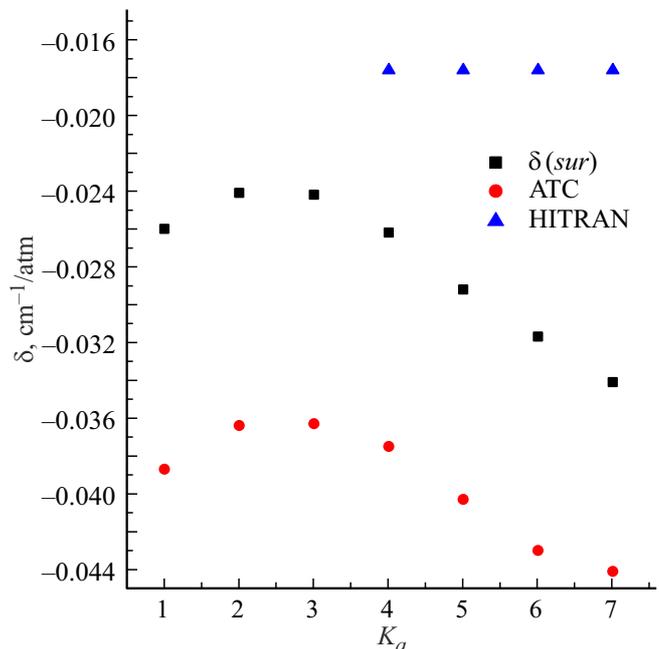


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но для переходов $[J = 8 K_a K_c = J - K_a + 1] \rightarrow [J = 9 K_a + 2 K_c = 9 - K_a - 1]$.

выявлено, что экспериментальные данные $\delta(\text{exp})$ из разных работ могут сильно отличаться. Сформированы два оптимальных набора из 642 и 3241 коэффициентов $\delta(\text{exp})$. Первый набор получен для линий из диапазона $10150\text{--}14000 \text{ cm}^{-1}$, второй — для диапазона

10150–22637 cm^{-1} . В диапазоне 10150–14000 cm^{-1} оба набора содержат экспериментальные значения $\delta(\text{exp})$, которые относятся к одним и тем же линиям, но систематически отличаются друг от друга приблизительно на 30%. Поэтому эти наборы не могут быть использованы одновременно для определения параметров какой-либо аналитической модели для коэффициентов сдвига или для определения из этих коэффициентов колебательной зависимости поляризуемости или дипольного момента молекулы H_2O .

Основной результат работы содержится в табл. 2, в которой приведены параметры модели $\delta(\text{sur})$ (2) для двух оптимальных наборов экспериментальных данных. С помощью этих параметров (и параметров из табл. 1 для модели $\delta(\text{sur})$ (3)–(5)) могут быть рассчитаны одновременно коэффициенты уширения (γ) и сдвига (δ) любой линии поглощения водяного пара из рассмотренного диапазона. Например, для линии [642] \rightarrow [533] в полосе $2\nu_1 + 2\nu_3$ с частотой $\nu = 14400.071 \text{ cm}^{-1}$ (соответствует длине волны $\lambda = 634.38 \text{ nm}$, на которой в [1] проводились измерения профиля влажности в атмосфере), вычисленное значение $\gamma = 0.0828 \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$, а $\delta = -0.0188 \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$, экспериментальное [1] значение сдвига центра этой линии равно $-0.017 \pm 0.006 \text{ cm}^{-1}$ при давлении 755 Torr.

Средняя точность вычисления коэффициентов уширения γ по модели $\gamma(\text{sur})$ (3)–(5), которая определяется величиной χ_{av} (7) (в этой формуле символ δ заменен на символ γ), составляет 7.2%. Значения χ_{av} для наборов данных 1 и 2 для коэффициентов $\delta(\text{exp})$ составляет 16.9 и 22.9%. Соответствующие значения rms (6) равны $3.2 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$ и $6.8 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$. Поэтому в расчетах коэффициентов сдвига предпочтительнее использовать второй столбец параметров из табл. 1. В особенности это касается диапазона 10150–14000 cm^{-1} .

Значения $rms = 3.2 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$ сравнимо со значениями rms , которые найдены в расчетах с применением метода АТС в [3,9,14] для линий, лежащих ниже 10000 cm^{-1} .

Сравнение $\delta(\text{sur})$ для отдельных вращательных серий, лежащих выше 25000 cm^{-1} , с базой данных HITRAN показывает, что в ряде случаев есть существенное различие в значении коэффициентов δ (так же, как и в значениях γ). Для многих переходов величинам δ и γ из базы данных HITRAN приписаны значения, не зависящие от вращательного квантового числа K_a , что является некорректным.

Благодарности

Автор благодарит С.Н. Михайленко и Б.А. Тихомирова за помощь в работе.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] V.V. Zuev, Yu.N. Ponomarev, A.M. Solodov, B.A. Tichomirov, O.A. Romanovsky. Opt. Lett., **10**, 318 (1985).
- [2] The HITRAN2020 Molecular Spectroscopic Database [Электронный ресурс]. <https://hitran.org>
- [3] T.M. Petrova, A.M. Solodov, A.A. Solodov, V.M. Deichuli, V.I. Starikov. Mol. Phys., **120**, e1988169 (2022). DOI: 10.1080/00268976.2021.1988169
- [4] B.E. Grossmann, E.V. Browell. J. Mol. Spectrosc., **138**, 562 (1989).
- [5] В.И. Стариков. Оптика атмосф. и океана, **37**, 627 (2024). DOI: 10.15372/AOO20240801
- [6] L.R. Brown, R.A. Toth, M. Dulick. J. Mol. Spectrosc. **212**, 57 (2001). DOI: 10.1006/jmsp.2002.8515
- [7] Q. Zou, P. Varanasi. JQSRT, **82**, 45 (2003). DOI: 10.1016/S0022-4073(03)00147-X
- [8] R.A. Toth. JQSRT, **94**, 1 (2005). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2004.08.041
- [9] T.M. Petrova, A.M. Solodov, A.A. Solodov, V.M. Deichuli, V.I. Starikov. Mol. Phys., **119**, e1906967 (2021). DOI: 10.1080/00268976.2021.1906967
- [10] А. Д. Быков, Е.А. Коротченко, Ю.С. Макушкин, Ю.Н. Пonomarev, Л.Н. Синица, А.М. Солодов, В.Н. Стройнова, Б.А. Тихомиров. Оптика атмосф. и океана, **1**, 40 (1988).
- [11] E.V. Browell, B.E. Grossman, A.D. Bykov, V.A. Kapitanov, V.V. Lazarev, Yu.N. Ponomarev, L.N. Sinita, E.A. Korotchenko, V.N. Stroinova, B.A. Tichomirov. Atmos. Ocean. Opt., **3**, 617 (1990).
- [12] S. Fally, P.-F. Coheur, M. Carleer, C. Clerbaux, R. Colin, A. Jenouvrier, M.F. Meerienne, C. Hermans, A.C. Vandaele. JQSRT, **82**, 119 (2003). DOI: P10.1016/S0022-4073(03)00149-3
- [13] C.J. Tsao, B. Curnutte. JQSRT, **2**, 41 (1962). DOI: 10.1016/0022-4073(62)90013-4
- [14] R.R. Gamache, J.-M. Hartmann. JQSRT, **83**, 119 (2004). DOI: 10.1016/S0022-4073(02)00296-0
- [15] M. Mengel, P. Jensen. J. Mol. Spectrosc., **169**, 73 (1995). DOI: 10.1006/jmsp.1995.1007
- [16] V.I. Starikov, T.M. Petrova, A.M. Solodov, A.A. Solodov, V.M. Deichuli. Spectrochim. Acta A, **210**, 275 (2019). DOI: 10.1016/j.saa.2018.11.032