

Методика моделирования параметров контура спектроскопических линий на примере молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$

Б.А. Воронин^{1, 2*}

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

²Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
634055, г. Томск, пр. Ленина, 40

Поступила в редакцию 29.06.2020 г.

Проведен анализ экспериментальных данных для коэффициентов поглощения линий основной изотопической модификации молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Предложена методика оценки этого параметра для спектроскопических баз данных, основанная на известных методах математической статистики. Проведен анализ литературных источников, выявлены малодостоверные данные, проведен регрессионный анализ, предложена и проанализирована модель для оценок параметра самоуширения. Сделаны оценки применимости предложенных моделей.

Ключевые слова: SO₂, коэффициент самоуширения, анализ данных; SO₂, self-broadening, data analysis.

Для различных приложений в оптике атмосферы Земли, планет Солнечной системы и экзопланет необходимо использовать достаточно подробные банки спектроскопических данных, содержащих центры и интенсивности спектральных линий, коэффициенты их уширения в различных условиях.

Такие банки создаются в настоящее время и насчитывают миллиарды линий поглощения, излучения или рассеяния. Центры и интенсивности спектральных линий рассчитываются *ab initio* методами на суперкомпьютерах. В то же время с такими параметрами контура линии, как коэффициенты самоуширения, уширения воздухом или другими газами, показатели температурной зависимости, ситуация иная: большая часть необходимых данных отсутствует. Цель настоящей статьи – показать один из возможных методов оценки параметров контура линии, используя элементы регрессионного анализа, на примере молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$.

Диоксид серы, или сернистый газ $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, в обычных условиях представляет собой бесцветный газ с резким характерным запахом, растворимый в воде с образованием нестойкой сернистой кислоты; он сжигается при комнатной температуре под давлением. SO₂ является одним из основных вулканических газов и, следовательно, может служить признаком вулканической активности. Детектирование и определение концентрации SO₂ – важная задача атмосферных и планетарных исследований.

SO₂ входит в состав атмосферы Земли и Венеры, других планет и экзопланет. Его спектры помещены в базы данных (БД) HITRAN [1] и GEISA [2].

В базе данных HITRAN имеется более 100000 переходов SO₂. Расчетный лист SO₂, созданный в группе проф. Дж. Теннисона (UCL, London) [3], содержит более 1,3 миллиарда переходов.

В настоящее время на орбиты Земли, Венеры (Venus-Express) и Марса (Mars-Express, Eхо-Mars и др.) запущено множество космических аппаратов, имеющих на борту Фурье-спектрометры (или их аналоги) высокого разрешения. Чтобы обрабатывать полученные спектры, кроме частот и интенсивностей спектральных линий необходимо знать такие параметры контура линий, как коэффициенты самоуширения, уширение другими газами, коэффициент температурной зависимости. Проводить измерения и точные расчеты для сотен тысяч линий невозможно. Поэтому необходимо разработать достаточно простые способы оценок коэффициентов уширения для заполнения пробелов в базах данных.

Обычно при аппроксимации коэффициентов уширения линии учитывают только их зависимость от квантового числа полного углового момента J . Если точнее, каждой линии в спектре соответствует определенный уникальный набор колебательных и вращательных квантовых чисел, которые характеризуют верхний и нижний уровни энергии. Для трехатомной молекулы SO₂ – типичного асимметричного волчка – имеется 12 квантовых чисел: три вращательных и три колебательных квантовых числа для нижнего и верхнего состояний, т.е. $v_1'', v_2'', v_3'', J'', K_a'', K_c''$ и $v_1', v_2', v_3', J', K_a', K_c'$.

Функцию, описывающую зависимость коэффициентов уширения от квантовых состояний, можно представить в виде бесконечного ряда по степеням квантовых чисел. При этом возникают вопросы о сходимости ряда, способах вычисления коэффициентов

* Борис Александрович Воронин (vba@iao.ru).

и т.п. Мы ограничимся случаем, когда в этом разложении учитываются только первые члены ряда.

Регрессионный анализ — это набор статистических методов исследования влияния одной или нескольких независимых переменных на зависимую переменную. Допустим, что независимые переменные представляют собой квантовые колебательные и вращательные числа, а зависимая переменная — коэффициент самоуширения линии. Часть квантовых чисел в определенной степени взаимозависимы и, как будет показано далее, хорошо коррелируют, поэтому в нашем анализе предусмотрено исследование автокорреляций.

Коэффициент самоуширения линии SO_2 — некоторое положительное вещественное число, которое характеризует полуширину линии на полувысоте и зависит от температуры, заселенности, квантовых чисел нижнего уровня энергии и т.п. Наша задача — найти определенные закономерности в имеющихся экспериментальных данных и, используя их, построить зависимости коэффициента самоуширения линии от квантовых чисел.

Настоящая работа выполнялась в несколько этапов.

Сбор экспериментальных данных

В литературе представлен достаточно обширный набор экспериментальных данных по коэффициентам самоуширения линий SO_2 . В табл. 1 приведены характеристики измеренных значений из [4–10] для основной изотопической модификации $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Имеются также данные для изотопологов SO_2 , например $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{17}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и др. В [6] представлено некоторое количество значений коэффициента самоуширения для линий тяжелого изотополога $^{34}\text{S}^{16}\text{O}$. Все эти данные использовались в нашем анализе, поскольку замещение тяжелых атомов слабо влияет на энергетические уровни и волновые функции молекулы, а также на коэффициенты уширения. Необходимо иметь в виду, что стабильный изотополог $^{34}\text{S}^{16}\text{O}$ имеет ту же симметрию, что и основная модификация.

Всего было собрано и использовано для анализа 324 экспериментальных значения для полос поглощения: ν_1 , ν_3 , $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_1 + \nu_2 - \nu_2$ и основной (вращательной) полосы. В последней строке табл. 1 приведены экстремальные значения J , K_a , $\gamma_{\text{self min}}$, $\gamma_{\text{self max}}$ для 324 переходов.

Предварительный анализ собранных данных

В результате анализа данных линий были выявлены переходы, не отвечающие правилам отбора для квантовых чисел: для суммы проекций $K_a + K_c$ полного углового момента J должно выполняться условие $K_a + K_c - J = 0$ или $K_a + K_c - J = 1$. В ряде работ (например, [7]) для полос ν_1 и ν_3 переходов (100)–(000) [38 8 28] [36 9 27] и (001)–(000) [49 18 31] [50 18 31] верхнего уровня указанное правило отбора нарушается.

Оценка и анализ теоретических расчетов

В настоящий момент в БД HITRAN используется линейная интерполяция для коэффициентов самоуширения линий SO_2 , предложенная ранее в [1, 11]:

$$\begin{aligned} \gamma(\text{SO}_2\text{--SO}_2) &= 0,4 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1} \text{ для } K_a'' \leq 5, \\ \gamma(\text{SO}_2\text{--SO}_2) &= 0,156 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1} \text{ для } K_a'' \geq 21, \\ \gamma(\text{SO}_2\text{--SO}_2) &= 0,471 - 0,0143 \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1} \\ &\text{для } K_a'' 6 \leq K_a'' \leq 20 \text{ см}^{-1}, \end{aligned} \quad (1)$$

т.е. кусочно-линейная зависимость от K_a'' .

Далее везде, где будет упомянут $\gamma(\text{SO}_2\text{--SO}_2)$ или $\gamma(\text{SO}_2)$, предполагается размерность $[\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}]$.

Необходимо отметить, что в большинстве случаев имеется более сильная зависимость от квантового числа полного углового момента J , чем от его проекции K_a'' . Таким образом, в нашем анализе использовать БД HITRAN как источник данных по параметрам контура невозможно, так как там уже была проведена параметризация.

Таблица 1

Обзор литературных данных для самоуширения линий поглощения SO_2

| Источник | Год | Полоса | J'_{max} | $K'_{a \text{max}}$ | $\gamma(\text{SO}_2)_{\text{min}}$ | $\gamma(\text{SO}_2)_{\text{max}}$ | Число переходов |
|----------|------|-------------------------|-------------------|---------------------|------------------------------------|------------------------------------|-----------------|
| [4] | 1996 | ν_1 | 43 | 22 | 0,41 | 0,119 | 31 |
| [5] | 1996 | ν_3 | 60 | 18 | 0,151 | 0,498 | 27 |
| [6] | 1997 | $\nu_1 + \nu_2$ | 47 | 16 | 0,024 | 0,504 | 118 |
| [6] | 1997 | ν_3 | 18 | 9 | 0,315 | 0,42 | 9 |
| [7] | 2001 | ν_3 | 60 | 18 | 0,18 | 0,38 | 12 |
| [7] | 2001 | ν_1 | 43 | 22 | 0,14 | 0,448 | 37 |
| [8] | 2003 | ν_1 | 34 | 15 | 0,246 | 0,353 | 9 |
| [9] | 2007 | ν_1 | 42 | 15 | 0,19 | 0,37 | 11 |
| [9] | 2007 | $\nu_1 + \nu_2 - \nu_2$ | 29 | 14 | 0,2 | 0,4 | 7 |
| [9] | 2007 | $\nu_1, J' = 18$ | 42 | 18 | 0,16 | 0,25 | 19 |
| [10] | 2013 | Вращательная полоса | 50 | 12 | 0,32 | 0,445 | 10 |
| [10] | 2013 | ν_1 | 53 | 14 | 0,17 | 0,56 | 28 |
| [10] | 2013 | $\nu_1 + \nu_2 - \nu_2$ | 28 | 10 | 0,31 | 0,45 | 6 |

Ранее, в [12], предлагалась модель

$$\gamma(\text{SO}_2) = k_1 \cdot \text{arctctg}(k_2 \cdot k_a'' + k_3) + k_4, \quad (2)$$

где $k_1 = 0,084746$; $k_2 = 0,269$; $k_3 = -3,5$; $k_4 = 0,29$. Формула (2) дает лучшую оценку параметров самоуширения линий по сравнению с (1), поскольку с ростом K_a'' $\gamma(\text{SO}_2)$ уменьшается асимптотически до $\gamma(\text{SO}_2) = k_4$, что физически более обосновано.

Однако формулы (1) и (2) используют для оценки всего один параметр, т.е. всего одно квантовое число из 12 имеющихся.

Вычисление корреляций между коэффициентом самоуширения линии и квантовыми числами

Методом регрессионного анализа (вычисление корреляции) были определены квантовые числа, сильно влияющие на уширение молекулы SO_2 . Коэффициенты корреляции рассчитывались по известной формуле

$$R(\gamma(\text{SO}_2), K) = \frac{\text{cov}(\gamma(\text{SO}_2), K)}{\sigma(\gamma(\text{SO}_2))\sigma K}, \quad (3)$$

где $\text{cov}(\gamma(\text{SO}_2), K)$ – коэффициент ковариации, $\gamma(\text{SO}_2)$ – коэффициент уширения линии, K – одно из 12 колебательно-вращательных квантовых чисел (или тип симметрии S); $\sigma(\gamma(\text{SO}_2))$ и σK – среднеквадратические отклонения $\gamma(\text{SO}_2)$ и K соответственно.

Ниже приведен список всех вычисленных коэффициентов корреляции (по модулю величины):

- 1) $R(v_1', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,075659$;
- 2) $R(v_2', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,0196097$;
- 3) $R(v_3', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,4135013$;
- 4) $R(v_2'', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,019609$;
- 5) $R(J', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,29607588$;
- 6) $R(K_a', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,8226108$;
- 7) $R(K_c', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,04234134$;
- 8) $R(J'', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,29027125$;
- 9) $R(K_a'', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,8227948$;
- 10) $R(K_c'', \gamma(\text{SO}_2)) = 0,0596548$;
- 11) $R(S, \gamma(\text{SO}_2)) = 0,124833$.

Так как колебательные квантовые числа v_1'' и v_3'' были равны нулю для всех анализируемых переходов, то вычислять корреляцию с ними смысла не было. Для всех уровней был определен тип симметрии S и вычислена его корреляция с коэффициентом самоуширения. Опираясь на полученные значения, мы можем сделать вывод, что параметры v_1' , v_2' , v_2'' и S являются незначимыми и, следовательно, могут не использоваться при построении модели.

Вычисление автокорреляций

Благодаря тому же методу регрессионного анализа были вычислены автокорреляционные коэффициенты, определяющие взаимную зависимость, что позволяет в описании зависимостей ограничиться только значимыми факторами.

Коэффициент корреляции $R(J, J'') = 0,999069$ близок к единице, следовательно, брать вместе J' и J'' для построения модели нельзя, поэтому в дальнейшем использовался только один параметр, который хорошо коррелирует с $\gamma(\text{SO}_2)$, т.е. J' .

Корреляция между верхним и нижним квантовыми числами K_a и K_c тоже сильная:

$$R(K_a', K_a'') = 0,9953;$$

$$R(K_c', K_c'') = 0,9964.$$

Использовать их вместе для построения модели нельзя, поэтому мы оставляем только $K_a''(0,82275)$ и $K_c''(0,059655)$.

В итоге мы получили набор независимых параметров, которые можно использовать для построения моделей.

Построение моделей

Для расчета коэффициентов модели мы применяли стандартную функцию ЛИНЕЙН, которая рассчитывает статистику методом наименьших квадратов. Напомним, что параметры, которые мы будем использовать в первой модели, – это v_3' , J' , K_a'' и K_c'' .

Была получена формула, которую можно применять для интерполяции экспериментальных данных:

$$\gamma(\text{SO}_2) = 0,43244 + 0,002074v_3' - 0,00772J' - 0,00373K_a'' + 0,007421K_c''. \quad (4)$$

Здесь v_3' , J' – квантовые числа верхнего уровня; K_a'' , K_c'' – квантовые числа нижнего уровня.

Так как основная цель – нахождение наиболее оптимальной модели, методом того же регрессионного анализа были вычислены автокорреляции оставшихся параметров.

Поскольку коэффициент корреляции J'' и K_c' большой (0,9074869), а K_c'' и $\gamma(\text{SO}_2)$ – небольшой, то брать их для построения модели вместе нежелательно. Поэтому при построении второй модели взяты в рассмотрение квантовые числа K_a'' , J'' и v_3' :

$$\gamma(\text{SO}_2) = 0,4371 + 0,00309v_3' - 0,0002J'' - 0,0111K_a''. \quad (5)$$

Следует обратить внимание на то, что при построении первой и второй моделей мы использовали квантовые числа верхних и нижних уровней. Особый интерес представляет построение третьей модели, так как в ней будут использованы только квантовые числа нижних уровней, потому что традиционно определение и идентификация нижних уровней энергии вызывают меньше проблем.

В этом случае коэффициент корреляция J'' и K_a'' равен 0,315682595. Отметим, что эти два параметра

можно использовать совместно. Исходя из всего вышесказанного, третья модель, описывающая зависимость коэффициентов самоуширения от двух параметров, выглядит следующим образом:

$$\gamma(\text{SO}_2) = 0,43944 - 0,0002J'' - 0,011K''_a. \quad (6)$$

Определение границ допустимости полученной модели

В табл. 2 приведены максимальные и минимальные значения квантовых чисел, для которых имеют экспериментальные значения параметров самоуширения линий $\gamma(\text{SO}_2)$, собранные в настоящей работе. Колебательные квантовые числа v''_2 , v''_1 и v''_2 изменяются в диапазоне от 0 до 1, а v''_1 , v''_3 равны нулю для всех имеющихся экспериментальных данных.

Таблица 2

Максимальные и минимальные значения квантовых чисел, используемые в моделях для оценки самоуширения линий поглощения SO_2

| Значение | v''_3 | J' | K''_a | K''_c | J'' | K''_a | K''_c |
|--------------|---------|------|---------|---------|-------|---------|---------|
| Минимальное | 0 | 1 | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 |
| Максимальное | 1 | 60 | 22 | 59 | 61 | 23 | 60 |

Для проверки результатов, получаемых в разных моделях, использовались естественные ограничения значений параметров самоуширения. Во-первых, полуширина линии не может принимать отрицательные значения, во-вторых, она не может значительно превосходить максимальное значение, полученное экспериментально.

Для первой модели (4) ограничения получились следующие: $v''_3 \leq 20$; $J' \leq 120$; $K''_a \leq 100$. Для второй модели (5) изменения параметра v''_3 более устойчивы, чем в первой, но использование $v''_3 > 20$, по-видимому, неразумно. Изменение параметра J' до значений более 300 не показало критических изменений $\gamma(\text{SO}_2)$. Тем не менее использовать большие J' нужно с осторожностью. Для второй модели (5) $v''_3 \leq 20$, $J' \leq 120$, $K''_a \leq 38$. Для третьей модели (6) $J'' \leq 120$, $K''_a \leq 39$.

Сравнение моделей

В табл. 3 представлены результаты сравнения трех рассмотренных моделей с экспериментальными данными. Для каждой модели приведены максимальные и минимальные значения коэффициентов самоуширения линий SO_2 и значение дисперсии. Кроме того были рассчитаны максимальное и минимальное отклонения от экспериментальных данных и их дисперсии. Видно, что первая модель (4) значительно уступает второй (5) и третьей (6) по точности, а по дисперсии отклонения — больше чем на порядок. Также модель (5) чуть лучше по дисперсии, но в ней используются три параметра.

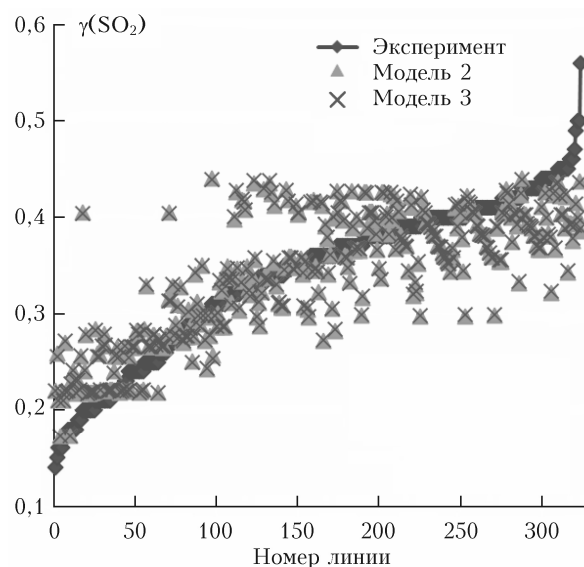
При проверке всех трех моделей на предсказательную способность лучшие результаты продемонстрировала модель, представленная соотношением (6).

Таблица 3

Сравнение экспериментальных измерений $\gamma(\text{SO}_2)$ и модельных расчетов по формулам (4), (5) и (6) (максимальное и минимальное значения для каждого расчета, их сравнение с экспериментом и дисперсия)

| Параметр сравнения | Модель | | | | | |
|-----------------------|-----------------------|----------------|-----------------------|----------------|-----------------------|----------------|
| | (4) | | (5) | | (6) | |
| | $\gamma(\text{SO}_2)$ | эксп. – расчет | $\gamma(\text{SO}_2)$ | эксп. – расчет | $\gamma(\text{SO}_2)$ | эксп. – расчет |
| Минимальное значение | 0,457 | -1,119 | 0,1729 | -0,2035 | 0,1729 | -0,2043 |
| Максимальное значение | 1,35 | -0,028 | 0,4398 | 0,1744 | 0,4390 | 0,1717 |
| Дисперсия | 0,04 | 0,053 | 0,004 | 0,00206 | 0,004 | 0,00207 |

Данные, рассчитанные по моделям (5) и (6), приведены на рисунке.



Сравнение отсортированных экспериментальных данных (кривая с ромбами) с моделями (5) (треугольники) и (6) (крестики)

Результаты расчетов по моделям (5) и (6) весьма удовлетворительны, но, так как модель (5) использует три параметра (больше входных данных), она менее предпочтительна. В модель (6) входят только значения нижних вращательных квантовых чисел, которые легче определять, поэтому она более предпочтительна для генерации банков данных.

Естественно, что учет других членов ряда (J^2 , $J + K_a$ и др.), скорее всего, способствовал бы лучшей аппроксимации, но в этом случае сразу возникают вопросы о качестве экстраполяции и сходимости ряда.

Файл supplementary_materials-SO2-self.xls с данными и расчетами можно посмотреть по ссылке <ftp://ftp.iao.ru/pub/VTT/SO2-self/>.

Автор выражает благодарность сотрудникам ИОА СО РАН проф. А.Д. Быкову и д.ф.м.н. Н.Н. Лаврентьевой, доценту кафедры АСУ ТУСУР

Е.Б. Грибановой и магистрантке АСУ ТУСУР
Е.А. Шевченко за помощь в работе и полезные об-
суждения. Работа выполнена в рамках госзадания
ИОА СО РАН при частичной поддержке РФФИ
(грант № 18-02-00462).

1. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., Bizzocchi L., Boudon V., Brown L.R., Campargue A., Chance K., Coudert L., Devi V.M., Drouin B.J., Fayt A., Flaud J.-M., Gamache R.R., Harrison J., Hartmann J.-M., Hill C., Hodges J.T., Jacquemart D., Jolly A., Lamouroux J., LeRoy R.J., Li G., Longo D., Mackie C.J., Massie S.T., Mikhailenko S., Muller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Orphal J., Perevalov V., Perrin A., Polovtseva E.R., Richard C., Smith M.A.H., Starikova E., Sung K., Tashkun S., Tennyson J., Toon G.C., Tyuterev V.I.G., Vander Auwera J., Wagner G. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2013. V. 130. P. 4–69.
2. 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., Chris Benner 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.I., 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. 2015 edition of the GEISA spectroscopic database // *J. Mol. Spectrosc.* 2016. V. 327. P. 31–72.
3. Underwood D.S., Tennyson J., Yurchenko S.N., Huang X., Schwenke D.W., Lee T.J., Clausen S., Fateev A. ExoMol molecular line lists – XIV: The rotation-vibration spectrum of hot SO₂ // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2016. V. 459. P. 3890–3899.
4. Sumpf B., Meusel I., Kronfeldt H.-D. // *J. Mol. Spectrosc.* 1996. V. 179. P. 137–141.
5. Sumpf B., Fleischmann O., Kronfeldt H.-D. Self-, air-, and nitrogen-broadening in the ν_1 band of SO₂ // *J. Mol. Spectrosc.* 1996. V. 176. P. 127–132.
6. Sumpf B. Experimental investigation of the self-broadening coefficients in the $\nu_1 + \nu_3$ band of SO₂ and the $2\nu_2$ band of H₂S // *J. Mol. Spectrosc.* 1997. V. 181. P. 160–167.
7. Sumpf B. Line intensity and self-broadening investigations in the ν_1 and ν_3 bands of SO₂ // *J. Mol. Spectrosc.* 2001. V. 599. P. 39–49.
8. Joly L., Zeninari V., Parvite B., Weidmann D., Courtoisy D., Bonetti Y., Aellen T., Beckj M., Faist J., Hofstetter D. Spectroscopic study of the ν_1 band of SO₂ using a continuous-wave DFB QCL at 9.1 μm // *Appl. Phys.* 2003. V. 77. P. 703–706.
9. Zeninari V., Joly L., Brouiez B., Pruvite B., Barbe A. Study of SO₂ line parameters with a quantum cascade laser spectrometer around 1090 cm⁻¹. Comparison with calculations of the ν_1 and $\nu_1 + \nu_2 - \nu_2$ bands of ³²SO₂ and ν_1 band of ³⁴SO₂ // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2007. V. 105. P. 312–325.
10. Tasinat N., Pietropolli A., Stoppa P., Buffa G., Puzzarini C. A complete listing of sulfur dioxide self-broadening coefficient for atmospheric applications by coupling infrared and microwave spectroscopy to semi-classical calculations // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2013. V. 130. P. 233–248.
11. Voronin B.A., Kasatkin S.S. Estimation of self-broadening for SO₂ lines // *Proc. SPIE*. V. 9680. P. 968007-1–5. DOI: 10.1117/12.2205503.
12. Voronin B.A., Voronina S.S., Lavrentieva N.N., Dudaryonok A.S., Shevchenko Ye.A. Estimation of carbon dioxide broadening and self-broadening coefficients of SO₂ lines // *Proc. SPIE*. 2018. V. 10833. P. 108330G1–108330G5. DOI: 10.1117/12.2504465.

B.A. Voronin. Method of estimation of self-broadening parameters of spectroscopic lines on the example of the ³²S¹⁶O₂ molecule.

The paper analyzes the published data on such parameter as self-broadening of lines of the main isotopic modification of the ³²S¹⁶O₂ molecule. A method for evaluating this parameter for spectroscopic databases is proposed. The analysis of literature sources was carried out, low-confidence data was revealed, regression analysis was performed, a model for calculating the self-broadening parameter was proposed, and the obtained models were analyzed. Some estimates of its applicability are made for the models obtained.