

Радиационные свойства CO₂: спектростроические банки данных для атмосферных и высокотемпературных приложений

С.А. Ташкун, В.И. Перевалов*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 15.09.2011 г.

Представлен банк параметров спектральных линий молекулы углекислого газа CDS (Carbon Dioxide Spectroscopic Databank), разработанный в Институте оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН. Этот банк базируется на теоретических моделях эффективных гамильтонианов и операторов эффективного дипольного момента, глобально описывающих спектры высокого разрешения молекулы CO₂, обусловленные переходами внутри основного электронного состояния. Параметры этих моделей подогнаны нелинейным методом наименьших квадратов к центрам и интенсивностям спектральных линий, собранным по публикациям. Обсуждаются три версии банка данных. Первая версия (CDS-296) нацелена на атмосферные приложения. Вторая (CDS-1000) разработана для приложений в диапазоне температур 296–2500 К. И наконец, третья версия (CDS-4000) может быть использована в области температур 2500–5000 К. Представлена информация об использовании этого банка данных для атмосферных и высокотемпературных приложений.

Ключевые слова: CO₂, CDS, HITRAN, HITEMP, GEISA, базы данных, высокие температуры; CO₂, CDS, HITRAN, HITEMP, GEISA, databanks, high temperatures.

Введение

Знание радиационных свойств молекулы CO₂ в инфракрасной и видимой областях спектра необходимо для широкого класса атмосферных и астрофизических задач, а также для мониторинга технологических процессов. Эти свойства определяются характеристиками (положениями, интенсивностями, параметрами столкновительного уширения и сдвига) десятков и сотен тысяч спектральных линий, которые занесены в спектростроические банки данных (БД) высокого разрешения, такие как HITRAN-2008 [1] и GEISA-2009 [2], ориентированных на атмосферные приложения, а также БД для высокотемпературных приложений, такие как HITEMP-2010 [3]. Кроме того, существует ряд БД низкого разрешения для высокотемпературных приложений, основанных на приближенных моделях и позволяющих существенно сократить время счета таких спектров. В качестве примеров можно указать RADCAL [4], HITELOR [5], EM2C [6].

В настоящей статье представлены три версии спектростроического БД высокого разрешения CDS, для атмосферных (CDS-296 [7]) и высокотемпературных (CDS-1000 [8] и CDS-4000 [9]) приложений, охватывающих диапазон температур 296–5000 К. Для высокотемпературных версий CDS коэффици-

енты уширения линий взяты из работы [10]. Версия CDS-296 использует для этих коэффициентов величины, взятые из БД HITRAN. Данные из банка CDS-296 включены в состав БД HITRAN-2008 и GEISA-2009. CDS-1000 полностью включен в состав БД HITEMP-2010. Все версии CDS находятся в свободном доступе на сайте ИОА СО РАН по адресу ftp.iao.ru/pub.

Теоретические модели, метод расчета и входные данные

CDS представляет собой расчетный банк высокого разрешения, основанный на теоретических моделях, глобально описывающих положения и интенсивности колебательно-вращательных линий CO₂ в основном электронном состоянии. Исследования по глобальному моделированию спектров CO₂, а также других линейных молекул ведутся в ИОА уже в течение более 20 лет [11, 12]. За это время пройден путь от разработки теоретических моделей до создания спектростроических БД, ориентированных на широкий круг научных и технологических приложений. Теоретические модели основаны на методе эффективных операторов и являются феноменологическими параметрическими моделями. Их параметры определяются подгонкой к экспериментальным значениям центров и интенсивностей спектральных линий на основе нелинейного метода наименьших квадратов. Метод расчета и его программная реализация представлены в работах [13, 14].

* Сергей Анатольевич Ташкун (tashkun@rambler.ru);
Валерий Иннокентьевич Перевалов (vip@lts.iao.ru).

Точность и полнота расчетных БД определяются качеством теоретических моделей, которые, в свою очередь, зависят от объема экспериментальной информации, используемой для определения параметров этих моделей. Мы стремились собрать и использовать все опубликованные экспериментальные данные по положениям и интенсивностям. Текущий файл экспериментальных линий семи наиболее распространенных изотопов $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ насчитывает более 100 000 положений и более 28 000 интенсивностей, собранных примерно из 200 публикаций, ссылки на которые могут быть найдены в работах [8, 9]. С использованием подогнанных моделей конкретная версия CDSD может быть сгенерирована путем задания опорной температуры T_{ref} и отсечки по интенсивности I_{cut} . Коэффициенты столкновительного уширения рассчитываются на основе полумпирической модели [10].

Безразмерные стандартные отклонения взвешенных подгонок параметров эффективного гамильтониана к экспериментальным положениям линий составляют величину от 2 до 3 в зависимости от изотопа. Это означает, что в предположении о разумности используемых весов индивидуальных данных, участвующих в подгонке, интерполяционные расчеты положений линий на основе полученных моделей дают погрешности, сравнимые с погрешностями измерений. Для интенсивностей линий ситуация более благоприятная. Почти во всех случаях невязки подгонки меньше или сравнимы с погрешностями измерений. Вопрос о качестве экстраполяционных расчетов, проводимых на основе полученных моделей, более сложен. Результаты моделирования ряда высокотемпературных спектров с помощью банка CDSD-1000 (см. ниже), подавляющее число линий которого является результатом экстраполяции, позволили сделать заключение о хороших экстраполяционных свойствах подогнанных моделей.

Атмосферные приложения

Первая версия атмосферного банка данных CDSD-296 включала 4 изотопа и была сгенерирована для $T_{ref} = 296 \text{ К}$ и $I_{cut} = 10^{-27} \text{ см}^{-1}/(\text{молекула} \cdot \text{см}^{-2})$ [15]. Вскоре она стала использоваться для обработки данных спектрометра MIPAS, установленного на борту метеоспутника ENVISAT [16]. Мы также пользовались этим банком для поиска и идентификации новых полос в спектрах, регистрируемых Фурье-спектрометрами и внутривибрационными лазерными спектрометрами. По мере появления новых экспериментальных данных банк периодически обновлялся.

Прогресс в совершенствовании характеристик спектрометров наземного и спутникового базирования требовал учета все более слабых линий, что привело к необходимости понижения отсечки по интенсивности I_{cut} . Большинство этих линий пока не наблюдаемы в лабораторных условиях. Поэтому их параметры могут быть получены лишь на основе теоретического расчета. В 2008 г. появилась новая расширенная версия CDSD-296 [7], рассчитанная для

$T_{ref} = 296 \text{ К}$, $I_{cut} = 10^{-30} \text{ см}^{-1}/(\text{молекула} \cdot \text{см}^{-2})$ и содержащая 410 619 линий семи изотопов в диапазоне 5,9–12784,1 см^{-1} . В этом же году, в рамках подготовки к запуску спутника NASA OCO (Orbiting Carbon Observatory) [17], группой из Лаборатории реактивного движения (JPL) был создан банк данных параметров линий CO_2 для диапазона 4300–7000 см^{-1} [18]. Этот банк базируется на высокоточных экспериментальных Фурье-спектрах и содержит положения и интенсивности линий, рассчитанных на основе спектроскопических констант колебательных полос с использованием $T_{ref} = 296 \text{ К}$ и $I_{cut} = 10^{-30} \text{ см}^{-1}/(\text{молекула} \cdot \text{см}^{-2})$. Сравнение банков было проведено в работе [19], где показано, что данные CDSD-296 более точны и надежны, чем данные банка [18]. Это относится в особенности к слабым линиям и возмущенным полосам. На основе этих результатов было принято решение о включении данных из CDSD-296 в БД HITRAN-2008 [1] и GEISA-2009 [2]. В текущей версии банка HITRAN лишь около 10% положений линий являются экспериментальными. Положения же остальных являются расчетными: 78% взяты из CDSD-296, а 12% – из расчета, основанного на методе DND [20]. Для интенсивностей линий ситуация аналогичная. CDSD-296 был использован для поиска новых полос изотопов CO_2 в атмосфере Венеры на основе данных сенсора SOIR, установленного на борту спутника Venus Express. Так, в работе [21] была обнаружена полоса 01111–00001 изотопа $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, прежде не наблюдавшаяся в лабораторных условиях.

Высокие температуры

В 2003 г. мы опубликовали высокотемпературный БД CDSD-1000 с $T_{ref} = 1000 \text{ К}$, $I_{cut} = 10^{-27} \text{ см}^{-1}/(\text{молекула} \cdot \text{см}^{-2})$ [8], предназначенный для моделирования лабораторных спектров, оптической диагностики процессов горения [22], дистанционного обнаружения и контроля выхлопов авиационных и ракетных двигателей [23], изучения атмосферы Венеры [24] и других приложений в диапазоне температур 500–2000 К. С тех пор он использовался, в частности, для моделирования лабораторных высокотемпературных спектров [25, 26], атмосфер экзопланет [27, 28], а также для создания компактных специализированных БД, предназначенных для моделирования спектров низкого разрешения [29, 30]. Банк был также включен в состав базы данных для астрофизических приложений SPECTRAFACTORY.NET [31].

В 2010 г. нами была создана расширенная и улучшенная версия CDSD-1000, которая полностью вошла в состав высокотемпературного аналога HITRAN – БД HITEMP [3]. Эта версия, насчитывающая более 11 млн. линий семи изотопов CO_2 , сгенерирована при $T_{ref} = 1000 \text{ К}$ и $I_{cut} = 10^{-30} \text{ см}^{-1}/(\text{молекула} \cdot \text{см}^{-2})$. Для совместимости с БД HITRAN интенсивности и параметры уширения линий были приведены к стандартной температуре $T = 296 \text{ К}$. Этот банк был получен в результате слияния трех промежуточных банков, сгенерированных для температур 296, 750 и 1000 К. Таким образом, версия CDSD-1000 может быть использована для диапазона температур 296–2000 К.

В недавней работе [32] было проведено моделирование спектров высокого разрешения (номинальное разрешение $0,125 \text{ см}^{-1}$) CO_2 в областях 2,7 и 4,3 мкм для температур 1000, 1373 и 1773 К на основе БД низкого разрешения EM2C [6], RADCAL [4], а также банков HITRAN-2008 [1] и HITEMP [3]. Экспериментальные спектры приводились с помощью процедуры сглаживания к разрешению 32 см^{-1} и затем моделировались с использованием указанных БД. Авторами работы [32] был сделан вывод о том, что использование БД HITEMP обеспечивает наилучшее согласие с экспериментом: в области 2,5–3,5 мкм наибольшее отклонение пропускания составило 0,54%, а в области 3,9–5,4 мкм – 1,02%. Наилучший из остальных тестируемых БД дает втрое худшее согласие.

В последнее время возникла потребность создания банка для еще более высоких температур. Это обусловлено, с одной стороны, появлением лабораторных установок, способных получать и изучать плазму CO_2 вплоть до температур 6000 К [33, 34], и с другой – необходимостью моделирования процесса входа пилотируемого космического аппарата в атмосферу Марса [35, 36]. В работе [9] был представлен БД CDS-4000, предназначенный для диапазона температур 2500–5000 К. Банк содержит более 600 млн линий четырех изотопов CO_2 при $T_{ref} = 4000 \text{ К}$ и $I_{cut} = 10^{-27} \text{ см}^{-1}/(\text{молекула} \cdot \text{см}^{-2})$. Для совместимости с БД HITRAN интенсивности и параметры уширения были приведены к стандартной температуре 296 К. В [9], в частности, показано, что CDS-4000 дает лучшее согласие при моделировании экспериментального спектра низкого разрешения с температурой 2850 К [25], чем CDS-1000. В работе [37] проведено сравнение экспериментальных интенсивностей спектров высокого разрешения ($0,16 \text{ см}^{-1}$) плазмы CO_2 для температур 2000–5000 К, измеренных с помощью Фурье-спектрометра, с результатами моделирования, основанного на банках CDS-4000 и HITELOR [5]. БД низкого разрешения HITELOR, созданный при участии авторов [37], предназначен для температур вплоть до 2500 К. Сравнение проводилось для областей 2,7 и 4,3 мкм. В результате этих исследований было установлено, что в области 2,7 мкм CDS-4000 дает лучшее согласие с экспериментальными данными, особенно в крыле полосы, соответствующем эмиссии из очень горячих областей плазмы. В области 4,3 мкм экспериментальные интенсивности в основном ниже теоретических. Авторы объясняют это возможным влиянием сапфировых окон установки на результаты измерения. В области 4,3 мкм оба БД дают более близкие результаты, чем в области 2,7 мкм. В крыле полосы 4,3 мкм CDS-4000 вновь дает лучшее согласие, чем HITELOR.

Заключение

Три представленные версии спектроскопического банка данных параметров колебательно-вращательных линий молекулы CO_2 охватывают диапазон температур от комнатных до 5000 К. Все они сгене-

рированы с помощью теоретических моделей метода эффективных операторов на основе всех опубликованных экспериментальных данных по положениям и интенсивностям линий 7 изотопов. Результаты моделирования ряда экспериментальных спектров, полученных с использованием банков CDS, а также ряда других, позволяют утверждать, что на сегодняшний день банки CDS являются наиболее точными и полными.

Авторы благодарят коллег А.Д. Быкова и Н.Н. Лаврентьеву за предоставление программ, реализующих расчет параметров столкновительного уширения линий, который был использован для генерации банков данных, представленных в статье. Благодарим также сотрудников информационного центра Института оптики атмосферы за размещение и поддержание банков на компьютерных ресурсах Института.

Работа была частично финансирована грантами РФФИ № 09-05-93105-НЦНИЛ_а, 10-05-91176-ГФЕН_а и 09-05-92508-ИК_а.

1. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Brown L.R., Campargue A., Champion J.P., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Fally S., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Jacquemart D., Lacombe N., Lafferty W.J., Mandin J.-Y., Massie S.T., Mikhailenko S., Moazzen-Ahmadi N., Naumenko O., Nikitin A., Orphal J., Predoi-Cross A., Perevalov V., Perrin A., Rinsland C.P., Rotger M., Šimečková M., Smith M.A.H., Tashkun S., Tennyson J., Toth R.A., Vandaele A.-C., Vander Auwera J. The HITRAN 2008 Molecular Spectroscopic Database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2009. V. 110, N 9–10. P. 533–572.
2. Jacquinet-Husson N., Crepeau L., Armante R., Boutamine C., Chédin A., Scott N.A., Crevoisier C., Capelle V., Boone C., Poulet-Crovisier N., Barbe A., Campargue A., Chris Benner D., Benilan Y., Bézard B., Boudon V., Brown L.R., Coudert L.H., Coustenis A., Dana V., Devi V.M., Fally S., Fayt A., Flaud J.-M., Goldman A., Herman M., Harris G.J., Jacquemart D., Jolly A., Kleiner I., Kleinböhl A., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N., Lacombe N., Xu Li-Hong, Lyulin O.M., Mandin J.-Y., Maki A., Mikhailenko S., Miller C.E., Mishina T., Moazzen-Ahmadi N., Muller H.S.P., Nikitin A., Orphal J., Perevalov V., Perrin A., Petkie D.T., Predoi-Cross A., Rinsland C.P., Remedios J.J., Rotger M., Smith M.A.H., Sung K., Tashkun S., Tennyson J., Toth R.A., Vandaele A.-C., Vander Auwera J. The 2009 edition of the GEISA spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2011. V. 112, N 15. P. 2395–2445.
3. Rothman L.S., Gordon I.E., Barber R.J., Dothe H., Gamache R.R., Goldman A., Perevalov V.I., Tashkun S.A., Tennyson J. HITEMP, the High-Temperature Molecular Spectroscopic Database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2010. V. 111, N 15. P. 2139–2150.
4. Grosshandler W.L. RADCAL: A narrow-band model for radiation calculations in a combustion environment // Technical Report NIST Technical note 1402. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, 1993. V. 205, N 2. P. 239–247.
5. Scutaru D., Rosenmann L., Taine J. Approximate intensities of CO_2 hot bands at 2.7, 4.3, and 12 μm for high temperature and medium resolution applications // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1994. V. 52, N 6. P. 765–781.

6. *Soufiani A., Taine J.* High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H₂O, CO₂ and CO, and correlated-k model for H₂O and CO₂ // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 1997. V. 40, N 4. P. 987–991.
7. *Perevalov V.I., Tashkun S.A.* CDS-296 (Carbon Dioxide Spectroscopic Databank): updated and enlarged version for atmospheric applications // *Proc. the 10th HITRAN database conference.* June 2008, Cambridge, MA, USA.
8. *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. V. 82, N 1–4. P. 165–196.
9. *Tashkun S.A., Perevalov V.I.* CDS-4000: High-resolution, high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2011. V. 112, N 9. P. 1403–1410.
10. *Быков А.Д., Лаврентьева Н.Н., Синица Л.Н.* Расчет коэффициентов уширения и сдвига спектральных линий углекислого газа для высокотемпературных баз данных // *Оптика атмосф. и океана.* 2000. Т. 13, № 12. С. 1098–1102.
11. *Переалов В.И., Тецфо Ж.Л., Люлин О.М., Лободенко Е.И., Сулакишина О.Н., Ташкун С.А., Тютерева В.Г.* Глобальное описание микроволновых, инфракрасных и видимых спектров линейных молекул CO₂ и N₂O в рамках метода эффективных операторов // *Оптика атмосф. и океана.* 1997. Т. 10, № 7. С. 761–785.
12. *Переалов В.И., Ташкун С.А., Тютерева В.Г., Люлин О.М.* Глобальное моделирование спектров высокого разрешения молекул атмосферных газов // *Оптика атмосф. и океана.* 2007. Т. 20, № 5. С. 398–407.
13. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.L., Rothman L.S., Tyuterev V.G.* Global fitting of ¹²C¹⁶O₂ vibrational-rotational line positions using the effective Hamiltonian approach // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1998. V. 60, N 5. P. 785–801.
14. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.L., Tyuterev V.G.* Global fit of ¹²C¹⁶O₂ vibrational-rotational line intensities using the effective operator approach // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1999. V. 62, N 5. P. 571–598.
15. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.L., Bykov A.D., Lavrentieva N.N.* CDS-296, the carbon dioxide spectroscopic databank: version for atmospheric applications // *Proc. the XIV symposium on high resolution molecular spectroscopy, Krasnoyarsk, Russia, 6–11 July 2003.* С. 23.
16. *Фло Ж.-М., Пикколо К., Карли Б., Перрен А., Кудер Л.Х., Тецфо Ж.Л., Браун Л.Р.* Параметры молекулярных линий для эксперимента MIPAS (Интерферометр Майкельсона для пассивного зондирования атмосферы) // *Оптика атмосф. и океана.* 2003. Т. 16, № 3. С. 194–205.
17. *Crisp D., Atlas R.M., Breon F.-M., Brown L.R., Burrows J.P., Ciais P., Connor B.J., Doney S.C., Fung I.Y., Jacob D.J., Miller C.E., O'Brien D., Pawson S., Rander-son J.T., Rayner P., Salawitch R.J., Sander S.P., Sen B., Stephens G.L., Tans P.P., Toon G.C., Wennberg P.O., Wofsy S.C., Yung Y.L., Kuang Z., Chudasama B., Sprague G., Weiss B., Pollock R., Kenyon D., Schroll S.* The Orbiting Carbon Observatory (OCO) mission // *Adv. Space Research.* 2004. V. 34, N 4. P. 700–709.
18. *Toth R.A., Brown L.R., Miller C.E., Malathy Devi V., Chris D.* Bener Spectroscopic database of CO₂ line parameters: 4300–7000 cm⁻¹ // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2008. V. 109, N 6. P. 906–921.
19. *Campargue A., Perevalov B.V.* Comment on “Spectroscopic database of CO₂ line parameters: 4300–7000 cm⁻¹” // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2008. V. 109, N 12–13. P. 2261–2271.
20. *Wattson R.B., Rothman L.S.* Direct numerical diagonalization: wave of the future // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1992. V. 48, N 5–6. P. 763–780.
21. *Wilquet V., Mahieux A., Vandaele A.C., Perevalov V.I., Tashkun S.A., Fedorova A., Korablev O., Montmessin F., Dahoo R., Bertaux J.-L.* Line parameters for the 01111–00001 band of ¹²C¹⁶O¹⁸O from SOIR measurements of the Venus atmosphere // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2008. V. 109, N 6. P. 895–905.
22. *Allen M.G.* Diode laser absorption sensors for gas dynamics and combustion flows // *Measurement Sci. Technol.* 1998. V. 9, N 4. P. 545–562.
23. *Schafer K., Helard J., Lister D.H., Wilson C.W., Howes R.J., Falk R.S., Lindermeier E., Birk M., Wagner G., Haschberger P., Bernard M., Legras O., Wiesen P., Kurtenbach R., Brockmann K.J., Kriesche V., Hilton M., Bishop G., Clarke R., Workman J., Caola M., Geatches R., Burrows R., Black J.D., Herve P., Vally J.* Nonintrusive optical measurements of aircraft engine exhaust emissions and comparison with standard intrusive techniques // *Appl. Opt.* 2000. V. 39, N 3. P. 441–455.
24. *Pollack J.B., Dalton J.B., Grinspoon D., Wattson R.B., Freedman R., Crisp D., Allen D.A., Bezaud B., DeBergh C., Giver L.P., Ma Q., Tipping R.* Near-infrared light from Venus’ nightside: a spectroscopic analysis // *Icarus.* 1993. V. 103, N 1. P. 1–42.
25. *Bharadwaj S.P., Modest M.F.* Medium resolution transmission measurements of CO₂ at high temperature – an update // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2007. V. 103, N 1. P. 146–155.
26. *Ferriso C.C., Ludwig C.B., Acton L.* Spectral-emissivity measurements of the 4.3 μ CO₂ band between 2650 and 3000 K // *J. Opt. Soc. Amer.* 1966. V. 56, N 2. P. 171–173.
27. *Swain M.R., Tinetti G., Vasisht G., Deroo P., Griffith C., Bouwman J., Chen P., Yung Y., Burrows A., Brown L.R., Matthews J., Rowe J.F., Kuschig R., Angerhausen D.* Water, methane, and carbon dioxide present in the dayside spectrum of the exoplanet HD 209458b // *Astrophys. J.* 2009. V. 704, N 2. P. 1616–1621.
28. *Tinetti G., Deroo P., Swain M.R., Griffith C.A., Vasisht G., Brown L.R., Burke C., McCullough P.* Probing the terminator region atmosphere of the hot-jupiter xo-1b with transmission spectroscopy // *Astrophys. J.* 2010. V. 712, N 2. P. L139–L142.
29. *Ozawa T., Garrison M.B., Levin D.A.* Accurate molecular and soot infrared radiation model for high-temperature flows // *J. Thermophys. Heat Transfer.* 2007. V. 21, N 1. P. 19–27.
30. *Andre’ F., Vaillon R.* A database for the SLMB modeling of the full spectrum radiative properties of CO₂ // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2010. V. 111, N 3. P. 325–330.
31. *Cami J., Van Malderen R., Markwick A.J.* SPECTRAFACTORY.NET: A database of molecular model spectra // *Astrophys. J. Suppl. Series.* 2010. V. 187, N 2. P. 409–415.
32. *Becher V., Clausen S., Fateev A., Spliethoff H.* Validation of spectral gas radiation models under oxyfuel conditions. Part A: Gas cell experiments // *Int. J. Greenhouse Gas Control.* 2011. V. 5S, N 1. P. S76–S99.
33. *Packan D., Laux C.O., Gessman R.J., Pierrot L., Kruger C.H.* Measurement and modeling of OH, NO, and CO₂ infrared radiation at 3400 K // *J. Thermophys. Heat Transfer.* 2003. V. 17, N 4. P. 450–456.

34. *Depraz S., Perrin M.Y., Soufiani A.* Infrared emission spectroscopy of CO₂ at high temperature. Part I: Experimental setup and source characterization // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2011 (в печати). doi: 10.1016/j.jqsrt.2011.09.002.
35. *Wright M.J., Tang C.Y., Edquist K.T., Hollis B.R., Krassa P., Campbell C.A.* A review of aerothermal modeling for Mars entry missions // *AIAA.* 2010. P. 1–38. 2010–0443.
36. *Perrin M.Y., Riviere P., Soufiani A.* Radiation database for Earth and Mars entry // EN-AVT-162-08. RTO AVT/VKI Lecture Series on Non-equilibrium gas dynamics from physical models to hypersonic flights. 2008.
37. *Depraz S., Perrin M.Y., Riviere Ph., Soufiani A.* Infrared emission spectroscopy of CO₂ at high temperature. Part II: Experimental results and comparisons with spectroscopic databases // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2011 (в печати). doi: 10.1016/j.jqsrt.2011.09.013.

S.A. Tashkun, V.I. Perevalov. **Radiation properties of CO₂: spectroscopic databases for atmospheric and high-temperature applications.**

The CO₂ spectroscopic databank of rotation-vibration line parameters developed at the Institute of Atmospheric Optics and called CDS (Carbon Dioxide Spectroscopic Databank) is presented. The databank is based on effective Hamiltonian and effective dipole moment theoretical models globally describing high resolution spectra of CO₂ molecule in its electronic ground state. Parameters of the models are fitted to the measured positions and intensities of the spectral lines collected from the literature. Three versions of the databank are discussed. The first one is CDS-296 aimed at atmospheric applications. The second one (CDS-1000) is suited for the 296–2500 K temperature range. Finally, CDS-4000 is suited for temperatures 2500–5000 K. The utilization of all versions of CDS databank in a wide range of atmospheric and high temperature applications is also discussed.