



## UNIVERSITE DE REIMS CHAMPAGNE – ARDENNE

UFR Sciences exactes et naturelles

### THESE DE DOCTORAT

Spécialité : Physique

Ecole doctorale ED358 STS

*Présentée par :*

**OUDOT Charlotte**

En vue d'obtenir le grade de Docteur de l'Université de Reims Champagne – Ardenne

*Sujet de la thèse :*

**Spectroscopie de la vapeur d'eau par Transformation de Fourier.  
Application aux régions d'intérêt atmosphérique.**

*Soutenue le 9 décembre 2011*

*devant le jury :*

|                       |                     |  |
|-----------------------|---------------------|--|
| M. BARBE Alain        | Président du jury   | Professeur<br>Université de Reims Champagne - Ardenne                  |
| M. CAMPARGUE Alain    | Rapporteur          | Directeur de recherche, CNRS<br>Université de Grenoble                 |
| Mme. CLERBAUX Cathy   | Rapporteur          | Directeur de recherche<br>Université Pierre et Marie Curie             |
| M. JACQUEMART David   | Examineur           | Maître de conférences<br>Université Pierre et Marie Curie              |
| M. MIKHAILENKO Semen  | Examineur           | Chargé de recherche<br>Institute of Atmospheric Optics                 |
| Mme. REGALIA Laurence | Directrice de thèse | Maître de conférences (HDR)<br>Université de Reims Champagne - Ardenne |



# Remerciements

*Je tiens à remercier le directeur du Groupe de Spectroscopie Moléculaire et Atmosphérique M. Georges DURRY, pour m'avoir accueillie dans les locaux du laboratoire.*

*Je remercie chaleureusement Mme Laurence REGALIA, pour avoir accepté d'être ma directrice de thèse. Je la remercie de la confiance qu'elle m'a accordée tout d'abord en stage de Master 2 puis ensuite en thèse, de sa disponibilité et pour ses conseils qui m'ont aidé tout au long de ce travail.*

*Ensuite je voudrais remercier Xavier THOMAS, Pierre Von der Heyden et Didier Décatoire pour le temps qu'ils ont passé à m'expliquer les rouages de TF made in Reims, ainsi que leur aide précieuse.*

*Mes remerciements vont également à tous ceux avec qui j'ai pu travaillé au cours de ces trois ans : M. Le WANG (post doctorant) qui a travaillé avec Bfit dans la région de  $8800\text{ cm}^{-1}$ , M. Julien Lamouroux et M. Bob Gamache pour le travail que nous avons entrepris sur les coefficients d'élargissement et qui se poursuit aujourd'hui, M. Ludovic Daumont, pour m'avoir fourni des données d' $\text{HD}^{16}\text{O}$ . Je remercie également tout les chercheurs rencontrés en congrès avec qui j'ai pu échanger. Je salue toute l'équipe spectroscopie du GSMA.*



# Sommaire

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Introduction.....</b>   | <b>1</b>  |
| <br>   |           |
| <b>Partie I. Spectroscopie par Transformation de Fourier –<br/>Description et fonctionnement du STF.....</b>     | <b>7</b>  |
| Principe de la spectroscopie par Transformation de Fourier. ....   | 9         |
| 1 Interféromètre de Michelson .....  | 9         |
| 2 Intensité lumineuse reçue par le détecteur .....   | 10        |
| 3 Echantillonnage de l'interférogramme .....   | 11        |
| 4 Fonction d'appareil.....   | 12        |
| Chapitre 1. Spectromètre par Transformation de Fourier. ....   | 15        |
| 1 Description optique du STF .....   | 16        |
| 2 Gamme de fonctionnement de l'instrument et cellules d'absorption.....  | 19        |
| Chapitre 2. Améliorations du dispositif expérimental.....  | 25        |
| 1 Différence de marche .....   | 25        |
| 2 Double détection .....   | 30        |
| 3 Conclusion .....   | 32        |
| Chapitre 3. Fonctionnement du STF et enregistrement des spectres. ....   | 33        |
| 1 Logiciel d'acquisition .....   | 33        |
| 2 Enregistrement des spectres.....   | 36        |
| 3 Visualisation des spectres, préparation des fichiers pour l'ajustement.....                                    | 39        |
| <br>   |           |
| <b>Partie II. Spectres d'absorptions : généralités et traitement –<br/>Application à la molécule d'eau .....</b> | <b>43</b> |
| Chapitre 1. Rappels sur la loi d'absorption et les paramètres de raie.....                                       | 45        |
| 1 Loi d'absorption.....  | 45        |
| 2 Etude de l'intensité intégrée d'une raie ou force de raie.....   | 47        |
| 3 Expression de l'intensité intégrée à la température T .....  | 49        |
| Chapitre 2. Elargissements et Profils de raies.....  | 51        |
| 1 Elargissement par effet Doppler .....  | 52        |
| 2 Elargissement par effet de collision des molécules : Profil Lorentzien .....                                   | 53        |
| 3 Profil de Voigt.....   | 54        |
| 4 Autres profils de raies.....   | 55        |
| 5 Profil enregistré.....   | 56        |
| Chapitre 3. Traitement des spectres – Logiciel d'ajustement. ....  | 57        |

|             |  |    |
|-------------|--|----|
| 1           | Méthode des moindres carrés non linéaires, application à l'estimation des paramètres de raies..... | 58 |
| 2           | Description du logiciel « MultiFIT » .....   | 61 |
| 3           | Procédures d'ajustement de paramètres expérimentaux .....  | 68 |
| Chapitre 4. | Attribution des spectres.....  | 73 |
| 1           | Généralités sur la molécule d'eau .....  | 73 |
| 2           | Spectre de la vapeur d'eau et Règles de sélection des transitions .....                            | 76 |
| 3           | Attribution des spectres enregistrés au laboratoire .....  | 83 |

## **Partie III. Etude de la vapeur d'eau à 10 $\mu\text{m}$ . - Région d'intérêt pour l'analyse des données IASI ..... 87**

|             |   |     |
|-------------|---|-----|
|             | Contexte de l'étude. IASI : Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge .....  | 89  |
| Chapitre 1. | Etude de l'intensité des raies d'absorption d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$ dans la région spectrale de 1200 à 1400 $\text{cm}^{-1}$ .....   | 95  |
| 1           | Enregistrement des spectres et conditions expérimentales .....  | 97  |
| 2           | Restitution des paramètres de raie : rapports isotopiques.....  | 99  |
| 3           | Construction de la liste de transitions expérimentales .....  | 101 |
| 4           | Comparaison des intensités mesurées d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$ avec les données de la littérature .....                                 | 102 |
| 5           | Éléments de réponse. Choix de la base de données spectroscopique pour l'analyse des spectres IASI.....                                    | 111 |
| Chapitre 2. | Etude des isotopologues $\text{H}_2^{18}\text{O}$ et $\text{HD}^{18}\text{O}$ dans la région spectrale 1000 – 2300 $\text{cm}^{-1}$ ..... | 113 |
| 1           | Conditions expérimentales.....  | 114 |
| 2           | Construction de la liste de paramètres expérimentaux .....  | 117 |
| 3           | Résultats - Comparaisons et discussions .....   | 124 |
|             | Conclusion.....   | 133 |

## **Partie IV. Etude de la vapeur d'eau en abondance naturelle dans la région spectrale de 6400 à 9400 $\text{cm}^{-1}$ ..... 135**

|             |   |     |
|-------------|---|-----|
|             | Introduction.....   | 137 |
| Chapitre 1. | Contexte de l'étude.....  | 139 |
| Chapitre 2. | Enregistrement des spectres.....  | 143 |
| 1           | Fonction d'appareil – Diaphragme apparent .....   | 146 |
| 2           | Traitement des spectres.....  | 147 |
| 3           | Contrôle des pressions partielles sur les spectres longs parcours .....   | 147 |
| 4           | Calibration en position des spectres .....  | 149 |
| Chapitre 5. | Statistiques des transitions mesurées .....   | 151 |
| Chapitre 3. | Comparaisons et discussions des intensités mesurées.....  | 160 |
| 1           | Isotopologue principal $\text{H}_2^{16}\text{O}$ .....  | 162 |
| 2           | Isotopologues mineurs : $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , $\text{H}_2^{17}\text{O}$ et $\text{HD}^{16}\text{O}$ ..... | 174 |
| 3           | Comparaison avec des mesures CRDS.....  | 184 |

|  |            |
|--|------------|
| 4 Conclusion .....   | 189        |
| Chapitre 4. Exploitation des données – Application atmosphérique. ....   | 190        |
| Chapitre 5. Mesure des coefficients d’auto-élargissement pour H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O – Comparaisons et discussions. .... | 197        |
| 1 Etat des lieux .....   | 198        |
| 2 Résultats préliminaires .....  | 198        |
| <b>Conclusion générale .....</b>   | <b>205</b> |
| <b>Liste des Figures .....</b>   | <b>211</b> |
| <b>Liste des Tables .....</b>  | <b>215</b> |
| <b>Références bibliographiques .....</b>   | <b>217</b> |
| <b>Annexes .....</b>   | <b>227</b> |
| 1 H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O – 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> .....  | 229        |
| 2 H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O – 8000 – 9400 cm <sup>-1</sup> : Intensités.....  | 239        |
| 3 H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O – 8000 – 9400 cm <sup>-1</sup> : Coefficients d’auto-élargissement .....                        | 273        |



# ***Introduction***



Les travaux présentés dans ce mémoire s'inscrivent dans le cadre global de la connaissance et de la modélisation de l'atmosphère terrestre et de celle des autres planètes, qui est l'un des enjeux majeurs de ces dernières années. Il est primordial de bien connaître le fonctionnement de l'atmosphère pour répondre aux questions environnementales telles que l'effet de serre, le calcul du bilan radiatif, la concentration en polluants, etc.... L'un des moyens pour apporter des réponses à ces phénomènes est l'analyse de spectres satellitaires. Or ceci n'est possible qu'avec une bonne connaissance des molécules absorbantes dans l'atmosphère. Ce qui permet de les caractériser et d'en déterminer l'abondance. Le but de cette introduction est de présenter le cadre général de cette étude, et de situer le travail mené durant les trois années de ce doctorat.

### **La vapeur d'eau et son rôle dans l'atmosphère terrestre :**

Parmi toutes les molécules qui composent notre atmosphère la vapeur d'eau tient un rôle particulier. Elle est le troisième constituant de l'atmosphère ( $\approx 0.33\%$ ) derrière l'azote ( $\approx 78\%$ ) et le dioxygène ( $\approx 21\%$ ), et elle est également un important gaz à effet de serre, caractérisé par son importante capacité à absorber le rayonnement infrarouge. On peut aussi citer le  $\text{CO}_2$ , qui est un important gaz à effet de serre et dans des proportions inférieures le  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_3$ , etc.... Ces gaz ont une grande influence sur le bilan radiatif terrestre.

La connaissance avec précision de l'abondance de la vapeur d'eau dans l'atmosphère permet de réaliser un suivi météorologique de l'atmosphère. De plus en plus d'études s'intéressent maintenant aux isotopologues minoritaires ( $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ) et non plus seulement à l'isotopologue principal  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ . Même si les espèces mineures sont en très faible quantité, des travaux récents montrent qu'ils sont les marqueurs des événements météorologiques<sup>1</sup>. En particulier l'isotopologue  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , le second isotopologue en abondance naturelle, est un marqueur des événements pluvieux dans l'atmosphère. D'une manière simpliste,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  étant plus lourd qu' $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , il a tendance à condenser plus vite pour former des gouttes, qui atteindront la surface sous forme de précipitation. Au fur et à mesure de ces événements pluvieux l'atmosphère s'appauvrit donc en  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  gazeux. Ces effets sont particulièrement visibles dans le cas des cyclones. Il devient donc primordial d'avoir une connaissance précise de ces isotopologues.

---

<sup>1</sup> Camille Risi, thèse (2009).

### **L'importance des analyses satellitaires :**

Dans l'atmosphère terrestre les processus radiatifs, chimiques et dynamiques s'étendent de l'échelle locale à l'échelle globale. La couverture à l'échelle localisée à partir des mesures réalisées au sol ou provenant de campagnes ballons et aéroportées ne permettent pas d'appréhender dans la globalité les processus mis en jeu dans l'atmosphère. Seuls les satellites permettent d'avoir une couverture globale de l'atmosphère terrestre. De plus les engins spatiaux et leurs instruments embarqués sont un moyen privilégié pour obtenir des informations de l'atmosphère des autres planètes. Par exemple, l'instrument IASI<sup>2</sup>, embarqué sur le satellite Metop, a été construit dans le but d'améliorer les prédictions météorologiques à moyen terme, mais également pour le suivi de la chimie de l'atmosphère terrestre. Chaque jour, plus d'un million de spectres sont envoyés sur Terre par IASI, permettant la couverture quasi globale de l'atmosphère terrestre. Ces spectres satellitaires regroupent les informations sur l'ensemble des molécules de l'atmosphère terrestre. Pour les analyser, il est important de connaître avec précision les molécules atmosphériques et en particulier leurs paramètres spectroscopiques, qui permettent de les caractériser et d'en donner l'abondance. Sur les spectres satellitaires, l'absorption importante de la vapeur d'eau peut également cacher des absorptions dues aux éléments à l'état de trace comme les polluants, dont les abondances permettent de définir la qualité de l'air que nous respirons. La connaissance de la vapeur d'eau intervient ainsi dans plusieurs aspects de l'étude et le suivi de notre atmosphère.

### **Bases de données**

Les paramètres de raie des molécules d'intérêt atmosphérique sont regroupés dans des bases de données. Les plus précises donnent raie par raie les paramètres spectroscopiques des molécules atmosphériques : position, intensité, coefficients d'élargissement, etc.... Parmi les plus connues figurent HITRAN<sup>3</sup> et GEISA<sup>4</sup>. Ces bases de données sont régulièrement améliorées suivant les besoins : par ajout de nouvelles molécules, de nouvelles transitions ou par l'amélioration de la précision des paramètres de raie qui y sont listés. Malgré les efforts entrepris, certaines régions spectrales restent encore mal connues, même pour la vapeur d'eau qui est l'une des molécules les plus étudiées en laboratoire.

---

<sup>2</sup> Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge

<sup>3</sup> High resolution TRANsmision molecular database

<sup>4</sup> Gestion et Etude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques

Le laboratoire du GSMA (Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique) de l'Université de Reims Champagne – Ardenne est engagé dans l'étude des espèces d'intérêt atmosphérique et notamment la vapeur d'eau depuis de nombreuses années avec les études préalablement menées par A. Jenouvrier et M.F. Mérienne<sup>5</sup>. Les études menées en laboratoire permettent d'obtenir les paramètres de raie qui pourront ensuite être utilisés dans l'analyse des spectres satellitaires. Pour mener à bien ces travaux le laboratoire dispose notamment d'un Spectromètre par Transformation de Fourier (STF) et de plusieurs cellules d'absorption permettant des parcours allant de quelques cm à plus d'un km.

Les études menées durant ce doctorat ont pour but de fournir de nouvelles données spectroscopiques pour la molécule d'eau et ses isotopologues. Les régions spectrales étudiées répondent aux problématiques de l'amélioration des bases de données. Ainsi les études spectroscopiques engagées durant mon doctorat se sont orientées vers des régions spectrales d'intérêt atmosphérique ou nécessitant une révision complète.

Ce mémoire est divisé en quatre parties :

Dans un premier temps seront présentés les principes de la spectroscopie par Transformation de Fourier et le spectromètre construit au laboratoire. Différentes améliorations du dispositif expérimental ont permis d'améliorer le rapport signal sur bruit des spectres et ainsi la précision des paramètres de raie des espèces étudiées. L'un des points importants des travaux menés durant ces trois années a été la mesure des raies de faible intensité, ceci a été rendu possible par l'enregistrement de spectres longs parcours.

La seconde partie du manuscrit est réservée à la présentation des paramètres de raies et à l'analyse des spectres enregistrés au laboratoire. Dans un premier temps, seront présentés les paramètres de raies : intensité et coefficients d'élargissement, ainsi que les profils physiques des raies. Ensuite, l'étude des spectres enregistrés au laboratoire sera traitée en deux temps : premièrement la description des propriétés de la molécule d'eau permettra de définir son spectre caractéristique et les règles de sélection associées, puis la méthode d'attribution des transitions mesurées sera présentée. Pour terminer le logiciel d'ajustement « MultiFiT » sera décrit. Ce logiciel permet d'ajuster simultanément plusieurs spectres expérimentaux, ce qui en fait un outil particulièrement efficace et performant. Quelques fonctionnalités du logiciel particulièrement utiles pour les travaux présentés dans ce mémoire seront développées dans ce chapitre.

---

<sup>5</sup> P.F. Coheur et al. JQSRT (2002) ; P. F. Coheur et al. JQSRT (2003) ; S. Fally et al. JQSRT (2003) ; M.F. Mérienne et al. JQSRT (2003) ; A. Jenouvrier et al. JQSRT (2007).

La suite du manuscrit concerne les études spectroscopiques réalisées durant ce doctorat pour la vapeur d'eau. Les efforts de mesure se sont concentrés sur deux régions spectrales distinctes. Cependant le point commun entre ces régions est la nécessité d'apporter de nouveaux paramètres spectroscopiques afin d'améliorer les bases de données et in fine, d'améliorer les précisions des mesures d'abondance par satellite ou les prédictions météorologiques. Dans la problématique de l'analyse de l'atmosphère terrestre et de celle des autres planètes, l'étude des paramètres de raie est connecté à un ensemble très divers de thèmes de recherche. Sans une connaissance précise des paramètres spectroscopiques des molécules atmosphériques, il n'est pas possible pour les groupes de recherche travaillant sur les spectres satellitaires de donner des estimations précises de la composition de notre atmosphère.

Dans un premier temps les travaux menés dans la région spectrale de 10  $\mu\text{m}$  qui fait partie du domaine spectral d'étude de l'instrument IASI seront présentés. Deux études distinctes ont été menées dans cette région spectrale. Dans la région de 1200 à 1400  $\text{cm}^{-1}$ , l'étude de l'isotopologue principal  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  a été engagée en 2005 au laboratoire. Pour ce travail notre équipe de recherche était en charge de la validation expérimentale des intensités des bases de données spectroscopiques. L'un des points d'intérêt était la mesure des raies de faible intensité, ce travail a pu être mené à la suite du couplage du STF du laboratoire avec une cellule de 50 m de base. Les mesures réalisées dans cette région spectrale et plusieurs articles parut récemment ont permis d'apporter une réponse au problème qui nous était posé. Ensuite, l'étude de l'isotopologue  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  a été motivée par le fait qu'il est l'un des absorbants majeurs dans la région spectrale de travail de IASI et qu'il reste mal connu. L'isotopologue  $\text{HD}^{18}\text{O}$  a été inclut dans cette étude car il a montré une absorption suffisante pour donner une liste de paramètres expérimentaux.

La dernière partie de ce manuscrit présente l'étude de la vapeur d'eau en abondance naturelle dans la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Ce travail s'inscrit dans le cadre global de la connaissance de la vapeur d'eau dans lequel est engagé notre laboratoire depuis de nombreuses années. Nous nous sommes tout d'abord concentrés sur la région centrée à 8800  $\text{cm}^{-1}$ . En effet, celle-ci reste mal connue dans les bases de données spectroscopiques et elle présente d'importants problèmes au niveau des intensités, comme cela a été remarqué dans plusieurs travaux publiés depuis les années 2000. Une brève bibliographie sera consacrée à ce sujet dans cette partie. L'étude de la vapeur d'eau en abondance naturelle a permis de mesurer un grand nombre de raies pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  et les isotopologues mineurs  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$ , qui forment désormais un ensemble cohérent de mesure. Une partie de ces mesures a été introduite dans le modèle atmosphérique utilisé par une équipe de l'Université de Reading (UK) pour l'analyse de spectres atmosphériques enregistrés à partir du sol. Ces observations comparées à nos mesures sont en bien meilleur accord qu'avec la base HITRAN. Les résultats de ce travail et leur influence sur le calcul du bilan radiatif

terrestre seront présentés à la fin du manuscrit. Grâce au logiciel « MultiFIT », simultanément à la mesure des intensités, nous avons mesuré les coefficients d'auto-élargissement. Des résultats préliminaires seront présentés dans cette dernière partie et comparés aux valeurs d'HITRAN2008, à des mesures expérimentales et également à des données théoriques.



***Partie I.***

***Spectroscopie par***

***Transformation de Fourier –***

***Description et fonctionnement***

***du STF.***



# Principe de la spectroscopie par Transformation de Fourier.

## 1 Interféromètre de Michelson

L'interféromètre de Michelson repose sur le principe bien connu d'interférence à deux ondes lumineuses. Le schéma de principe d'un interféromètre de Michelson est donné à la Figure 1.

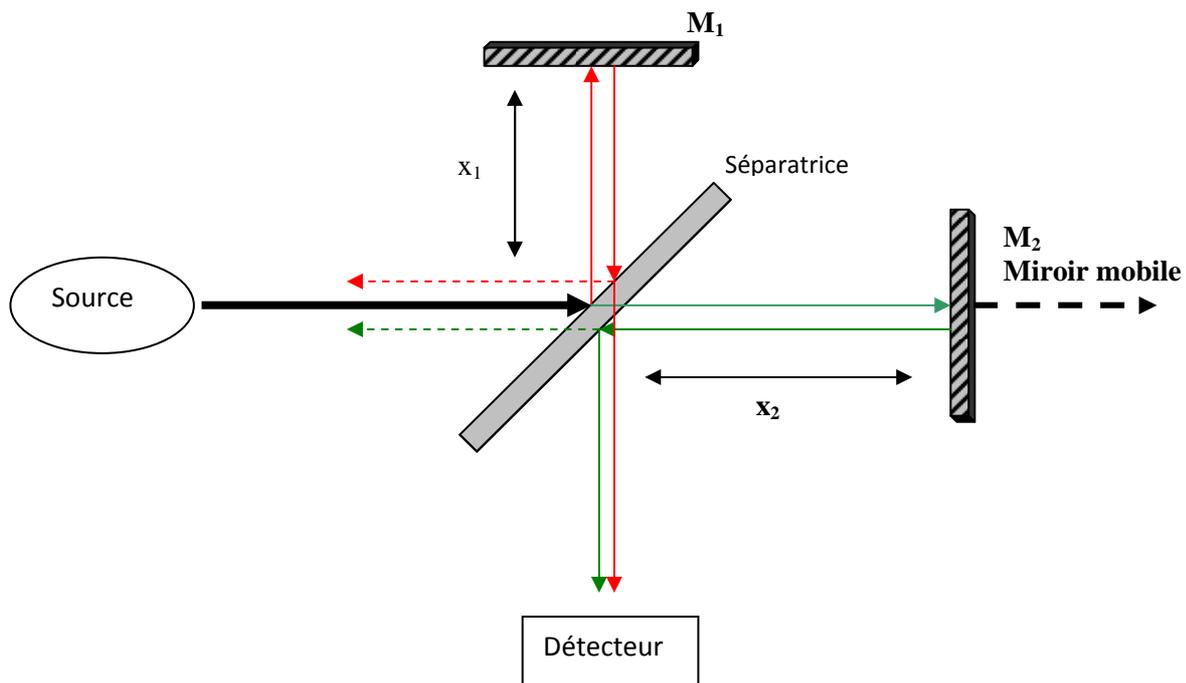


Figure 1 : Principe de l'interféromètre de Michelson.

Le faisceau incident, provenant de la source lumineuse, est divisé en deux faisceaux au niveau de la lame séparatrice (rouge et vert à la Figure 1). Ces deux faisceaux vont alors suivre des chemins optiques différents. Dans le cas d'une lame séparatrice et mélangeuse parfaite on considère que cette lame réfléchit la moitié du faisceau incident, vers le miroir  $M_1$ , et que l'autre moitié est transmise vers le miroir  $M_2$ . On considère que les deux miroirs  $M_1$  et  $M_2$  sont des miroirs plans

totalemment réfléchissants. Seul le miroir  $M_2$  est mobile, permettant de créer une Différence De Marche (DDM) variable entre les faisceaux réfléchis et transmis qui est donnée par :

$$\delta = 2(x_2 - x_1)$$

Au final en sortie de l'interféromètre de Michelson seule la moitié de l'intensité du signal incident va être reçue par le détecteur et donc analysée.

## **2 Intensité lumineuse reçue par le détecteur**

Pour déterminer l'intensité reçue par le détecteur il est nécessaire d'exprimer et de sommer les champs électriques créés par les deux faisceaux émergents de la lame séparatrice. Dans le cas où l'interféromètre de Michelson est éclairé par un rayonnement polychromatique dans un domaine spectral de nombres d'onde compris entre  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$ , l'expression du flux reçu par le détecteur est donnée par la relation :

$$\Phi(\delta) = \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) d\sigma + \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \cos(2\pi\sigma\delta) d\sigma$$

Avec :

- $2\pi\sigma\delta$  = déphasage entre les deux faisceaux
- $\sigma$  = nombre d'onde de la vibration
- $\delta$  = différence de marche entre les deux faisceaux

Cette expression présente la sommation de deux composantes : une continue et une partie variable par rapport à la différence de marche  $\delta$ . On appelle interférogramme la partie variable que l'on note :

$$I(\delta) = \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \cos(2\pi\sigma\delta) d\sigma$$

Dans la pratique, on cherche à éliminer la partie continue pour ne garder que la partie variable en fonction de la différence de marche. Plusieurs techniques le permettent, suivant les caractéristiques de l'appareil. Au laboratoire nous procédons à une modulation de la différence de marche, qui consiste à effectuer deux enregistrements successifs à  $\delta+\Delta/2$  et  $\delta-\Delta/2$ , pour chaque point interférométrique à une différence de marche  $\delta$  et avec  $\Delta$  l'amplitude de la modulation. La différence entre ces deux mesures à  $\delta+\Delta/2$  et  $\delta-\Delta/2$  permet d'écrire :

$$\Phi(\delta + \Delta/2) - \Phi(\delta - \Delta/2) = \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \sin(2\pi\sigma\delta) \sin(\pi\sigma\Delta) d\sigma$$

Le spectre sera finalement obtenu après une Transformation de Fourier en sinus de l'interférogramme. Le procédé de la modulation de la différence de marche sera détaillé au chapitre 2 (à partir de la page 25).

### **3 Echantillonnage de l'interférogramme**

Dans la pratique pour le traitement numérique des informations, il est nécessaire d'échantillonner l'interférogramme. De plus l'intervalle spectral est nécessairement limité par l'utilisation de filtres optiques correctement choisis et par les éléments optiques propres au spectromètre : détecteurs, lame séparatrice, etc.... Ceci conduit à définir un pas d'échantillonnage  $p$  pour l'enregistrement qui satisfait au théorème de Shannon. Cette précaution permet d'éviter les phénomènes de recouvrement de spectre.

$$p \leq p_{max} = \frac{1}{2(\sigma_{Max} - \sigma_{Min})}$$

Avec

- $p_{max}$  pas maximum
- $\sigma_{Max}$  et  $\sigma_{Min}$  les bornes maximum et minimum de l'intervalle spectral considéré.

Le nombre de points du spectre sera égal au nombre de points enregistrés de l'interférogramme soit :  $N = \frac{\delta_{Max}}{p} + 1$  avec  $\delta_{Max}$  la différence de marche maximum.

Le spectre sera obtenu comme une suite de valeurs discrètes distantes de  $\frac{1}{2\delta_{Max}}$  (si on prend  $p = p_{max}$ ). Cette relation définit également la résolution non apodisée  $\Delta\sigma$  de l'appareil. Suivant la résolution voulue, la différence de marche maximum et le nombre de points à enregistrer seront conditionnés par les expressions :

$$\delta_{Max} = \frac{1}{2\Delta\sigma}$$

$$N = \frac{\delta_{Max}}{p} + 1 = \frac{1}{2p\Delta\sigma} + 1$$

## 4 Fonction d'appareil

### 4.a Fonction d'appareil théorique

La différence de marche est nécessairement limitée à une valeur finie, choisie selon les caractéristiques instrumentales et la résolution souhaitée. Ceci revient à multiplier l'interférogramme  $I(\delta)$  par une fonction « porte » que l'on note  $\Pi(\delta)$ .

$$\Pi(\delta) = 1 \text{ pour } |\delta| \leq \delta_{Max}$$

$$\Pi(\delta) = 0 \text{ pour } |\delta| > \delta_{Max}$$

Entre les valeurs de différences de marche 0 et  $\delta_{Max}$ , le spectre  $B'(\sigma)$  est obtenu après une transformation de Fourier en sinus :

$$B'(\sigma) = TF_{Sin}[I(\delta)] \otimes TF[\Pi(\delta)]$$

Avec  $\otimes$  qui représente un produit de convolution et  $TF_{Sin}$  étant une transformée de Fourier en sinus. On note  $f(\sigma)$  la transformée de Fourier de la fonction porte  $\Pi(\delta)$ .

$$f(\sigma) = TF[\Pi(\delta)] = 2\delta_{Max} \frac{\sin(2\pi\sigma\delta_{Max})}{2\pi\sigma\delta_{Max}} = 2\delta_{Max} \text{Sinc}(2\pi\sigma\delta_{Max})$$

$f(\sigma)$  est définie comme la fonction d'appareil théorique d'un spectromètre par transformation de Fourier. Il s'agit d'un sinus cardinal, qui comporte, par définition, d'importants pieds négatifs (Figure 2).

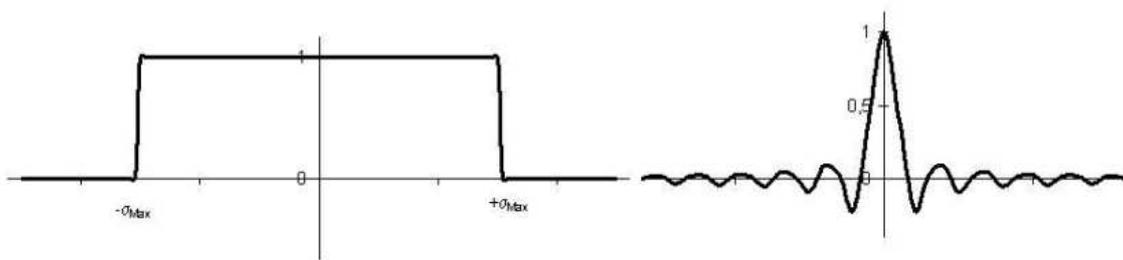


Figure 2 : Fonction « porte » à gauche et sa transformée de Fourier à droite.

#### 4.b Effet de l'étendue du faisceau

En pratique d'autres effets sont à prendre en compte. Notamment l'existence d'un diaphragme à l'entrée de l'interféromètre qui limite l'étendue du faisceau à une grandeur finie. Le diaphragme d'entrée provoque un effet de pondération de l'interférogramme comme cela a été montré dans la thèse de J. Pinard [1] par la fonction :

$$P(\delta) = \left| \text{Sinc} \left( \frac{\sigma_o \Omega \delta}{2} \right) \right|, 0 \leq \delta \leq \delta_{Max}$$

Avec :

- $\sigma_o$  le nombre d'onde analysé
- $\Omega$  : l'angle solide définit par  $\Omega = \pi \left( \frac{r}{f} \right)^2$  avec :  $r$ , le rayon du diaphragme et  $f$  la distance focale du miroir d'entrée de l'interféromètre.

L'introduction de cette fonction de pondération a deux conséquences :

- Elargissement de la fonction d'appareil, donc une baisse de la résolution
- Déplacement des nombres d'onde du spectre vers des valeurs plus faibles suivant la relation :  $\sigma = \sigma_o \left( 1 - \frac{\Omega}{4\pi} \right)$ .

#### 4.c Conclusion

Les effets de la limitation de la différence de marche ainsi que la pondération de l'interférogramme due au diaphragme d'entrée proviennent uniquement de la configuration du spectromètre et ils déterminent sa fonction d'appareil. En plus de ces effets instrumentaux, on peut ajouter une pondération numérique à l'interférogramme [2][3]. Cette pondération a pour but de réduire notablement les pieds négatifs de la fonction d'appareil théorique. La présence de pieds importants peut notamment perturber l'identification des raies lorsque la résolution est insuffisante.



## **Chapitre 1.**

# **Spectromètre par Transformation de**

# **Fourier.**

Le Spectromètre par Transformation de Fourier (STF) a été construit au laboratoire suivant le modèle prévu par Pierre Connes [4]. Cet interféromètre fonctionne en mode pas à pas, suivant le même principe que l'interféromètre de Michelson, dont les bras sont repliés de manière totalement symétrique. Néanmoins l'interféromètre du laboratoire est doté d'un dispositif optique plus complexe, qui sera présenté dans ce chapitre. Le STF du laboratoire a été décrit de nombreuses fois [5][6][7], ainsi ce chapitre constitue un résumé des fonctionnalités et de la constitution de l'appareil.

# ***1 Description optique du STF***

## ***1.a Montage général***

On distingue tout d'abord le parcours optique externe dans lequel plusieurs miroirs plans et concaves permettent de diriger et focaliser le faisceau lumineux de la source vers l'entrée de l'interféromètre. Ces différents éléments sont tous placés dans des caissons étanches, reliés entre eux par des tubes qui suivent le chemin du faisceau lumineux. Ce dispositif permet de mettre toute cette partie sous vide. Ainsi les gaz présents dans l'atmosphère ambiante ( $H_2O$ ,  $CO_2$ , ...) de la pièce n'influenceront pas ou peu sur les spectres enregistrés.

C'est dans le parcours optique externe (encadré à la Figure 3), que vient se placer la cellule d'absorption qui contient le gaz à étudier. La configuration présentée Figure 3 est utilisée avec les cellules d'absorption de petits parcours de quelques cm jusqu'à 40 m avec la cellule de White de 1 m de base. Les cellules se placent suivant leur dimension à l'horizontal ou à la verticale du plan de travail.

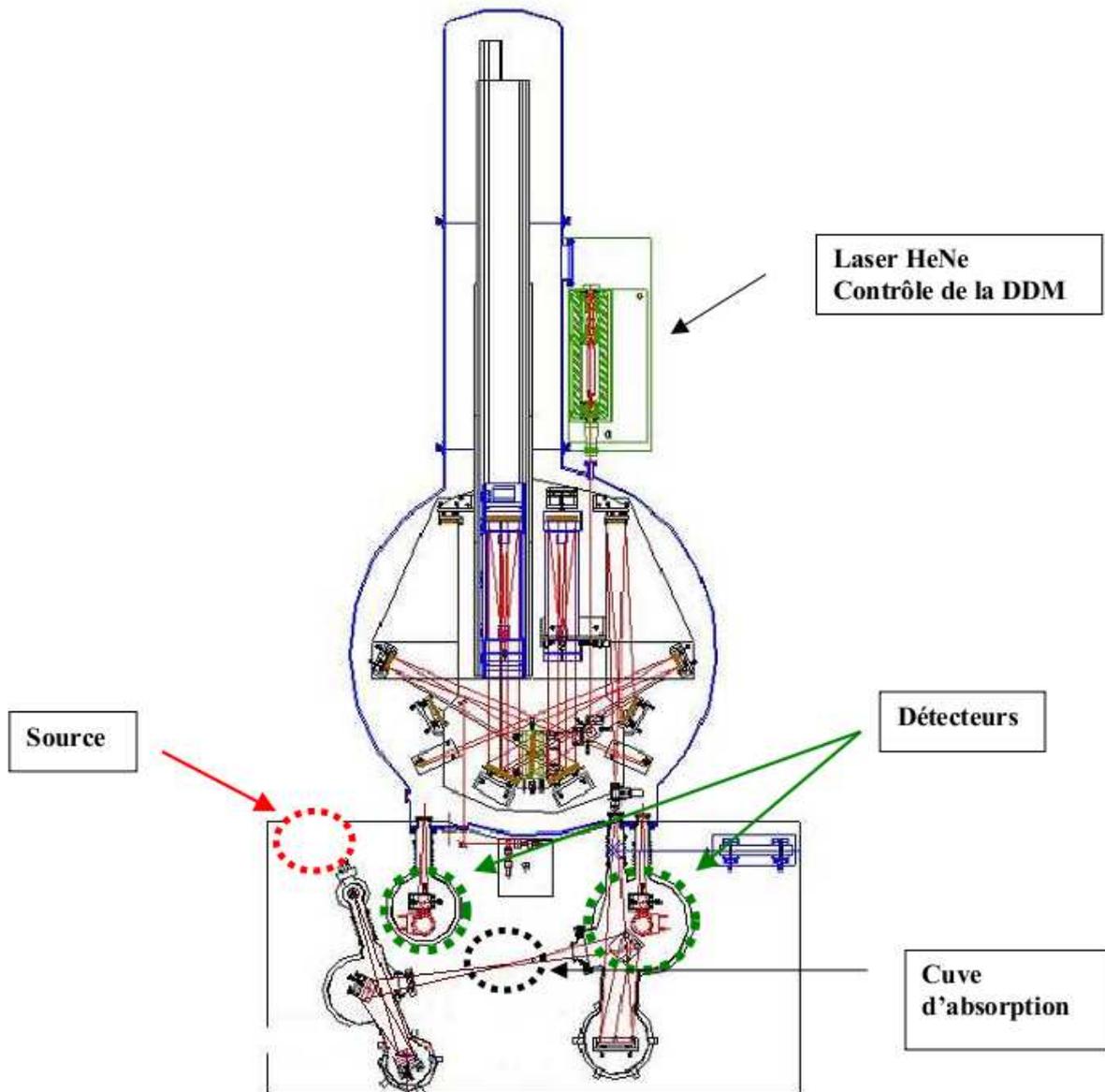


Figure 3 : Spectromètre par Transformation de Fourier, montage général

## 1.b L'interféromètre

La configuration de l'interféromètre construit au laboratoire est celui d'un interféromètre de Michelson dont les bras sont repliés de manière totalement symétrique. L'ensemble est placé dans un caisson étanche permettant la mise sous vide de l'interféromètre durant l'enregistrement d'un spectre.

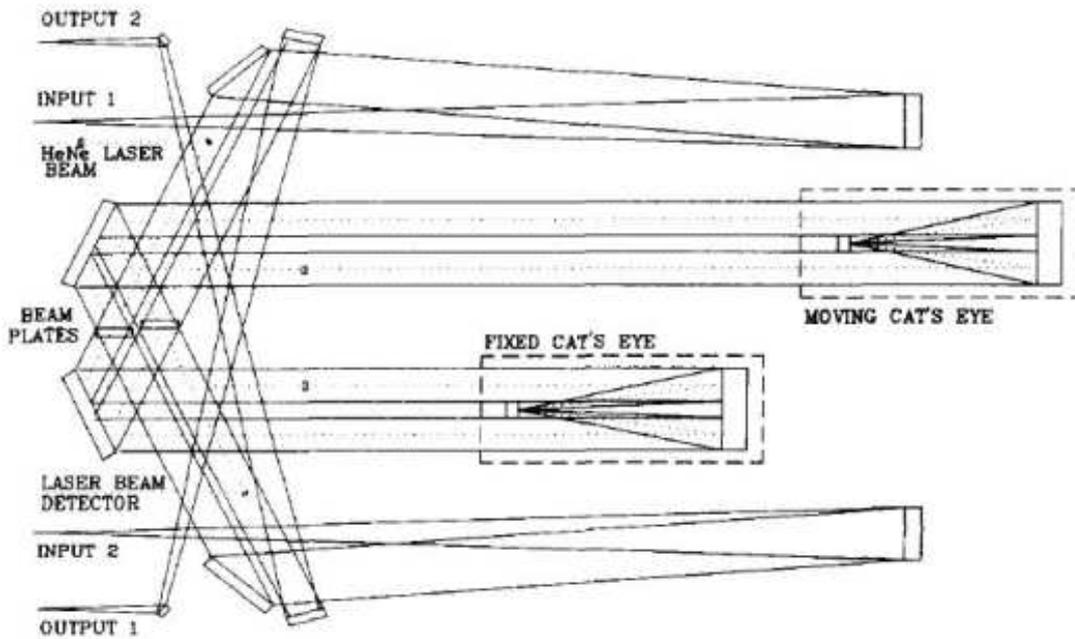


Figure 4 : Schéma de principe de l'interféromètre de Michelson construit au laboratoire

Les miroirs plans d'un Michelson classique sont remplacés par des dispositifs « œil de chat » identiques dans chacun des bras de l'interféromètre. L'un des deux est disposé sur un chariot mobile sur une poutre de 1.50 m, il permet ainsi d'obtenir au maximum une différence de marche de 3 m entre les deux faisceaux qui interfèrent, ce qui donne une résolution non apodisée de  $1.7 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ . Un « œil de chat » est constitué d'un petit miroir convexe placé au foyer d'un miroir concave. Ce système optique permet, en principe, de corriger toute inclinaison du faisceau entrant.

## **2 Gamme de fonctionnement de l'instrument et cellules d'absorption**

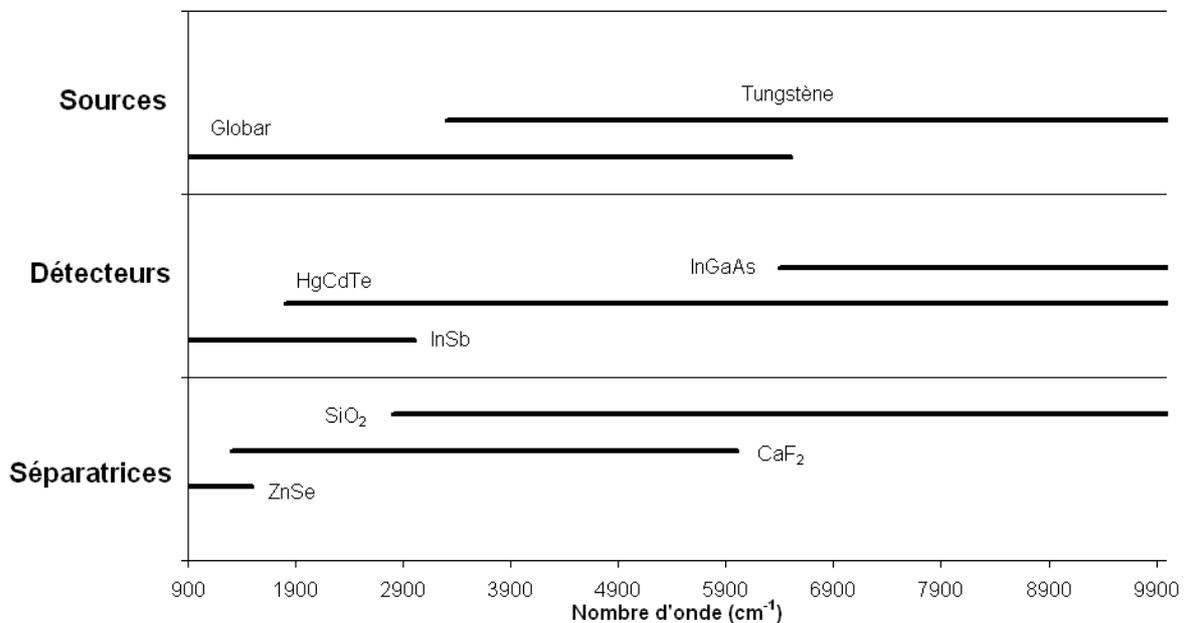
### **2.a Eléments optiques**

Le STF construit au laboratoire peut fonctionner dans la gamme spectrale allant de 900 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Cette large gamme spectrale peut être atteinte avec plusieurs éléments optiques : sources, détecteurs, séparatrices, lentilles et également de nombreux filtres optiques qui permettent de mieux définir la région spectrale à enregistrer.

#### **Eléments optiques disponibles au laboratoire :**

- sources : un globar (bâtonnet de carbure de silicium) et une lampe à tungstène
- détecteurs : HgCdTe, InSb, InGaAs
- séparatrices : ZnSe,  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{SiO}_2$

La Figure 5 donne de manière synthétique les gammes spectrales de fonctionnement des éléments optiques (sources, détecteurs et séparatrices) dont dispose le laboratoire.



**Figure 5 : Gamme de fonctionnement des détecteurs et séparatrices dont dispose le laboratoire**

## 2.b Cellules d'absorption

Le laboratoire possède de plusieurs cellules d'absorption qui sont soit simple parcours, soit multi-passages de type White [8] :

- cellules simple passage : 3, 5, 10, 30, 50 et 60 cm
- cellules de White : 1, 5 et 50 m

Ces cellules d'absorption permettent d'enregistrer des spectres avec des parcours d'absorption allant de 3 cm jusqu'au kilomètre, avec la cellule de 50 m de base. Les parcours d'absorption sont choisis en fonction de la gamme d'intensité que l'on souhaite analyser. En effet, il est important pour la détermination des paramètres spectroscopiques d'avoir des raies bien définies, ni saturées ni trop faibles.

### .2.b.1 Cellule de 50 m de base

Les cellules multi-passages du laboratoire sont construites selon le modèle proposé par J.U. White [8] qui repose sur trois miroirs ayant le même rayon de courbure. La Figure 6 présente le système de réflexion multiple de la cellule de 50 m de base. Pour cette cellule, les trois miroirs A, B et C, ont été obtenus à partir d'un miroir concave unique. Ceci assure que chacun des trois miroirs aura exactement le même rayon de courbure. Pour modifier le nombre d'aller-retour, et donc augmenter ou diminuer le parcours d'absorption, il faut imposer une rotation du miroir C autour de son axe vertical.

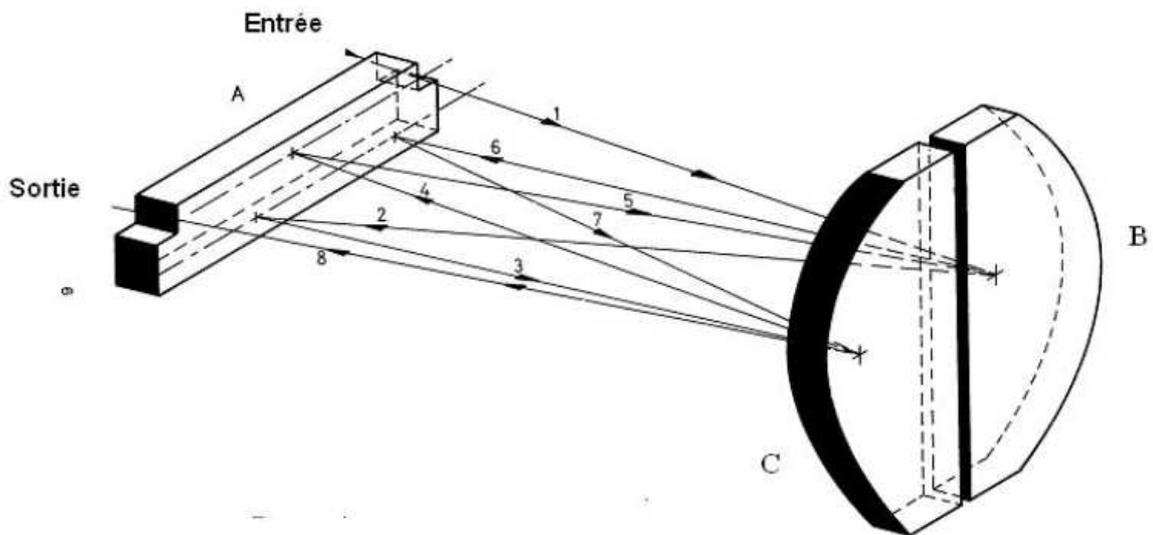


Figure 6 : Principe du système à réflexion multiples

Cette cellule a été construite au laboratoire en 1985 [9] par A. Jenouvrier, Ingénieur de recherche, et J.P Lux, Technicien dans notre laboratoire. Le couplage optique de l'interféromètre avec la cellule de 50 m a été achevé fin 2007, juste avant mon arrivée au laboratoire, ce dispositif est maintenant totalement opérationnel. Il est important de noter que la cellule de 50 m depuis sa construction avait déjà été utilisée pour des études spectroscopiques, mais pas avec ce spectromètre. Par exemple cette cellule avait été couplée au STF commercial Bruker IFS 120M de l'IASB<sup>6</sup> pour l'étude de la région spectrale de 4200 à 6600  $\text{cm}^{-1}$  [10], étude menée en collaboration avec M. Carleer et S. Fally.

Ce dispositif a été implanté dans le sous-sol partiellement thermostaté du bâtiment 7 de l'UFR Sciences Exactes et Naturelles de l'Université de Reims Champagne – Ardenne (Figure 7). Les caractéristiques techniques de cette cellule peuvent être trouvées dans l'article de A. Jenouvrier et J.P. Lux [9]. Ce dispositif, qui autorise des parcours d'absorption dépassant le kilomètre, est quasi unique en Europe. Il permet grâce aux longs parcours d'absorption d'accéder à la mesure précise des paramètres spectroscopiques des raies d'intensité faibles.



**Figure 7: Vues de la cellule de 50m, installée au sous-sol du bâtiment 7, UFR Sciences Exactes et Naturelles, Reims.**

<sup>6</sup> IASB : Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique

## 2.c Couplage optique de l'interféromètre avec la cellule de 50 m de base

La configuration du parcours externe est différente dans le cas où l'interféromètre est couplé avec la cellule de 50 m, le montage est présenté Figure 8. Le parcours optique externe (entouré de rouge sur la Figure 8) est très similaire à celui présenté pour le montage général (Figure 3), mais adapté pour répondre aux contraintes de l'emplacement du dispositif expérimental, ainsi qu'à la différence d'ouverture des deux appareils (développé page 22). Les éléments entourés en bleu ne participent pas au dispositif expérimental couplé à la cellule de 50 m, mais sont utilisés avec les autres cellules d'absorption du laboratoire (Figure 3).

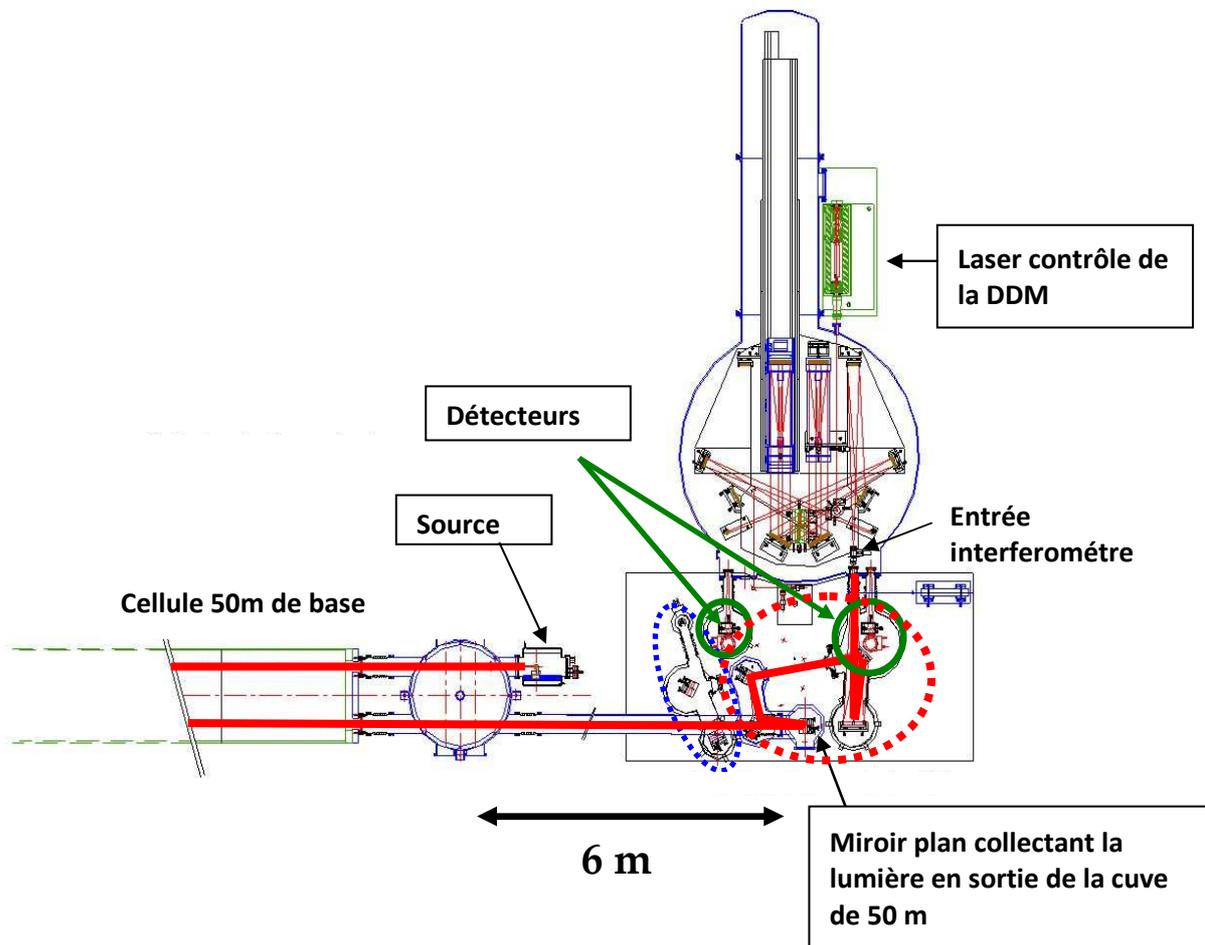
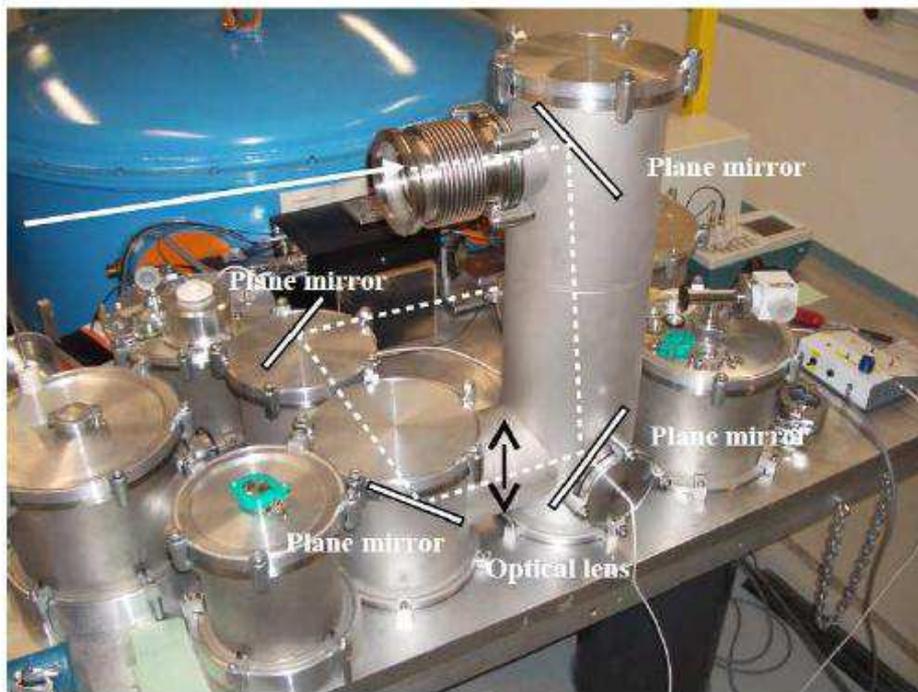


Figure 8 : Interféromètre de Michelson couplé à la cellule de 50 m de base.

La principale difficulté technique dans le raccordement de la cellule de 50 m à l'interféromètre de type Michelson a été le couplage optique des deux appareils en raison de leur différence d'ouverture. En effet la cellule de 50 m a une ouverture de  $f/320$  alors que l'ouverture de l'interféromètre est de  $f/20$ . Dans le parcours externe présenté Figure 9, la position de la lentille, joue un rôle primordial. Sa position a été définie pour que l'éclairement du premier miroir d'entrée de l'interféromètre soit le meilleur possible, ceci conduit à former une image de la source très petite au niveau du diaphragme d'entrée. La taille du diaphragme d'entrée est choisie comparable à la taille de l'image de manière à avoir le moins de problèmes possibles lors de la modélisation de la fonction d'appareil dans le logiciel de traitement.



**Figure 9 : Photo du parcours optique externe, dispositif expérimental couplé à la cellule de 50 m.**



## **Chapitre 2.**

### **Améliorations du dispositif expérimental.**

#### **1 Différence de marche**

##### **1.a Contrôle de la DDM**

Le spectromètre construit au laboratoire fonctionne en mode pas à pas, la connaissance très précise de la différence de marche est donc primordiale tout au long de l'enregistrement. Le chariot mobile du STF est équipé de trois dispositifs complémentaires permettant de l'actionner sur la poutre qui le soutient [6]. Ces dispositifs permettent d'effectuer des mouvements d'amplitude très différents. Des grands déplacements, qui permettent de passer d'un point interférométrique au suivant, et des déplacements de l'ordre de quelques  $\mu\text{m}$  pour réaliser la modulation interne de la différence de marche, qui sera décrite dans la suite de ce paragraphe.

Pour contrôler la différence de marche et corriger une erreur de position du chariot, le laboratoire dispose d'un laser HeNe, stabilisé sur une raie d'iode saturée ( $\lambda=0.6328 \mu\text{m}$ ). Ce laser suit le même trajet optique que le faisceau lumineux en provenance de la source, et il est détecté via deux photomultiplicateurs. C'est l'interférométrie laser qui permet de contrôler en temps réel le déplacement du chariot mobile et de corriger sa position. La description complète de ce système est donnée dans la thèse de L. Régalia [6]. Ce laser a été construit au laboratoire en collaboration avec C. Cerez du Laboratoire de l'Horloge Atomique de l'université d'Orsay. Le logiciel d'asservissement en fréquence du laser HeNe a été développé par X. Thomas, ingénieur de recherche au laboratoire.

### 1.b Principe de la modulation de la différence de marche

Le STF du laboratoire fonctionne en mode pas à pas avec une modulation interne de la différence de marche, comme cela a été évoqué dans l'introduction (page 2). Le schéma de principe est présenté à la Figure 10. Cette procédure permet d'une part de s'affranchir de la partie continue du flux reçu par le détecteur  $\Phi(\delta)$  et d'autre part d'éliminer une partie des bruits instrumentaux, liés notamment à la source. La différence entre deux enregistrements à  $\delta+\Delta/2$  et  $\delta-\Delta/2$  permet d'écrire pour chaque point interférométrique  $\delta$  (notés  $DDM_1$  et  $DDM_2$  sur la Figure 10) et avec  $\Delta$  l'amplitude de la modulation notée DNQ à la Figure 10 :

$$\Phi(\delta + \Delta/2) - \Phi(\delta - \Delta/2) = \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \sin(2\pi\sigma\delta) \sin(\pi\sigma\Delta) d\sigma$$

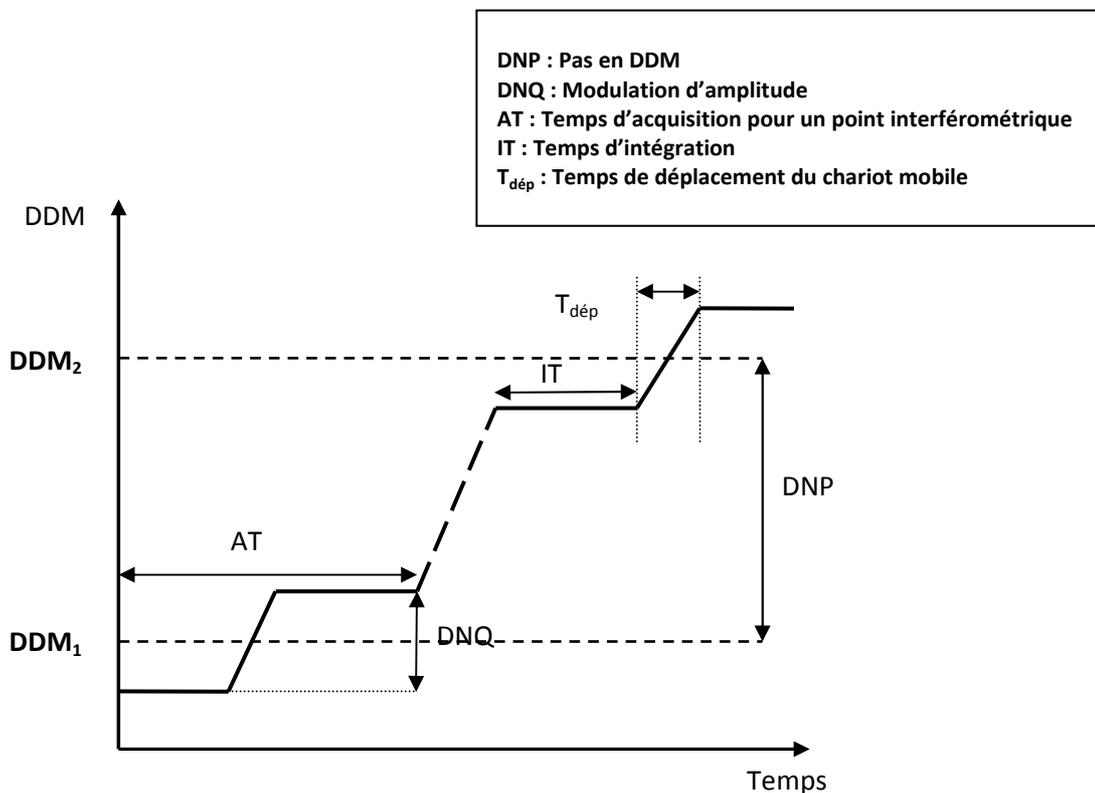


Figure 10 : Principe de la modulation de la différence de marche

L'interférogramme obtenu après soustraction des signaux s'écrit en fonction de sinus, dont une fonction de filtrage qui dépend de la modulation d'amplitude DNQ. On note DNP, le pas interférométrique qui permet de passer d'un point interférométrique au suivant. Sur la Figure 11,  $DNP = DDM_2 - DDM_1$ . La valeur minimale d'un pas interférométrique est donnée par  $DNP_{min} = \lambda/16$  (avec  $\lambda$  la longueur d'onde du laser HeNe d'asservissement). La valeur du DNP est choisie en fonction de la largeur en nombre d'onde de la région étudiée, en respectant le théorème d'échantillonnage de Shannon. La variation de la modulation d'amplitude DNQ, dépend de la région spectrale étudiée. Dans la pratique on cherchera à avoir une amplitude de modulation DNQ telle que :

$$\sin(\pi\sigma\Delta) = 1$$

Enfin, le déplacement du chariot mobile demande un temps ( $T_{dép}$ ) qui correspond à un temps de déplacement et de stabilisation de la position. Le temps d'intégration IT, correspond au temps réel d'acquisition des données. Le temps  $T_{dép}$  est ainsi un temps perdu dans le temps total d'enregistrement d'un spectre.

### **1.c Amélioration de la modulation de la DDM**

La modulation de la différence de marche réalisée au laboratoire suit le principe général développé au paragraphe précédent, mais une modulation supplémentaire est ajoutée par l'intermédiaire d'un nombre de cycle (NC). Le schéma de principe de cette modulation est donnée Figure 11. Cette procédure consiste pour une valeur de la différence de marche donnée à effectuer un nombre N d'enregistrements successifs à  $\delta + \Delta/2$  et  $\delta - \Delta/2$ . La Figure 11 présente une modulation de la différence de marche réalisée pour un nombre de 3 cycles.

Ainsi sur N cycles, la soustraction des signaux à  $\delta + \Delta/2$  et  $\delta - \Delta/2$  devient :

$$\sum_{NC=0}^N \Phi(\delta + \Delta/2) - \Phi(\delta - \Delta/2) = \frac{N}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \sin(2\pi\sigma\delta) \sin(\pi\sigma\Delta) d\sigma$$

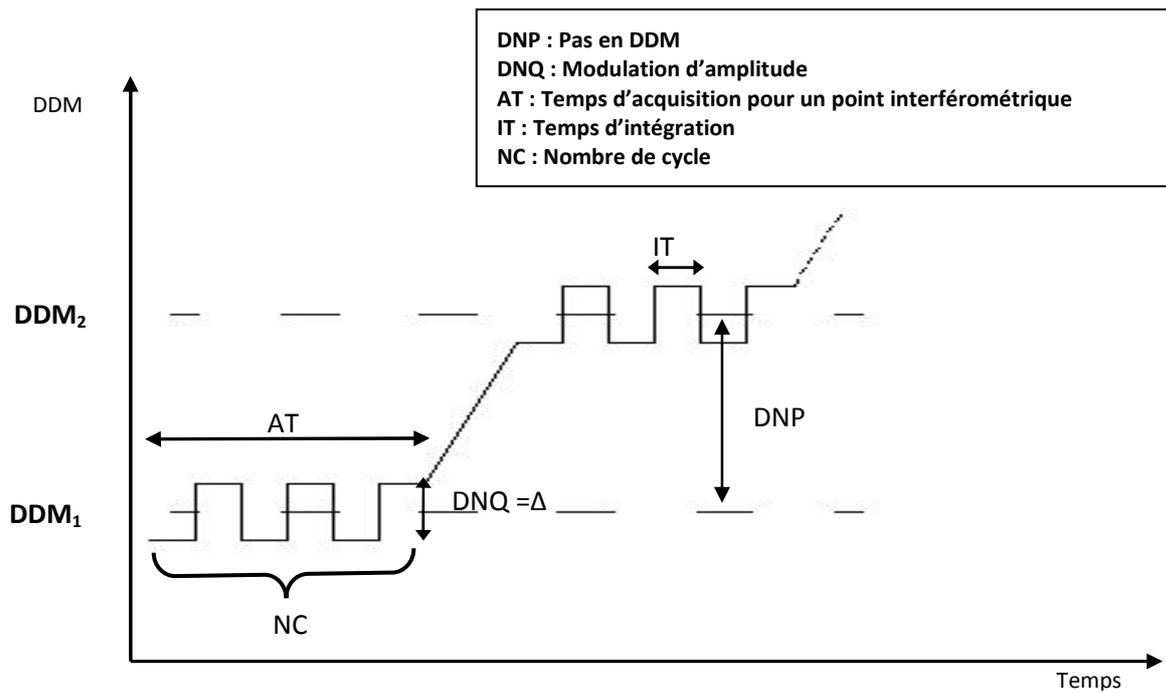
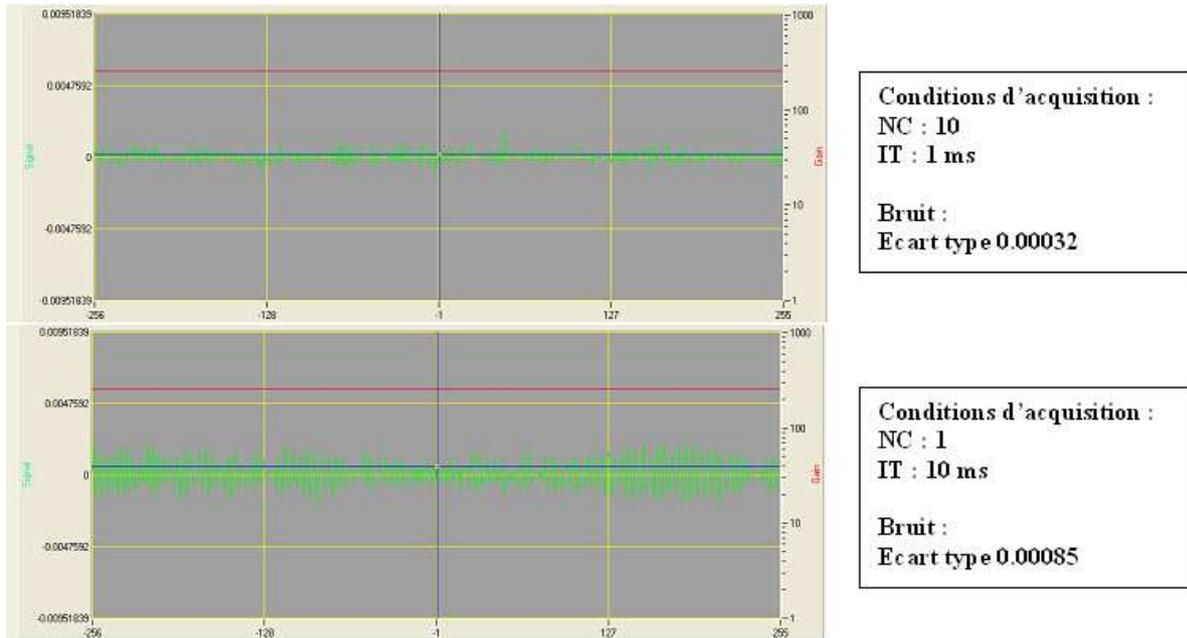


Figure 11 : Schéma de principe de l'amélioration de la modulation de différence de marche.

L'amélioration de la modulation de la différence de marche permet maintenant d'effectuer une modulation maximum de 500 Hz. Ce qui correspond à un temps d'intégration de 1 ms. Pour augmenter la fréquence de la modulation de marche, pour un même temps d'acquisition (AT) il faut augmenter le nombre de cycle (NC), ce qui revient donc à diminuer le temps d'intégration (IT). On comprend alors que l'on ne peut pas augmenter indéfiniment NC, car dans ce cas le temps d'intégration (IT) deviendrait plus faible que le temps de déplacement et de stabilisation de la position ( $T_{\text{dép}}$ ). De plus les contraintes des dispositifs actionnant le chariot mobile limitent cette fréquence de modulation. Il faut dans tous les cas veiller à garder un temps d'intégration raisonnable. De la même manière, il n'est pas possible d'augmenter indéfiniment le temps d'intégration (IT). Même si un (IT) plus long apporte un meilleur rapport Signal sur Bruit (S/B), il induit que la durée totale d'enregistrement d'un spectre augmente elle aussi. Des améliorations notamment sur le maintien du vide dans le STF permettent maintenant d'enregistrer des spectres de plus de 20 h. Cependant, plus le temps d'enregistrement est long et plus on s'expose à une variation possible des conditions d'enregistrements ou à un arrêt accidentel de l'expérience. Ce sont des points dont il faut tenir compte lors du choix des conditions d'enregistrement d'un spectre.

Comme cela a été dit plus haut, la modulation de la différence de marche permet d'éliminer la composante continue du signal, mais également elle joue un rôle très important dans l'élimination des bruits. Comme par exemple les bruits liés aux fluctuations de la source et à de possibles vibrations mécaniques de la cuve, qui sont des bruits de basses fréquences Ces bruits de fréquences très éloignées de la fréquence de modulation interne (max de 500 Hz) seront éliminés [7] par la modulation de la différence de marche. Ce qui entraîne une amélioration du rapport S/B des spectres enregistrés.



**Figure 12 : Effet de l'augmentation de la fréquence de modulation sur le rapport signal sur bruit d'un enregistrement.**

La Figure 12 a pour but de présenter les effets de la fréquence de modulation sur le rapport signal à bruit des spectres. Pour cela, pour un temps total d'enregistrement identique, deux enregistrements ont été effectués avec des fréquences de modulation différentes : NC = 10 ou 1. Ces acquisitions présentent le signal interférométrique acquis à une valeur de différence de marche grande. On se place ainsi dans le cas où l'interférométrie est presque nulle et on récupère uniquement la partie continue de flux reçu par le détecteur. On observe à l'écran le signal après modulation de l'amplitude, c'est à dire après soustraction des deux signaux. La Figure 12 permet de se rendre compte de l'effet de l'augmentation de la fréquence de la modulation interne de la différence de marche. Le panneau du haut a été enregistré avec une fréquence plus élevée que celui du bas. On voit qu'en augmentant la fréquence de modulation on élimine beaucoup plus de bruits : fluctuations de la source, vibrations de la cuve sont éliminées. Le gain, rapport entre les écarts types des signaux, est de l'ordre de 3.5. Il faut noter que ce gain est dépendant des conditions expérimentales et qu'il peut être plus élevé.

## 2 Double détection

La mise en place de la double détection [7] sur le STF du laboratoire est certainement l'une des principales améliorations du dispositif. Le principe de l'interféromètre de Michelson induit que seule la moitié du signal incident est récupéré sur le détecteur (Introduction, page 10). L'autre partie étant retournée vers la source. Il s'agit ici de tirer profit de ce signal qui est perdu en temps normal. Le but est de détecter les deux signaux simultanément pendant l'enregistrement d'un spectre. Pour cela l'interféromètre a été adapté et les deux sorties équipées de détecteurs identiques. (Figure 4).

Chaque détecteur reçoit ainsi un signal qui contient une partie continue et une partie modulée en fonction de la différence de marche. Les signaux reçus sur les détecteurs sont en opposition de phase.

Pour un temps d'intégration (IT) à  $\delta + \frac{\Delta}{2}$  on écrit pour chaque détecteur :

$$I_{dét1} \left( \delta + \frac{\Delta}{2} \right) = \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) d\sigma + \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \cos \left( 2\pi\sigma \left( \delta + \frac{\Delta}{2} \right) \right) d\sigma$$

$$I_{dét2} \left( \delta + \frac{\Delta}{2} \right) = \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) d\sigma - \frac{1}{2} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \cos \left( 2\pi\sigma \left( \delta + \frac{\Delta}{2} \right) \right) d\sigma$$

La soustraction des deux signaux donne :

$$I \left( \delta + \frac{\Delta}{2} \right) = I_{dét1} \left( \delta + \frac{\Delta}{2} \right) - I_{dét2} \left( \delta + \frac{\Delta}{2} \right) = 2 \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \cos \left( 2\pi\sigma \left( \delta + \frac{\Delta}{2} \right) \right) d\sigma$$

Et pareillement pour le temps d'intégration (IT) effectué à  $\delta - \frac{\Delta}{2}$  :

$$I \left( \delta - \frac{\Delta}{2} \right) = I_{dét1} \left( \delta - \frac{\Delta}{2} \right) - I_{dét2} \left( \delta - \frac{\Delta}{2} \right) = 2 \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \cos \left( 2\pi\sigma \left( \delta - \frac{\Delta}{2} \right) \right) d\sigma$$

Finalement la modulation d'amplitude interne entre les deux enregistrements à  $\delta + \frac{\Delta}{2}$  et  $\delta - \frac{\Delta}{2}$ , sur un nombre N de cycles donne :

$$I(\delta) = N \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} B(\sigma) \sin(2\pi\sigma\delta) \sin(\pi\sigma\Delta) d\sigma$$

On détecte ainsi le double du signal en comparaison du fonctionnement en simple détection. Ainsi on peut conclure que double détection permet d'améliorer le rapport signal sur bruit des spectres [7] au moins d'un facteur  $\sqrt{2}$ . Dans la pratique, pour pouvoir soustraire dans de bonnes conditions les signaux reçus sur chacun des détecteurs il faut que leurs signaux soient équilibrés. Cet équilibrage est effectué avant chaque enregistrement.

La double détection est utilisée pour tous les enregistrements avec le STF, pour lesquels elle permet d'augmenter le rapport signal à bruit du spectre. Cependant ce procédé montre un vrai

intérêt dans l'enregistrement de spectres long parcours avec la cellule de 50 m de base. Sans la double détection qui permet d'éliminer les bruits liés à l'adaptation, l'enregistrement de spectres avec un bon rapport (S/B) n'aurait pas été possible.

La Figure 13, présente un spectre de CO<sub>2</sub> enregistré avec une longueur de parcours de 4 m avec la double détection. La double détection a permis d'enregistrer des spectres avec des rapports S/B très élevé, ce qui permet de distinguer des raies avec des absorptions des très faibles. Dans la partie zoomée, l'absorption de la transition est de 0.09 %, qui correspond à une transition d'intensité de  $1.039 \times 10^{-25}$  cm/molec. Actuellement avec la cellule de 50 m, on peut distinguer distinctement les raies d'absorption similaires avec des intensités 100 fois inférieures. On peut ainsi mesurer des raies faibles jusqu'à des intensités de  $1 \times 10^{-27}$  cm/molec.

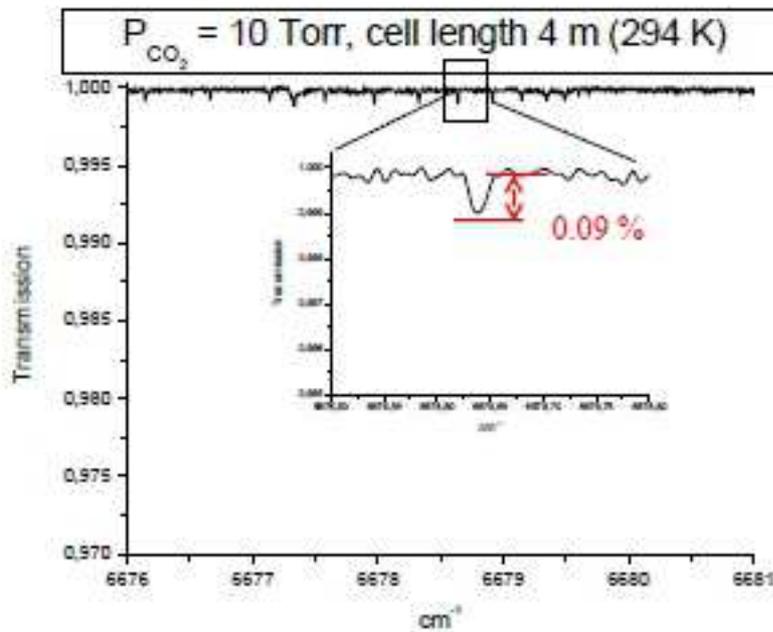


Figure 13: Exemple de spectre CO<sub>2</sub>, enregistré à une longueur de 4 m avec la double détection. Raie CO<sub>2</sub>: position : 6678.638 ; intensité :  $1.039 \times 10^{-25}$  cm/molec

### ***3 Conclusion***

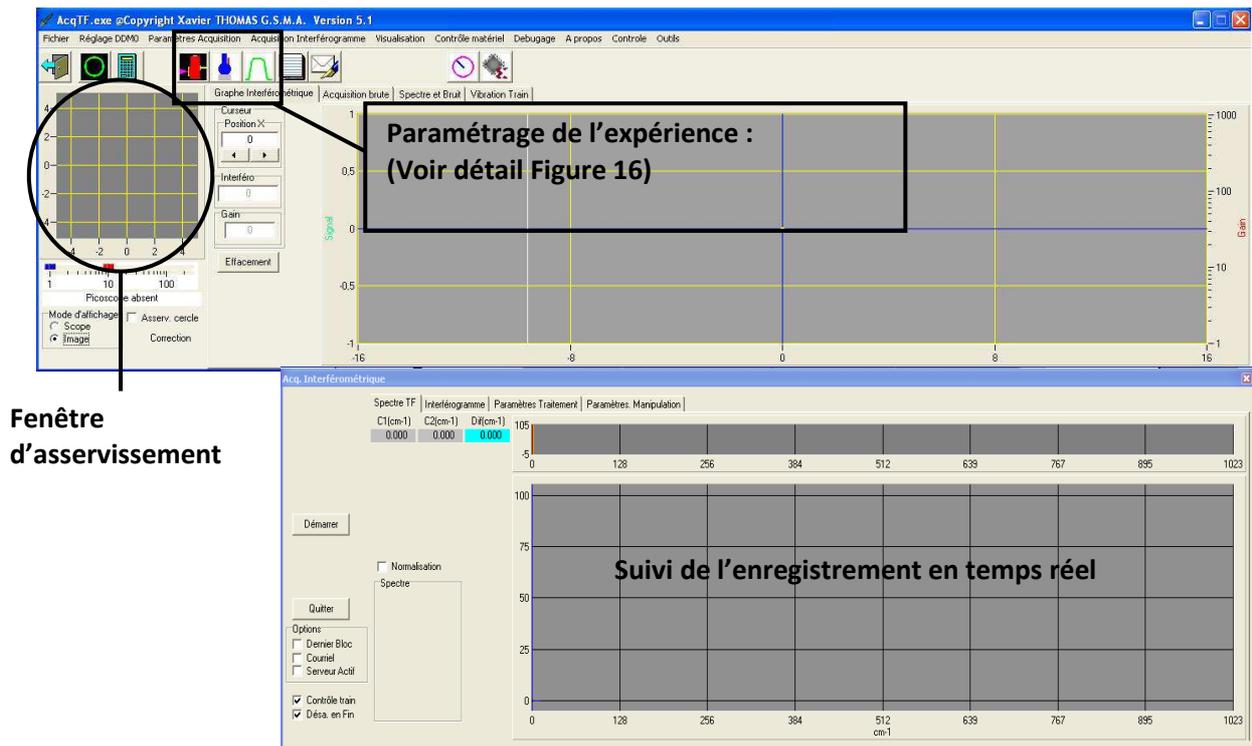
Lors de l'enregistrement d'un spectre plusieurs sources de bruit peuvent venir perturber l'analyse et la détermination des paramètres de raies. Notamment des bruits provenant des fluctuations de la source mais également des vibrations. Il faut noter que ces vibrations sont d'autant plus importantes lorsque l'on augmente la longueur de base de la cellule d'absorption. Même si cela a été pris en compte lors de la construction et de l'implantation de la cellule de 50 m, les effets de vibrations restent malgré tout très importants et sont inhérents à la longueur de la cuve. Sans les améliorations expérimentales engagées au laboratoire, les enregistrements avec la cellule de 50 m n'auraient pas été exploitables. La modulation de la différence de marche et la double détection sont des dispositifs complémentaires qui permettent d'éliminer une grande partie des bruits de basses fréquences et donc d'améliorer le rapport signal sur bruit des spectres.

## **Chapitre 3.**

# **Fonctionnement du STF et enregistrement des spectres.**

### **1 Logiciel d'acquisition**

Un logiciel d'acquisition, opérationnel depuis 2003, a été développé au laboratoire par X. Thomas, ingénieur de recherche. Il est codé en langage C++ (Builder 6). Ce logiciel permet de gérer le STF du laboratoire et de suivre l'enregistrement des spectres en temps réel (Figure 14). Il réalise également la Transformation de Fourier de l'interférogramme, suivant un algorithme de Transformation de Fourier rapide développé par J.J. Plateaux (repris de l'algorithme de H. Delouis [2]). Le logiciel d'acquisition constitue l'interface utilisateur. C'est un composant FPGA « Field Programmable Gate Array » programmé en VHDL, qui réalise l'asservissement et l'acquisition des données interférométriques [11]. A intervalle régulier, il envoie des consignes et récupère des données vers le PC via le logiciel d'acquisition.



Fenêtre d'asservissement

Figure 14 : Fenêtre d'accueil du logiciel d'acquisition

**Parmi ces fonctionnalités on peut citer :**

- Définir et déterminer les paramètres d'enregistrements pour une région spectrale. La Figure 15 présente les trois fenêtres du logiciel : n°1 : signal et source, n°2 : paramètres interférométriques et n°3 : les éléments optiques. Les fenêtres n°2 et n°3 peuvent également être utilisées pour déterminer les conditions d'enregistrement d'un spectre, notamment pour le choix des éléments optiques, source, séparatrice et filtres optiques.
- Effectuer le réglage de la différence de marche nulle.
- Asservir le système mobile à une différence de marche fixée à partir du signal laser HeNe de référence. Le logiciel d'acquisition permet d'asservir ou de désasservir le chariot mobile. Un logiciel indépendant est en charge de la correction de la différence de marche tout au long de l'enregistrement.
- De visualiser l'enregistrement en temps réel (interférogramme et spectre TF) et de le comparer à des spectres déjà enregistrés.
- D'envoyer l'interférogramme par courriel à l'utilisateur à intervalles réguliers durant tout le temps de l'enregistrement.
- De réaliser la conversion de l'interférogramme en spectre, cette partie sera développée plus particulièrement dans la suite de ce chapitre.

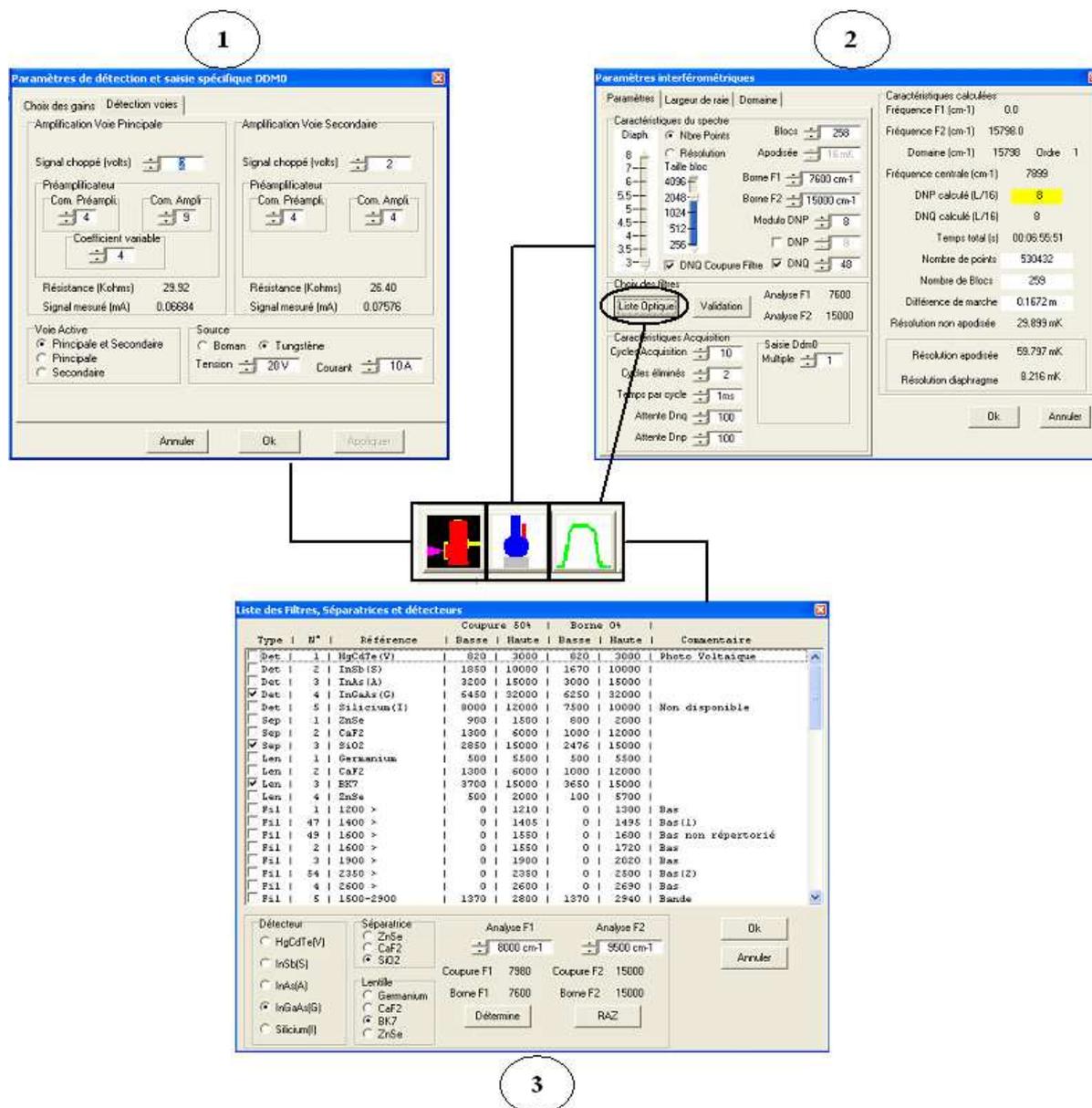


Figure 15 : Fenêtre de détermination des paramètres expérimentaux : 1) signal et source ; 2) paramètres d'enregistrement ; 3) choix des éléments optiques

## 2 Enregistrement des spectres

Bien entendu avant de pouvoir commencer la procédure d'enregistrement des spectres, l'instrument doit être configuré pour la région spectrale étudiée : séparatrice, détecteurs, filtres optiques. L'alignement des éléments optiques est également vérifié et l'ensemble du montage est mis sous vide.

### 2.a Paramètres détecteurs, interférométriques et optiques

Les trois fenêtres présentées Figure 15 doivent être renseignées avant de pouvoir enregistrer un spectre. La fenêtre n°3, sert également à déterminer les éléments optiques optimums pour l'enregistrement d'une région spectrale. Cette fenêtre peut être automatiquement remplie en indiquant les bornes de la région spectrale d'intérêt, le logiciel va lui-même déterminer les éléments optiques. La fenêtre n°1 reprend toutes les informations concernant les signaux des détecteurs et de la source. Cette fenêtre doit être remplie manuellement par l'utilisateur, après équilibrage des signaux entre les deux voies. Enfin la fenêtre n°2 concerne les paramètres interférométriques. C'est dans cette fenêtre que l'on donne toutes les informations concernant l'enregistrement d'un spectre, notamment le temps d'enregistrement, la différence de marche, la dimension du diaphragme d'entrée.

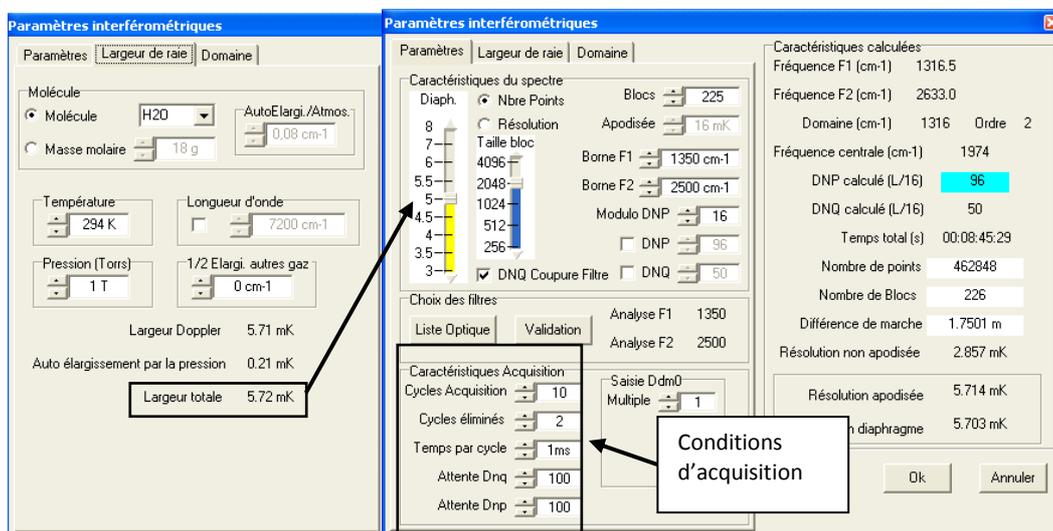


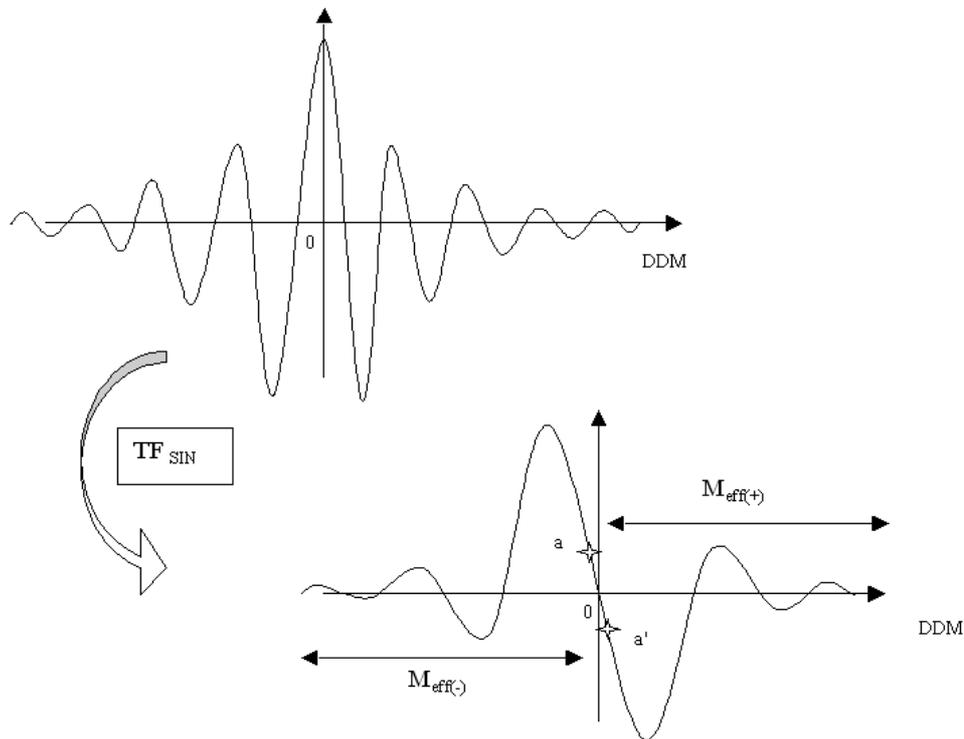
Figure 16 : Fenêtre interférométrique, détermination des paramètres interférométriques pour la région spectrale 1400 – 2300  $\text{cm}^{-1}$ .

Je présente à la Figure 16 un exemple de détermination des paramètres spectroscopiques pour la vapeur d'eau dans la région spectrale de 1400 à 2500  $\text{cm}^{-1}$ . La fenêtre de gauche permet de déterminer la largeur totale de la raie pour une molécule étudiée, une température et une pression dans la cuve. Cette information nous permet de choisir le diaphragme d'entrée de l'interféromètre. Ce diaphragme est déterminé de sorte que la résolution diaphragme soit proche de la largeur de la raie. Ce qui conduit sur la fenêtre de droite à appliquer un diaphragme de 5 mm de diamètre. En pratique, cette détermination est effectuée avant les réglages optiques du STF et sa mise sous vide. Enfin les paramètres de déplacement (DNP et DNQ), sont déterminés par le logiciel en fonction de la région spectrale.

## **2.b Différence de marche nulle**

Avant de procéder à l'enregistrement il est primordial de placer le chariot mobile à la position de la différence de marche nulle, qui sera notée par la suite  $DDM_0$ . En théorie un interférogramme est totalement symétrique autour de la  $DDM_0$ . Ceci conduit dans la pratique à enregistrer uniquement la partie de l'interférogramme qui correspond à un déplacement positif. Dans le cas du STF du laboratoire ce déplacement peut aller de 0 à 1.5 m ce qui donne une  $DDM_{\max}$  de 3 m. Il est donc primordial avant de procéder à l'enregistrement d'un spectre de se placer à la  $DDM_0$ . Un interférogramme est enregistré autour de cette valeur. En raison de la modulation interne de la différence de marche, la  $DDM_0$  est un point nul et non pas un maximum de signal. Encore faut-il trouver le bon point égal à zéro. Pour cela un outil dans le logiciel a été développé appelé « Symétrie Sinus ». Il permet d'avoir une estimation de la symétrisation de la différence de marche autour de sa valeur nulle.

$$Sym_{\text{Sinus}} = \frac{\sum |a + a'|}{a + a'}$$



**Figure 17 : Interférogramme autour de la différence de marche nulle et sa transformée de Fourier en sinus.**

Plus cette valeur est élevée et plus la position de la  $DDM_0$  est proche de sa valeur réelle. Il faut cependant apporter une correction à la valeur de la « symétrie sinus » qui est utilisée au laboratoire comme un indicateur, nous permettant de juger de la position du chariot mobile à la différence de marche nulle. Cette symétrie sinus est également dépendante de l'optique du STF et surtout des caractéristiques de la lame séparatrice.

### **2.c Enregistrement des spectres**

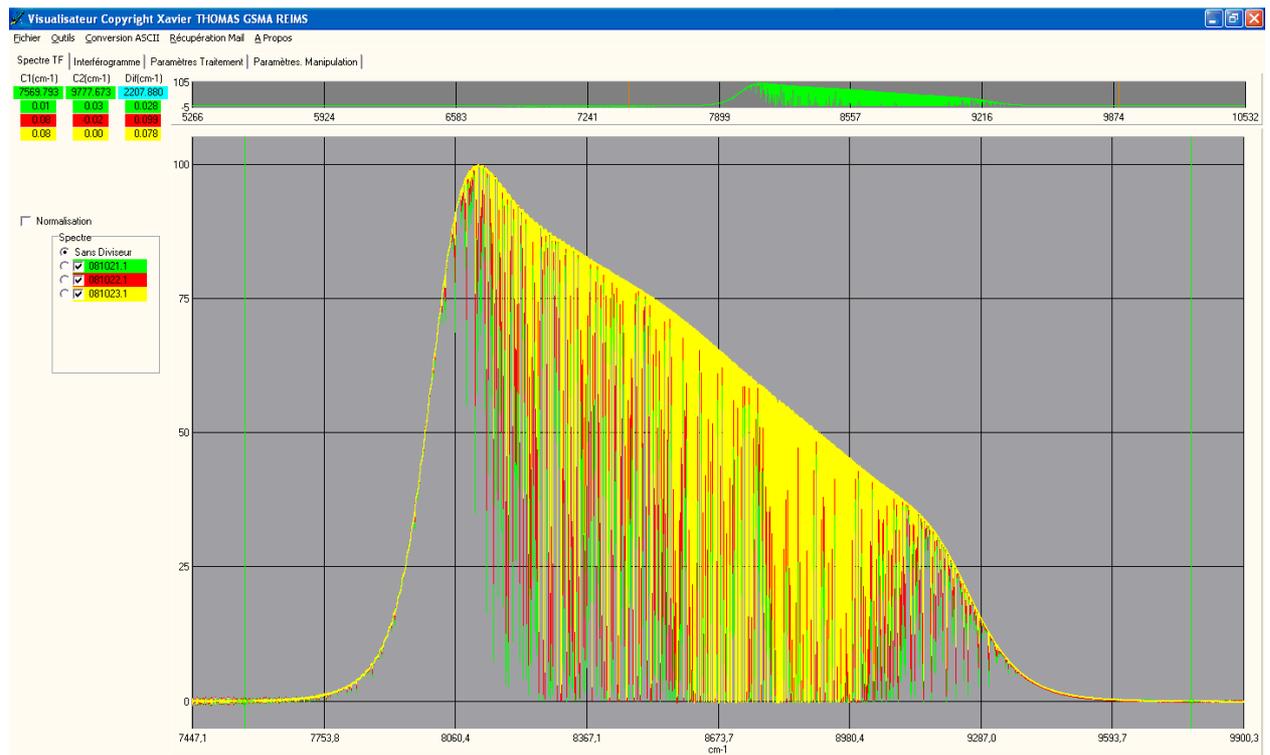
On peut après cette procédure démarrer l'enregistrement d'un spectre que l'on pourra suivre en temps réel dans la fenêtre du logiciel d'acquisition. A tout moment l'utilisateur peut suspendre ou arrêter l'enregistrement en cours. Les enregistrements sont réalisés préférentiellement la nuit, pour des raisons évidentes d'atténuation de l'activité routière et ferroviaire qui est ressentie jusqu'au laboratoire. Un sismographe mesure en permanence les vibrations du sol et stoppe momentanément l'enregistrement d'un spectre en cas de vibrations très importantes.

Durant tout le temps de l'enregistrement la température et la pression du gaz à l'intérieur de la cellule d'absorption sont suivies respectivement avec respectivement des sondes platines, placées sur la cellule d'absorption, de précision de 1 K, et un manomètre « MKS Baratron » de précision de 0.01 %.

### **3 Visualisation des spectres, préparation des fichiers pour l'ajustement**

Un logiciel de visualisation est couplé au logiciel d'acquisition et a également été développé par X. Thomas. Ce logiciel peut être utilisé seul, ce qui permet un accès rapide à ses fonctionnalités. Ce logiciel permet en premier lieu de visualiser simultanément plusieurs spectres, et leurs interférogrammes correspondants. La Figure 18 présente la fenêtre du visualisateur avec trois spectres enregistrés dans la région de 1.25  $\mu\text{m}$ , on peut zoomer sur les spectres afin d'en voir les détails. Le visualisateur possède plusieurs fonctionnalités, j'en liste ci-dessous quelques-unes :

- Préparer les fichiers de spectres pour l'ajustement, en format binaire pour le logiciel de traitement multi-spectres [12] qui sera présenté Partie II de ce manuscrit (à partir de la page 57), ou en format ascii, pour les étudier avec d'autres logiciels. Je reviendrais sur ce sujet dans la suite de ce paragraphe.
- Réaliser une division de spectre.
- Accéder à l'interférogramme d'un spectre.
- Récupérer toutes les informations concernant l'enregistrement : différence de marche, temps d'enregistrement, nombre de cycle, longueur de parcours, éléments optiques, etc.... et aussi tous les paramètres expérimentaux : pression du gaz et température dans la cuve en début et en fin d'enregistrement, molécule étudiée.



**Figure 18 : Visualisateur, fenêtre avec plusieurs spectres enregistrés dans la région à 1.25  $\mu\text{m}$ .**

#### **Préparation des fichiers pour l'ajustement des raies :**

On peut dans un premier temps regarder si des franges, dues aux éléments optiques externes à l'interféromètre apparaissent sur les spectres enregistrés au laboratoire. Si ces franges sont d'une amplitude importante elles peuvent gêner les ajustements des raies. Cependant ces franges peuvent être éliminées en divisant un spectre expérimental avec son spectre cuve vide associé. Un exemple de division de spectre est présenté Figure 19. Il faut noter que la division de spectre permet également d'éliminer la forme du filtre optique utilisé pour l'enregistrement. Cependant la division de spectre n'est possible que si les franges du spectre cuve vide et du spectre d'absorption sont en phase. C'est en principe le cas lorsque les spectres d'une série sont enregistrés les uns à la suite des autres dans un temps court. Cependant si les franges sont déphasées, la division de spectre peut amplifier les défauts.

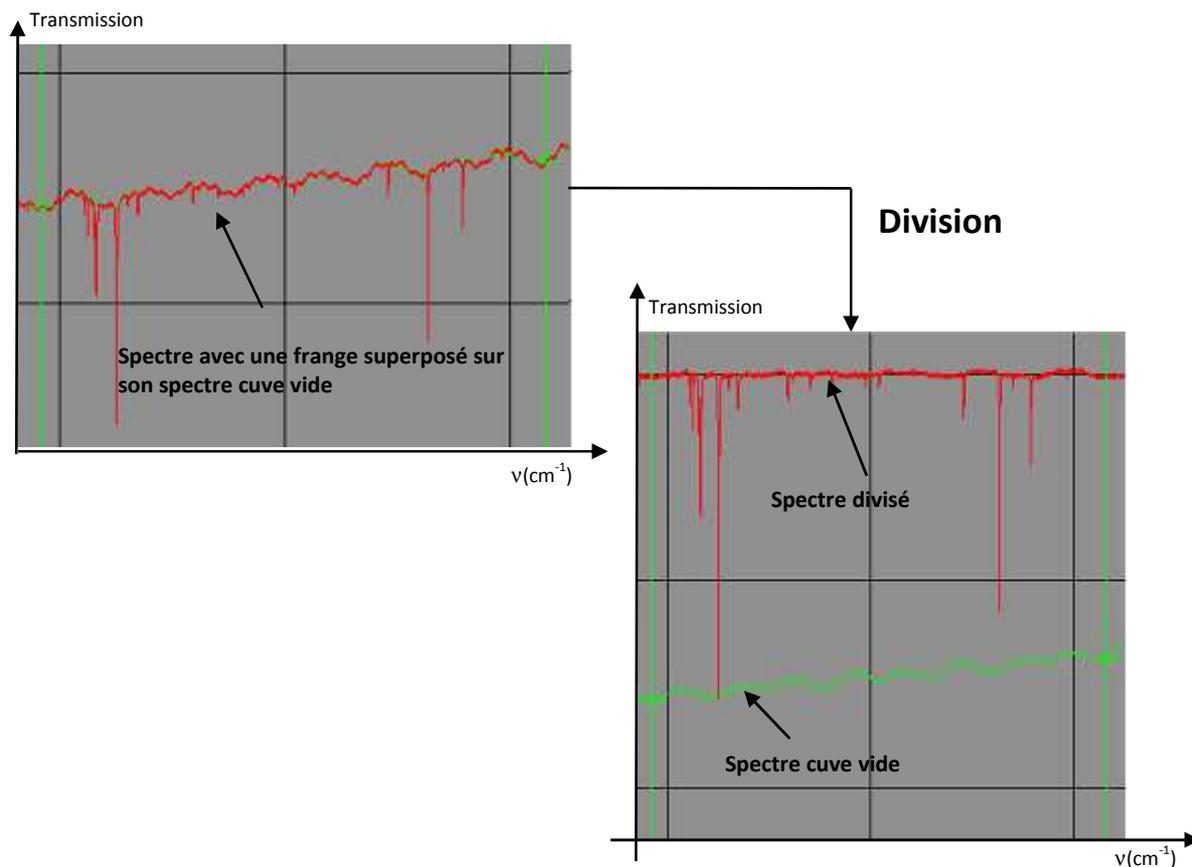


Figure 19 : Exemple d'une division d'un spectre par un spectre cuve vide. Spectre 2d, Table 17 (page 116) et spectre cuve vide associé.

Pour le traitement avec le logiciel de traitement multi-spectres « MultiFiT », trois fichiers sont associés à un unique spectre. Je liste ci dessous ces fichiers, qui constituent les fichiers d'entrée pour « MultiFiT ». Ils sont nommés par le n° de spectre et une extension cv, pr ou dt :

- n°sp.cv : contient tous les éléments concernant la cuve : longueur de parcours, température, molécule, pression totale ou pression partielle par isotopologue.
- n°sp.pr : fichier qui contient tous les paramètres d'enregistrements : diamètre du diaphragme, différence de marche, région spectrale. Ces paramètres sont utilisés pour calculer la fonction d'appareil.
- n°sp.dt : fichier qui contient les points du spectre.



## ***Partie II.***

***Spectres d'absorptions :***

***généralités et traitement –***

***Application à la molécule d'eau***



## Chapitre 1.

# Rappels sur la loi d'absorption et les paramètres de raie.

### 1 Loi d'absorption

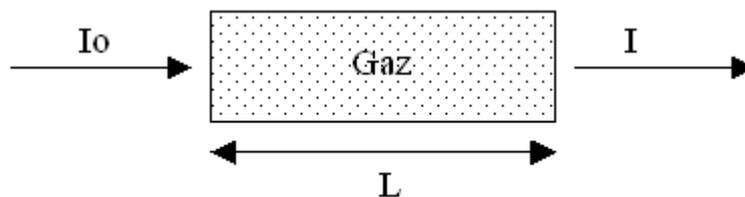


Figure 20 : Loi de Beer-Lambert

On considère une couche de gaz homogène, d'épaisseur élémentaire  $dl$ , traversée par un rayonnement monochromatique de nombre d'onde  $\sigma$  et d'intensité  $I$  (Figure 20). La loi de Lambert permet d'exprimer l'absorption  $dI$  due au gaz :

$$dI = -K(\sigma)I(\sigma)dl$$

Où  $K(\sigma)$  est le coefficient d'absorption. On définit le coefficient d'absorption intégré  $k = \int_{-\infty}^{+\infty} K(\sigma - \sigma_0)d(\sigma - \sigma_0)$  d'une raie isolée centrée en  $\sigma_0$ .

Selon l'hypothèse de Beer, l'absorption d'une molécule de gaz est indépendante des autres. Ainsi le coefficient d'absorption peut s'exprimer en fonction de la pression, de  $\rho$  la masse volumique ou du nombre  $N$  de molécules absorbantes par unité de volume, tel que :

$$k_{\sigma}^P \times P = k_{\sigma}^{\rho} \times \rho = k_{\sigma}^N \times N$$

Ces paramètres sont appelés intensité de raies ou force de raies. Dans la suite de ce paragraphe on traitera  $k_{\sigma}^N$ , l'intensité de raie pour une molécule par unité de volume ( $cm^{-1}/(molec\ cm^{-2})$ )

Le nombre  $N$  de molécules à une pression  $P$  et à une température  $T$  est donné par la loi de Mariotte :

$$N(T, P) = L_0 \left(\frac{T}{T_0}\right) \left(\frac{P_0}{P}\right)$$

Avec :  $L_0 = 2.687 \times 10^{19} \text{ mol/cm}^3$  le nombre de Loschmidt,  $T_0$  et  $P_0$  respectivement la température et pression standard ( $T_0 = 273.15 \text{ K}$ ,  $P_0 = 1013.25 \text{ hPa}$ ).

En intégrant la loi de Beer-Lambert sur l'épaisseur totale  $L$  de la couche de gaz absorbant, on obtient l'expression de l'intensité transmise  $I$  :

$$I = I_0 \exp(-k_\sigma^N N(T, P)L)$$

### **1.a Absorption due à une raie**

Ainsi l'absorption déterminée par la loi de Beer-Lambert est due à une raie centrée en  $\sigma_0$ . En réalité l'absorption d'une raie ne peut pas être parfaitement assimilée à un pic de Dirac car il existe différentes causes d'élargissement (collisions, agitation moléculaire, ...) qui seront discutées dans la suite de ce manuscrit. Ces effets engendrent un élargissement de la raie autour du nombre d'onde  $\sigma_0$ . Afin de tenir compte de ces effets le coefficient d'absorption  $K(\sigma - \sigma_0, T, P)$  donné par  $k_\sigma^N \times N$  est multiplié par un profil normalisé  $f(\sigma - \sigma_0, T, P)$  :

$$K(\sigma - \sigma_0, T, P) = k_\sigma^N N f(\sigma - \sigma_0, T, P)$$

Où  $k_\sigma^N$  est l'intensité intégrée d'une raie à la température  $T$ , donnée par :

$$k_\sigma^N = \int_{\sigma - \Delta\sigma}^{\sigma + \Delta\sigma} K(\sigma - \sigma_0, T, P) d\sigma$$

Et  $f$ , le profil normalisé de la raie, centré sur la fréquence  $\sigma_0$ , qui décrit la forme réelle de la raie :

$$\int_{\sigma - \Delta\sigma}^{\sigma + \Delta\sigma} f(\sigma - \sigma_0, T, P) d\sigma = 1$$

## **2 Etude de l'intensité intégrée d'une raie ou force de raie**

On cherche dans cette partie à déterminer la valeur de l'intensité intégrée  $k_{\sigma}^N$  pour une température  $T$ . On se place dans un système à deux niveaux d'énergie tels que  $E_2 > E_1$ , avec  $N_1$  et  $N_2$  le nombre de molécules dans les états d'énergie 1 et 2. Sous l'effet d'un photon incident, la molécule transite entre ces deux niveaux d'énergie selon la condition de Bohr :

$$E_2 - E_1 = hc\sigma_i$$

Avec :

- $h$  : la constante de Planck
- $c$  : la célérité de la lumière dans le vide
- $\sigma_i$  : le nombre d'onde de la transition en  $\text{cm}^{-1}$ .

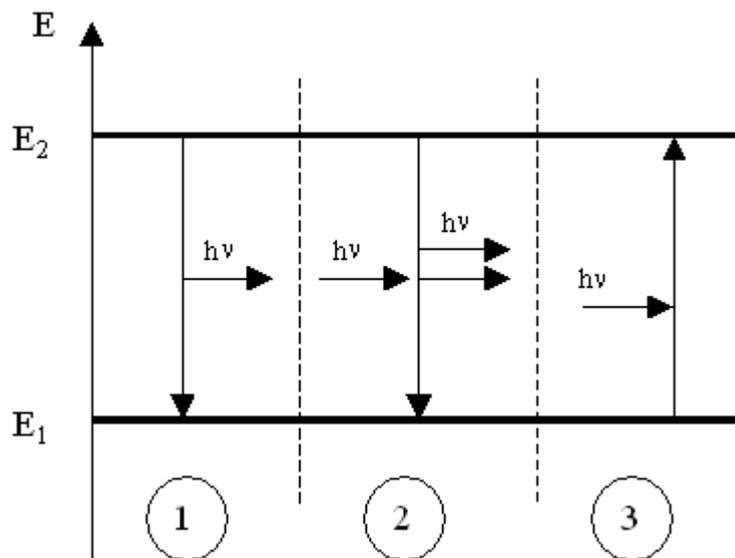


Figure 21 : Système à deux niveaux d'énergie soumis à un flux incident

3 phénomènes peuvent intervenir (Figure 21) :

- 1) une émission spontanée
- 2) une émission induite
- 3) une absorption

## 2.a Coefficients d'Einstein

Pour chacun de ces phénomènes (Figure 21) on définit un coefficient d'Einstein qui permettent d'écrire la probabilité de transition par unité de temps de la molécule d'un niveau d'énergie  $N_i$  à un niveau d'énergie  $N_j$ . Pour l'absorption et l'émission induite, on considère que la variation de population est proportionnelle au flux incident. Le coefficient d'Einstein correspondant  $B$ , s'écrira selon l'échange considéré  $B_{12}$  ou  $B_{21}$ . Enfin l'émission spontanée sera représentée par le coefficient  $A_{21}$ .

Si on se place dans le cas d'un régime où la population d'un niveau d'énergie  $N_i$  est constante, on peut écrire pour ce niveau que le nombre d'absorptions spontanées (perte de population) et le nombre d'émissions vers ce niveau (induites ou spontanées, gain de population) sont identiques. Ceci conduit à l'égalité :

$$N_1 B_{12} = N_2 (A_{21} + B_{21})$$

Avec :  $N_1$  et  $N_2$  les populations respectives des niveaux d'énergie  $E_1$  et  $E_2$ . On donne également les deux relations bien connues reliant les coefficients d'élargissement :

$$g_1 B_{12} = g_2 B_{21}$$

$$A_{21} = 8\pi h c \sigma^3 B_{12}$$

Avec :  $g_1$  et  $g_2$  les poids statistiques des niveaux d'énergie  $E_1$  et  $E_2$ .

Le coefficient d'absorption  $K(\sigma - \sigma_o, T, P)$  peut être exprimé en fonction des coefficients d'Einstein sous la forme [13] :

$$K(\sigma - \sigma_o, T, P) = -(N_1 B_{12} - N_2 B_{21}) \frac{h\sigma}{c} f(\sigma - \sigma_o, T, P)$$

Et donc :

$$k_\sigma^N(T) = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} K(\sigma - \sigma_o, T, P) d\sigma = \frac{1}{N} (N_1 B_{12} - N_2 B_{21}) \frac{h\sigma}{c}$$

La littérature donne la relation entre le coefficient  $A_{21}$  et le carré du moment de transition  $|R_{12}|^2$  dans le cadre d'une transition dipolaire électrique [14] :

$$g_2 A_{21} = \frac{16\pi^3}{3h^2 \epsilon_0} \nu^3 |R_{12}|^2$$

On en déduit l'expression pour les coefficients  $B_{12}$  et  $B_{21}$  :

$$g_1 B_{12} = g_2 B_{21} = \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3h^2} |R_{12}|^2$$

L'intensité intégrée  $k_\sigma^N(T)$  devient :

$$k_\sigma^N(T) = \frac{1}{N} \left[ \frac{N_1}{g_1} - \frac{N_2}{g_2} \right] \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \frac{8\pi^3}{3h^2} |R_{12}|^2$$

## 2.b Loi de Maxwell Boltzmann et fonction de partition

La loi de répartition de population des niveaux est donnée par la loi de Maxwell Boltzmann qui s'écrit pour un niveau d'énergie  $E_i$ , sous la forme :

$$N_i = \frac{N}{Q(T)} g_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$$

Avec :

- $Q(T)$  la fonction de partition
- $g_i$  la dégénérescence du niveau d'énergie  $E_i$ .
- $k$  la constante de Boltzmann

La fonction de partition peut être trouvée dans la littérature, les valeurs des fonctions de partitions pour chaque molécule sont également tabulées dans les bases de données. Dans l'approximation du rotateur rigide, elle peut s'exprimer comme étant directement proportionnelle à la température tel que :

$$Q(T) \propto T^n \text{ avec } n = 1 \text{ pour les molécules linéaires et } n = \frac{3}{2} \text{ dans les autres cas.}$$

## 3 Expression de l'intensité intégrée à la température T

En considérant la loi de Maxwell-Boltzmann qui permet d'écrire  $N_1$  et  $N_2$  l'intensité intégrée  $k_\sigma^N(T)$  à la température  $T$  peut s'écrire dans le cadre général de deux niveaux d'énergies tel que  $E_f \leftarrow E_i$  :

$$k_\sigma^N(T) = \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma_i}{kT}\right)\right) \frac{1}{Q(T)} a_{iso} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) \mathcal{R}_i$$

Avec :

- $a_{iso}$  : l'abondance isotopique du gaz considéré
- $\epsilon_0$  : permittivité du vide
- $\mathcal{R}_i$  : moment de transition tel que  $\mathcal{R}_i = g_i |R_i|^2$

La relation permettant de calculer l'intensité  $k_\sigma^N(T)$  d'une raie à partir de l'intensité  $k_\sigma^N(T_o)$  donnée à la température de référence  $T_o$  de 296 K est :

$$k_\sigma^N(T) = k_\sigma^N(T_o) \left(\frac{Q(T_o)}{Q(T)}\right) \exp\left(-\frac{hcE_i}{k} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_o}\right)\right)$$



## **Chapitre 2.**

### **Elargissements et Profils de raies**

L'élargissement naturel des raies résulte de la probabilité d'émission spontanée (Figure 21 ; page 47) entre le niveau haut d'énergie  $E_f$  vers le niveau bas  $E_i$  tel que  $E_f \leftarrow E_i$ . Cette probabilité limite la durée de vie radiative de la molécule sur le niveau  $E_f$  d'énergie, selon le principe d'incertitude d'Heisenberg. Ce phénomène d'élargissement naturel est négligeable dans le domaine infrarouge et c'est pour cela que nous n'en tiendrons pas compte par la suite. Les deux effets physiques intervenant principalement dans l'élargissement des raies d'absorption sont l'effet Doppler et les collisions entre les molécules. Les profils de raie résultant de ces deux phénomènes sont bien connus et seront exposés dans la suite de ce chapitre.

# 1 Elargissement par effet Doppler

Dans le cas d'un gaz à basse pression, la contribution majeure à l'élargissement de la raie centrée en  $\sigma_i$  résulte de la distribution des vitesses des molécules. Le profil Doppler rend compte de la distribution des vitesses des molécules d'un gaz autour d'une transition centrée en  $\sigma_i$ . Selon la direction de la vitesse de la molécule par rapport à celle du rayonnement incident, la position  $\sigma_i$  de la transition est modifiée telle que (Figure 22) :

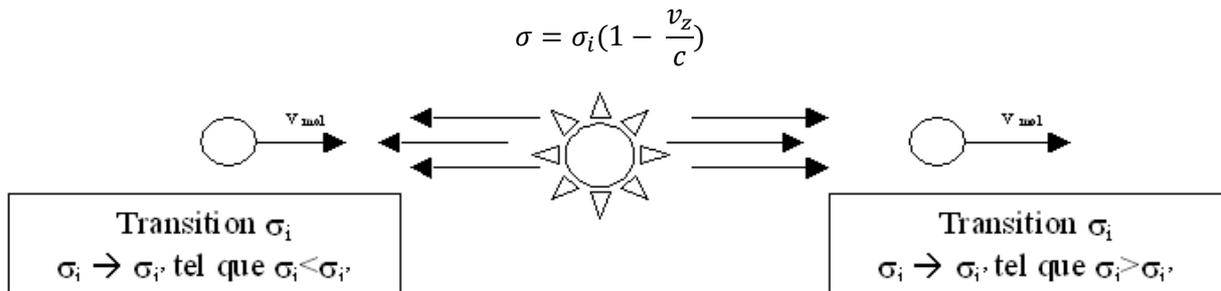


Figure 22 : Elargissement Doppler. Déplacement de la position de la transition  $\sigma_i$ .

Le profil d'élargissement Doppler normalisé s'écrit sous la forme bien connue :

$$f_D(\sigma - \sigma_i) = \frac{1}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln(2)}{\pi}} \exp\left(-\ln(2) \left(\frac{\sigma - \sigma_i}{\gamma_D}\right)^2\right)$$

Où  $\gamma_D$  est la demi-largeur à mi-hauteur en  $\text{cm}^{-1}$ .

$$\frac{\gamma_D}{\sigma_i} = \sqrt{\left(2 \ln(2) \frac{kT}{mc^2}\right)} \approx 3.58 \cdot 10^{-7} \sqrt{\frac{T}{M}}$$

Avec :

- $k$  la constante de Boltzmann
- $c$  célérité de la lumière
- $m$  la masse de la molécule
- $M$  : la masse molaire de la molécule

## **2 Elargissement par effet de collision des molécules :** **Profil Lorentzien**

De nombreux phénomènes qui ne seront pas développés dans ce manuscrit rentrent en compte dans l'élargissement des raies par la pression. Néanmoins le phénomène de collisions entre les molécules devient de plus en plus important lorsque la pression augmente. Dans ce cas, les collisions entre les molécules actives vis à vis du rayonnement et les molécules perturbatrices entraînent un élargissement du profil des raies. Le profil résultant peut être modélisé par une distribution de Lorentz :

$$f_L(\sigma - \sigma_i) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{(\sigma - \sigma_i)^2 + \gamma_L^2}$$

La demi-largeur à mi-hauteur  $\gamma_L$  dans le cas d'un gaz pur, peut être écrite comme :

$$\gamma_L = \gamma_0^{self} P$$

Avec  $\gamma_0^{self}$  le coefficient d'auto-élargissement du gaz considéré donné en  $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ . Dans ce cas de figure, l'espèce active et l'espèce perturbatrice sont identiques. Dans le cas d'un mélange de plusieurs gaz l'équation devient :

$$\gamma_L = \left( \gamma_0^{self} a_{iso}^0 + \sum_{i=1}^n \gamma_0^i a_{iso}^i \right) P_{Tot}$$

Où :

- $\gamma_0^i$  est le coefficient d'élargissement du gaz absorbant en  $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$  par l'espèce i
- $a_{iso}^i$  l'abondance de l'espèce i
- $P_{Tot}$  est la pression totale de l'échantillon étudié.

La dépendance en température du coefficient d'auto-élargissement est donnée par la formule empirique :

$$\gamma_0^{self}(T_{Réf}) = \gamma_0^{self}(T_{Exp}) \left( \frac{T_{Exp}}{T_{Réf}} \right)^n$$

Avec :

- $n$  l'indice de dépendance en température, que l'on peut prendre égal par défaut à 0.68 pour la vapeur d'eau. Les valeurs de l'exposant  $n$  sont listées dans la base HITRAN2008 [15] (on pourra également se référer à la table n°7, HITRAN2004 [16]).
- $T_{Exp}$  la température de l'expérience
- $T_{Réf}$  la température de référence égale à 296 K dans les bases de données.

### 3 Profil de Voigt

Dans des conditions proches des conditions standards de température et de pression, l'élargissement des raies est majoritairement dû aux effets des collisions (profil de Lorentz) et à l'effet Doppler. Le profil de Voigt reprend ces deux contributions et résulte de la convolution des profils Doppler et Lorentz.

$$f_V(\sigma) = f_D(\sigma) \otimes f_L(\sigma) = \frac{y}{\gamma_D \pi} \sqrt{\frac{\ln(2)}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2)}{y^2 + (x-t)^2} dt$$

Avec :

$$x = \frac{\sigma - \sigma_i}{\gamma_D} \sqrt{\ln(2)}, y = \frac{\gamma_L}{\gamma_D} \sqrt{\ln(2)}$$

Pour des valeurs de pressions hautes, on remarque que  $y \gg 1$ , le profil de Voigt tend vers le profil de Lorentz. Dans le cas où les pressions sont faibles,  $y \ll 1$ , on retrouve le profil Doppler. Afin de calculer numériquement l'expression, plusieurs approximations existent. Une alternative consiste à l'écrire sous la forme :

$$f_V = K_0 \Re(W(x, y))$$

C'est à dire comme étant la partie réelle  $\Re$  de la fonction erreur complexe définie par  $W(x, y)$  :

$$W(x, y) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2)}{iy + (x-t)} dt$$

$W(x, y)$  peut se calculer numériquement, on trouvera dans la littérature plusieurs formes. En particulier l'approximation de Whiting [17] modifiée par Olivero et Longbothum [18] et celle de J. Humlicek [19] sont particulièrement adaptées aux profils de raies. Ces deux approximations sont implémentées dans le logiciel « MultiFit » développé au laboratoire et qui sera décrit dans la suite de ce manuscrit.

## **4 Autres profils de raies**

Le profil de Voigt, tient compte des effets de vitesse des molécules et des collisions entre elles. Dans ce profil, ces deux phénomènes sont considérés de manière indépendante et on néglige, dans ce cas, les effets conjoints de la distribution de la vitesse des molécules et de leurs interactions. L'effet de changement de vitesse induit par collisions des molécules est appelé effet Dicke [20]. Il entraîne que le libre parcours moyen des molécules diminue lorsque la pression augmente. Ceci conduit à un rétrécissement du profil Doppler. Deux profils permettent de décrire les changements de vitesse dus aux collisions suivant les modèles de collisions :

- Modèle de collisions dures : lorsque des molécules légères sont perturbées par des molécules lourdes, chaque collision va modifier de façon importante et indépendante des collisions précédentes la distribution des vitesses de la molécule active. Le modèle de L. Rautian [21] est adapté dans ce cas.
- Modèle de collisions molles : au contraire lorsque des molécules lourdes sont perturbées par les molécules plus légères, un grand nombre de collisions est nécessaire pour modifier la distribution des vitesses de la molécule active. Dans ce cas le modèle de S.G. Galatry [22] est recommandé.

Il existe également de nombreuses formes de profils de raies plus complexes qui prennent en compte des effets de dépendance en vitesses, « speed-dependant Voigt » [23][24][25], ou des effets de « line mixing » [26]. Ces profils sont notamment utilisés dans le cadre d'étude de spectres satellitaires ou ils ont permis d'obtenir de meilleurs résidus d'ajustement. Pour l'instrument ACE, par exemple, c'est un profil tenant compte de la dépendance en vitesse qui a été choisie pour les traitement des transitions de la vapeur d'eau [27]. Ces différents profils permettent de sortir du cadre général du profil de Voigt. Ils sont adaptées au situation de pression très élevées mais permettent également de mieux traiter les effets d'élargissement dus à un gaz.

## **5 Profil enregistré**

Lors de l'enregistrement d'un spectre, de nombreux effets instrumentaux peuvent intervenir et modifier le profil naturel de la raie. Ces effets sont pris en compte par la fonction d'appareil  $f_{app}$  de l'instrument (définie I.4. page 12). Le profil de raie observé peut être obtenu par convolution de la fonction d'appareil et du profil physique de la raie d'absorption (Voigt, Rautian, Galatry, etc....), qui tient compte des effets du milieu. Pour les études menées au laboratoire nous nous sommes placés dans des conditions expérimentales où les effets du milieu sont correctement modélisés par un profil de Voigt. C'est donc ce profil qui a été utilisé dans l'ensemble des traitements des spectres enregistrés au laboratoire pour ce doctorat.

En simulant au mieux le profil observé de la raie d'absorption, on pourra déterminer avec une grande précision les paramètres spectroscopiques tels que la position, l'intensité et le coefficient d'élargissement grâce à des logiciels d'ajustement adaptés.

## **Chapitre 3.**

# **Traitement des spectres – Logiciel d’ajustement.**

Pour déduire les paramètres spectroscopiques des raies d’absorption nous utilisons la méthode des moindres carrés non linéaires appliquée entre une raie observée et une raie calculée. Cette méthode permet d’accéder au jeu de paramètres spectroscopiques ou de raie (position, intensité, coefficients d’élargissements, shift en position...) les plus vraisemblables. Il est possible d’appliquer cette procédure à chaque spectre individuellement ou à plusieurs spectres simultanément. Dans un premier temps sera développée la méthode statistique d’ajustement par moindres carrés non linéaires, qui ensuite, sera adaptée à l’analyse des spectres en considérant un seul spectre ou plusieurs spectres traités simultanément. La deuxième partie de ce chapitre présente le logiciel « MultiFIT ».

# **1 Méthode des moindres carrés non linéaires,** **application à l'estimation des paramètres de raies.**

## **1.a Méthode des moindres carrés non-linéaires :**

Les méthodes de moindres carrés linéaires ou non linéaires consistent à comparer des données expérimentales à un modèle théorique. Ces méthodes reviennent à minimiser la grandeur :

$$S(\alpha_1, \dots, \alpha_j) = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i; \alpha_j))^2$$

Avec :

- $y_i$ : données expérimentales de  $i = 1, \dots, N$
- $f(x_i; \alpha_j)$  : modèle théorique
- $\alpha_j$  : paramètres que l'on souhaite estimer avec  $j = 1, \dots, k$

On définit les résidus  $r_i$  par :

$$r_i = y_i - f(x_i; \alpha_j)$$

La solution de la méthode des moindres carrés permet d'obtenir une estimation des paramètres  $\alpha_j$ . Pour résoudre le système, on doit respecter  $j < N$ , le nombre de paramètres à déterminer ne doit pas être supérieur au nombre de données expérimentales. La meilleure estimation est donnée lorsque la somme des carrés est minimale. Ce qui revient à déterminer les paramètres  $\alpha_j$  tel que les dérivées partielles premières  $\frac{\partial S}{\partial \alpha_j}$  soient nulles.

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_j} = 2 \sum r_i \frac{\partial r_i}{\partial \alpha_j} = 0 \text{ avec } j = 1, \dots, k$$

Ces dérivées partielles peuvent être solutionnées numériquement dans le cas où le modèle  $f(x_i; \alpha_j)$  est linéaire. Mais on s'intéresse ici au cas où  $f(x_i; \alpha_j)$  est non linéaire. Dans ce cas  $f(x_i; \alpha_j)$  dépend à la fois des paramètres  $\alpha_j$  et des variables  $x_i$  du modèle théorique. On ne peut alors plus résoudre numériquement les dérivées partielles premières. La solution consiste à avoir recours à une méthode numérique par itérations successives. Les paramètres  $\alpha_j$  s'écrivent :

$$\alpha_j^{n+1} = \alpha_j^n + \Delta \alpha$$

Cette relation fournit des approximations successives des paramètres  $\alpha_j$  de plus en plus proches de leurs vraies valeurs. La méthode des moindres carrés non-linéaires est donc une méthode itérative qui nécessite des valeurs de départ pour les  $\alpha_j$  et également des critères d’arrêt. La convergence est l’un des problèmes des méthodes des moindres carrés non-linéaires, il n’est pas rare de voir augmenter la somme des résidus à chaque itération. Pour éviter ce genre de dérives, on impose des variations maximales  $\Delta\alpha$ , qui permettent de contenir l’information autour d’une valeur vraisemblable.

Enfin une méthode classique pour décider de la convergence du calcul itératif et arrêter les itérations est de considérer :

$$\left| \frac{S^{n-1} - S^n}{S^{n-1}} \right| = \left| \frac{S^n - S^{n+1}}{S^n} \right|$$

Ce qui revient donc à considérer que la somme des résidus au carré n’évolue plus d’une itération à l’autre. On a atteint dans ce cas le minimum de  $S(\alpha_j) = \sum r_i^2$ .

### **1.b Application à l’ajustement des spectres**

La méthode des moindres carrés non-linéaires peut s’appliquer à l’ajustement d’un spectre ou de plusieurs spectres simultanément. Si on applique cette méthode à l’ajustement des paramètres de raies ou instrumentaux sur un spectre on peut écrire que :

- $\alpha_j$  sont les paramètres de raies (position, intensité, coefficient d’élargissement par la pression, etc....) ou les paramètres instrumentaux (largeur de la fonction d’appareil, pression partielles, ...). Les valeurs de départ de ces paramètres seront trouvées pour les paramètres de raies dans les fichiers des bases de données. Et pour les paramètres expérimentaux dans les fichiers associés au spectre.
- $y_i$  : les données expérimentales proviennent de la discrétisation en  $N$  points d’une raie expérimentale.
- $f(x_i ; \alpha_j)$  représente le modèle théorique. Ce modèle est déterminé par la convolution de la fonction d’appareil théorique et du profil physique des raies (qui tient compte des effets du milieu).

On considère maintenant que l’on travaille avec un nombre  $M$  de spectres simultanément. Une sommation supplémentaire sur le nombre de spectres est alors introduite dans l’expression classique. Dans ce cas  $S(\alpha_j)$  devient :

$$S(\alpha_j) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N ((y_i - f(x_i ; \alpha_j))^2$$

### ***1.c Valeurs des paramètres d'initialisation de la méthode des moindres carrés non linéaires***

Les paragraphes précédents ont permis de montrer que la méthode des moindres carrés est une méthode itérative qui nécessite des valeurs de départ pour les paramètres ajustés (ou valeurs d'initialisation). Ces valeurs de départ sont généralement trouvées dans les bases de données spectroscopiques. Cependant pour que le calcul converge, il faut que ces valeurs de départ ne soient pas trop éloignées de leurs valeurs vraies. Ceci est d'autant plus important lorsque l'on augmente le nombre de spectres en traitement simultané. La méthode du maximum de vraisemblance, par le calcul des dérivées secondes de  $S(\alpha_j)$  permet d'avoir un estimateur de l'effet du nombre  $M$  de spectre. En effet  $S(\alpha_j)$  est une fonction positive ou nulle dont la dérivée première s'annule pour  $\alpha_j = \alpha_{j0}$ . Autour de cette valeur  $S(\alpha_j)$  est minimum. Le calcul de la dérivée seconde, permet de déterminer une hypersurface et d'exprimer le minimum par un puits :

$$\frac{\partial^2 S(\alpha_j)}{\partial^2 \alpha_j} = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{Nj} \frac{\partial^2}{\partial \alpha_j \partial \alpha_j'} (r_i)^2 \approx 2 \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{Nj} \frac{\partial^2 (y_i)^2}{\partial \alpha_j \partial \alpha_j'}$$

Cette quantité est positive ou nulle et il en résulte que plus on traite un nombre  $M$  grand de spectres simultanément, plus le puits se ressert. Ce qui a une influence sur les valeurs de départ, dans le cas d'un ajustement multi-spectres ces données doivent être plus proches de leurs valeurs vraies que dans le cas d'un ajustement simple spectre. Une étude des valeurs des paramètres de départ dans les cas d'ajustement simple spectre ou multi-spectres peut être trouvée dans la thèse de D. Jacquemart [40].

## ***2 Description du logiciel « MultiFiT »***

Le logiciel « MultiFiT » a été développé au laboratoire GSMA par J. J. Plateaux et L. Régalia [12]. Il s’inspire du logiciel développé par D. Benner et al. [41] et fonctionne suivant la méthode des moindres carrés non linéaires décrite au paragraphe précédent. Cet outil offre la possibilité de choisir entre un ajustement simple spectre ou multi-spectres. Le développement de cet outil a été motivé pour permettre un traitement plus rapide des spectres enregistrés au laboratoire mais également de minimiser l’intervention de l’expérimentateur dans la procédure d’ajustement des paramètres spectroscopiques recherchés.

### ***2.a Fonctionnement et caractéristiques***

Le principe de fonctionnement du logiciel « MultiFiT » est largement décrit dans J.J. Plateaux et al. (2001) [12]. L’organigramme général du logiciel est présenté Figure 24, la description des fichiers d’entrée pourra être trouvée dans [12].

Le logiciel « MultiFiT » permet en premier lieu d’ajuster les paramètres de raies en fonctionnement simple spectre ou multi-spectres et d’en visualiser l’ajustement en temps réel. La Figure 23 présente la fenêtre d’ajustement du logiciel en fonctionnement multi-spectres. De nombreux paramètres sont ajustables avec cet outil, on distingue les paramètres spectroscopiques, ou paramètres de raie, et les paramètres expérimentaux.

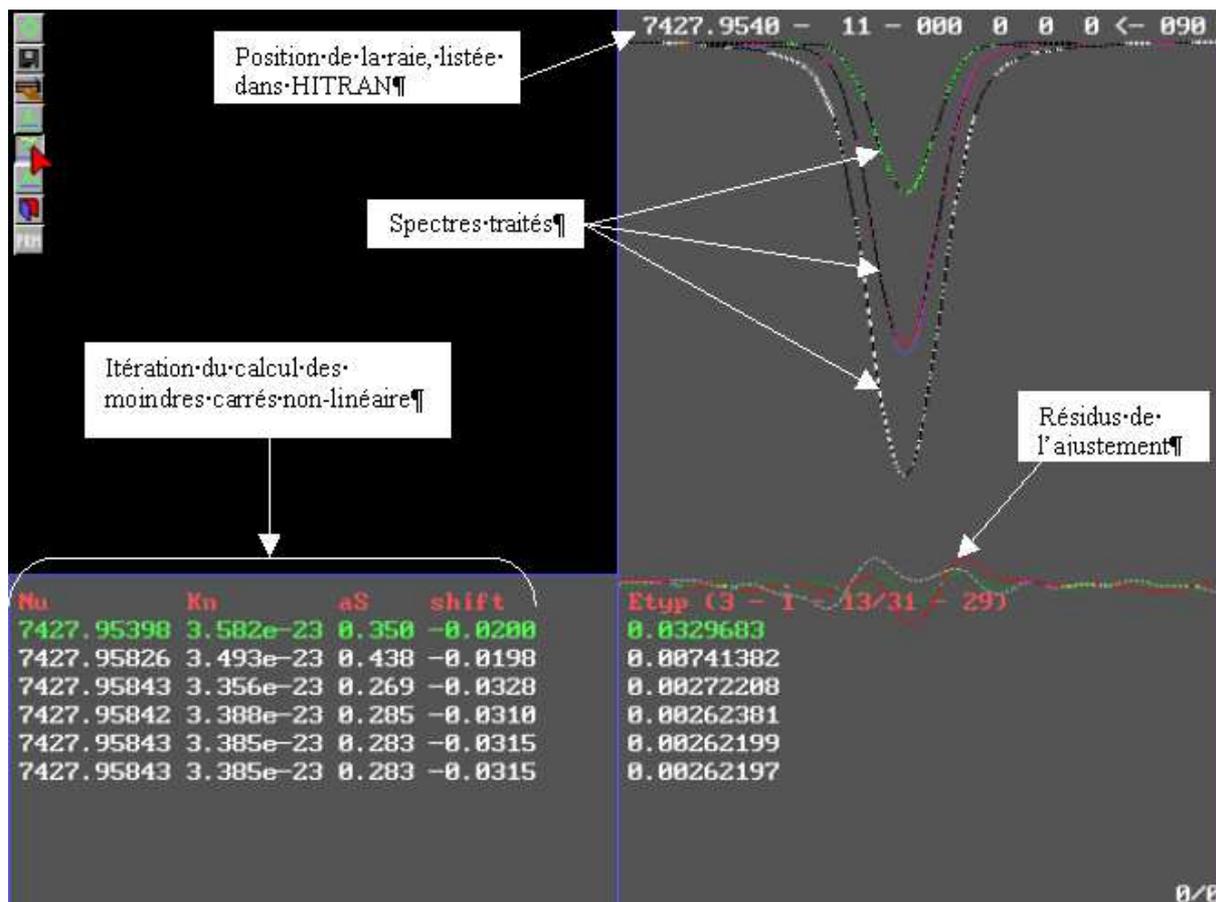


Figure 23 : Fenêtre d’ajustement sous « MultiFit ». Exemple de l’ajustement d’une raie d’H<sub>2</sub><sup>16</sup>O listée dans HITRAN2008 à 7427.954 cm<sup>-1</sup>, d’intensité 3.5 10<sup>-23</sup> cm/molec. L’ajustement est réalisé sur des spectres de longueurs de parcours de 36 m (voir Table 24, page 145). Résidus de l’ajustement multipliés par 10.

**Paramètres ajustables :**

- Paramètres spectroscopiques (correspondant à une transition) :
  - Position
  - Intensité
  - Coefficient d’auto-élargissement et d’élargissement par l’air
  - Déplacement par la pression (Shift)
- Paramètres expérimentaux (correspondant à un spectre) :
  - Pression partielle
  - Diamètre du diaphragme d’entrée
  - Polynôme de 100 % de transmission
  - 0 % de transmission
  - largeur de la fonction d’appareil
  - dNu : décalage global du spectre du à l’appareil

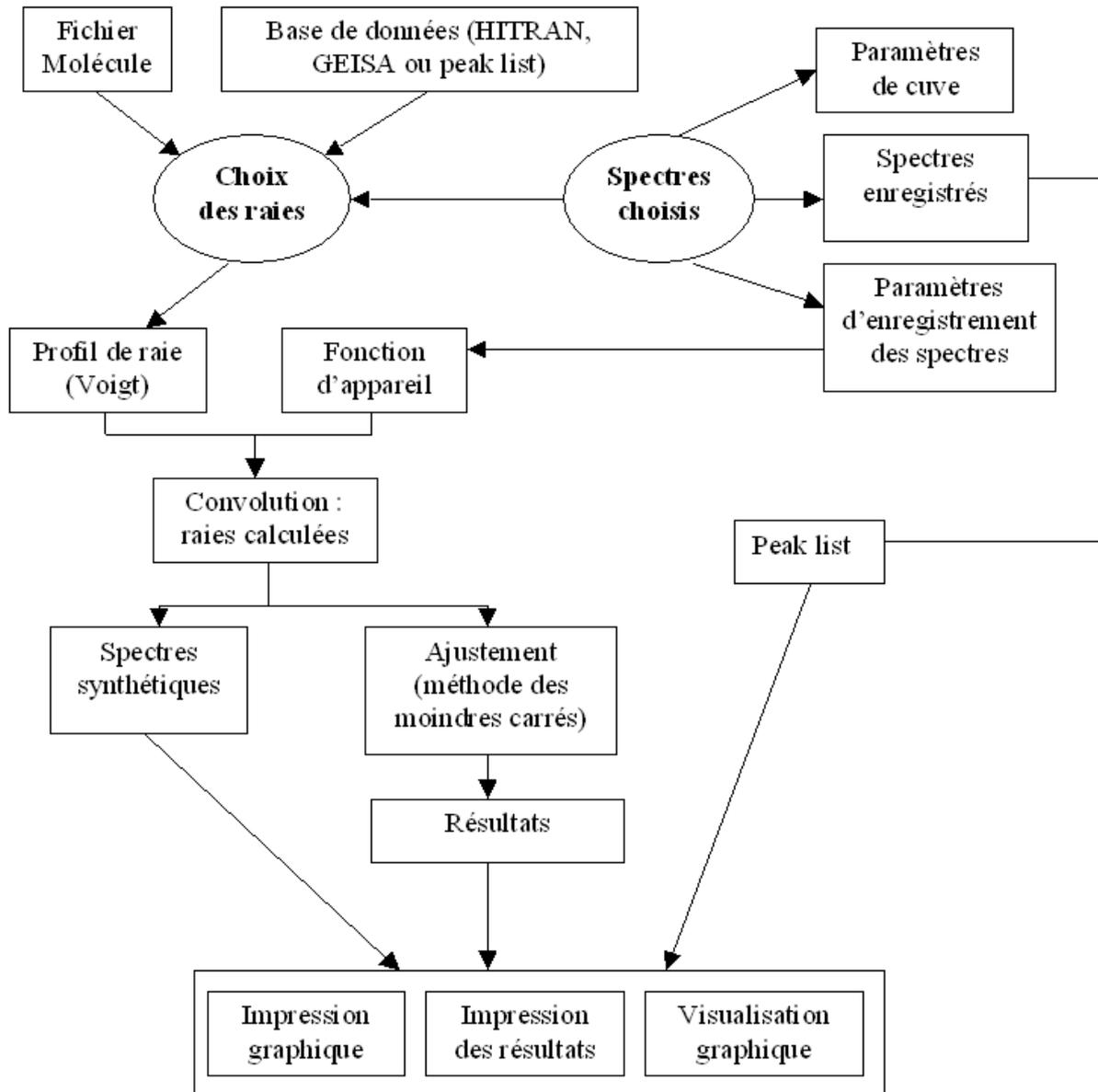


Figure 24 : Organigramme du logiciel MFT

Le logiciel développé au laboratoire est polyvalent et dispose d’outils très utiles pour l’analyse des spectres. Je liste ci dessous quelques-unes de ces fonctionnalités :

- Visualiser un ou plusieurs spectres de manière simultanée
- Calculer un spectre synthétique et le visualiser
- Créer un fichier regroupant la position et une estimation de l’intensité, nommé communément « peak list » pouvant servir de base de données. Le peak list est très utile dans le cas où les bases de données usuelles, HITRAN ou GEISA, sont peu précises, où lorsque des raies y sont absentes. Le peak list a été un outil très utile pour les travaux engagés durant ce doctorat, son fonctionnement est développé au paragraphe suivant.

Fonctionnement du peak list :

- Mesure de la position de la transition et facteur de sensibilité. Le logiciel repère les maximums d’absorption sur le spectre (ou une partie d’un spectre, Figure 25). Le spectre est considéré comme une suite de points équidistants  $y_i$  d’absorption  $i$ . L’estimation du centre de la transition est obtenue en comparant :

- o  $SB = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{nb-2} (y_{i+1} - y_i)^2}{nb}}$  qui est interprétée comme une estimation du bruit. Ce calcul correspond à la racine carrée de la dispersion moyenne d’un nombre  $nb$  de points d’absorption  $y_i$

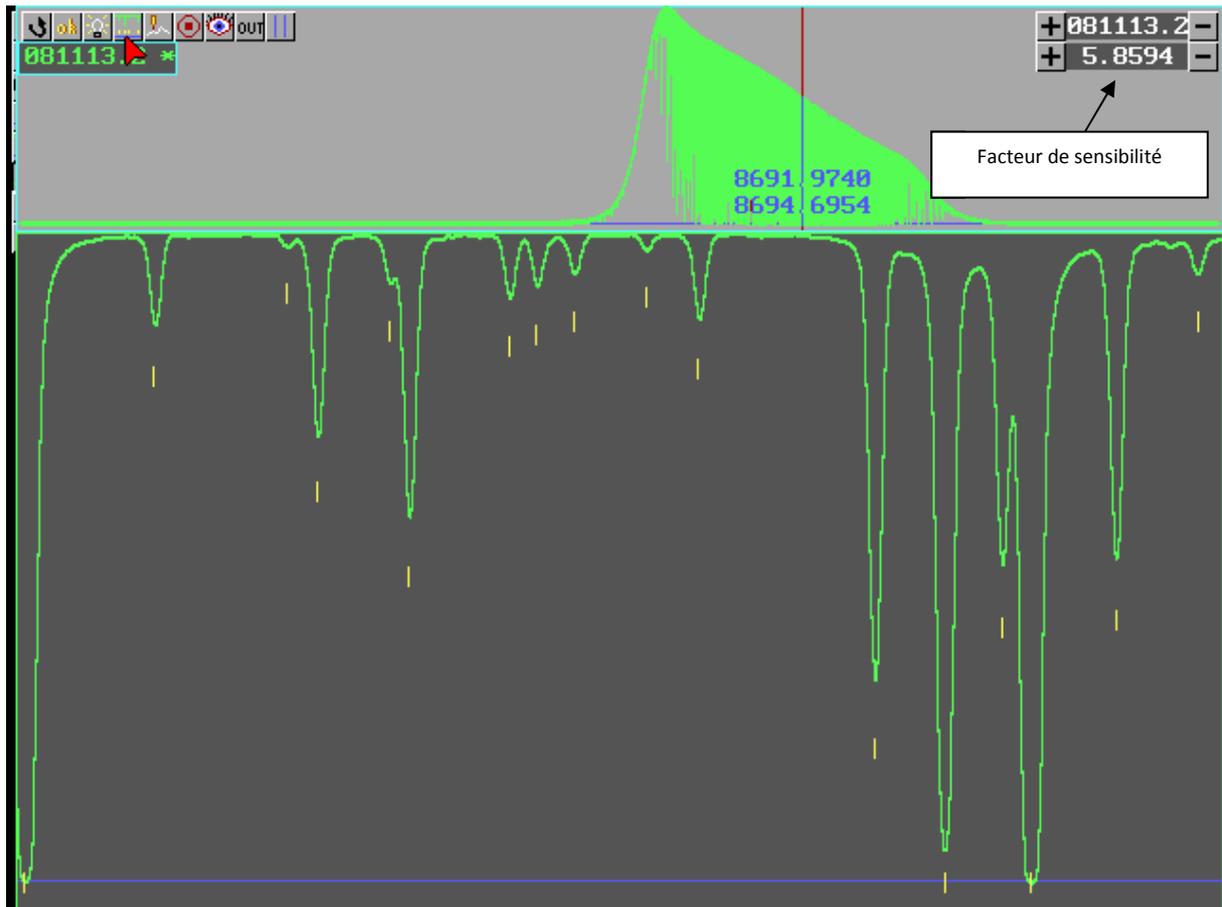
- o  $SL_{abs} = \sum_{y_i > y_{i+1}} (y_i - y_{i+1}) + \sum_{y_i < y_{i+1}} (y_{i+1} - y_i)$  qui correspond à la différence absolue autour du point  $y_i$

Le facteur de sensibilité  $S_k$  permet de choisir qu’elle sera l’absorption minimum retenue dans le peak list suivant la relation :

$$SL_{abs} > S_k \times SB$$

On peut changer directement la valeur de  $S_k$  dans le logiciel en fonctionnement, afin d’atteindre les raies que l’on souhaite analyser. Si la valeur de  $S_k$  est petite alors les raies d’absorption les plus faibles seront listées dans le peak list.

- Estimation de l’intensité. L’intensité des raies est estimée en fonction de la longueur du parcours, de la pression du spectre et de la molécule étudiée.



**Figure 25 : Réalisation d’un “peak list” sous « MultiFit ». Chaque raie prise en compte dans le peak list apparaît avec un marqueur jaune.**

Depuis son développement le logiciel « MultiFit » a été utilisé dans de nombreuses études spectroscopiques menées au laboratoire [42][43][44]. Les travaux menés dans le cadre de cette thèse ont été réalisés avec ce logiciel, en privilégiant la fonctionnalité d’analyse multi-spectres, lorsque celle-ci était possible.

## **2.b Intérêt de l'ajustement multi-spectres**

Bien souvent la détermination des paramètres spectroscopiques nécessite plusieurs spectres enregistrés dans des conditions expérimentales différentes. Particulièrement lorsque l'on cherche à déterminer des paramètres corrélés, comme l'intensité et le coefficient d'élargissement. Avec un ensemble de spectres enregistrés dans des conditions différentes adéquates, l'ajustement multi-spectres permet de décorréliser ces paramètres. Dans le cas d'un ajustement simple spectre, c'est à l'utilisateur de faire ce travail manuellement. La Figure 26, compare de manière synthétique l'ajustement simple spectre et l'ajustement multi-spectres. Dans le premier cas, l'utilisateur est obligé de fixer une des deux paramètres corrélés et de libérer sur un spectre l'ajustement du paramètre le plus approprié suivant les conditions d'enregistrement. En revanche, dans le cas d'un ajustement multi-spectres, les conditions expérimentales des spectres ont été préalablement choisies pour que l'on dispose de spectres basse pression pouvant apporter des informations sur l'intensité et des spectres de plus forte pression qui contiennent en plus l'information sur les élargissements.

L'ajustement multi-spectres apporte ainsi plusieurs avantages :

- Obtention de paramètres corrélés en un seul ajustement
- Gain de temps dans l'analyse des spectres
- Intervention moindre de l'utilisateur
- Amélioration de la statistique de mesure
- Détection de défauts non systématique sur les spectres, qui seront visibles sur les résidus.

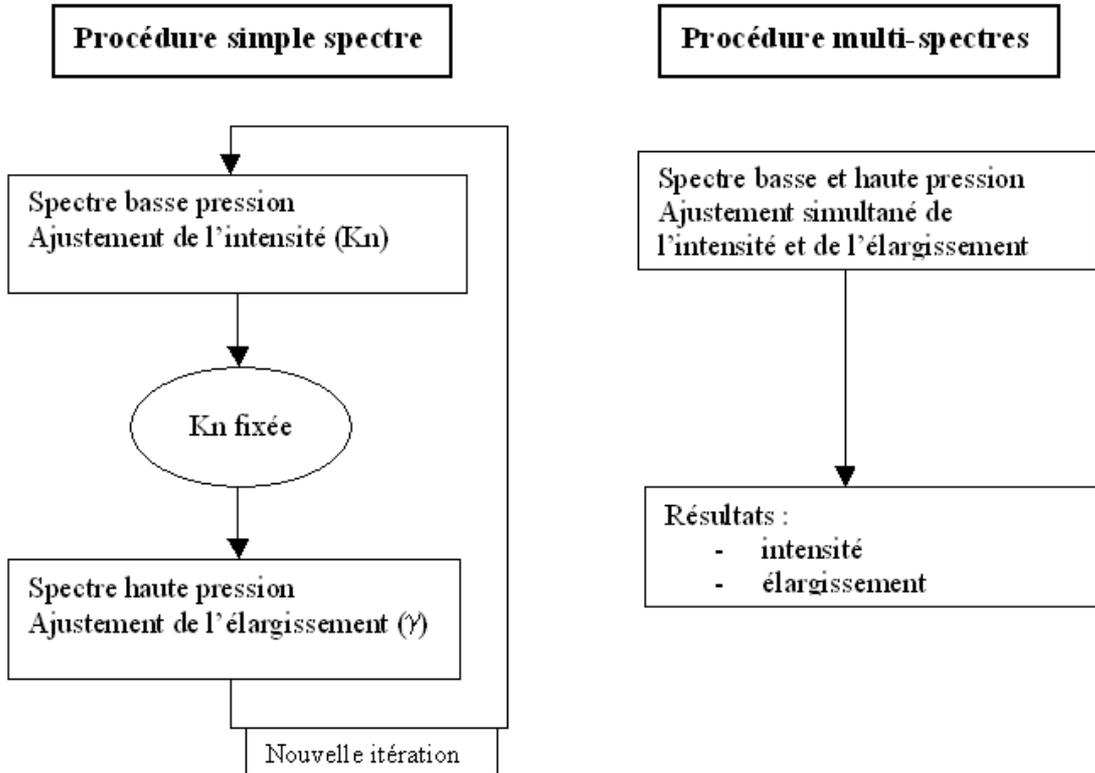


Figure 26 : Comparaison synthétique de l'ajustement simple spectre et multi-spectres. Exemple pour les paramètres intensité et coefficient d'élargissement.

## 2.c Restitution des paramètres spectroscopiques

Afin de faciliter les comparaisons entre les données calculées et les données de la littérature, le logiciel permet de récupérer les paramètres spectroscopiques dans les unités directement comparables à HITRAN. Ainsi les paramètres spectroscopiques sont donnés à la température de référence de 296 K, à partir des équations de conversion en température données précédemment et dans les unités suivantes :

- Position en  $\text{cm}^{-1}$
- Intensité en  $(\text{cm}^{-1}/(\text{molec cm}^{-2}))$  et corrigées du rapport isotopique naturel
- Coefficient d'élargissement en  $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$

Avant la première itération de l'ajustement, les paramètres ajustés ou non sont convertis en température pour chaque spectre. Pour les intensités en particulier, la conversion nécessite de connaître la valeur de l'énergie du niveau bas de la transition, ce qui impose que celle-ci soit attribuée. Dans le cas d'étude où toutes les transitions sont identifiées cela ne pose aucun problème. En revanche si toutes ne sont pas identifiées, il faut procéder en deux étapes : réaliser un premier

ajustement approximatif à la température du spectre et un second après identification, permettant d’obtenir l’intensité à la température de référence. Le procédure d’attribution des transitions sera abordée dans le chapitre 4.

### ***3 Procédures d’ajustement de paramètres expérimentaux***

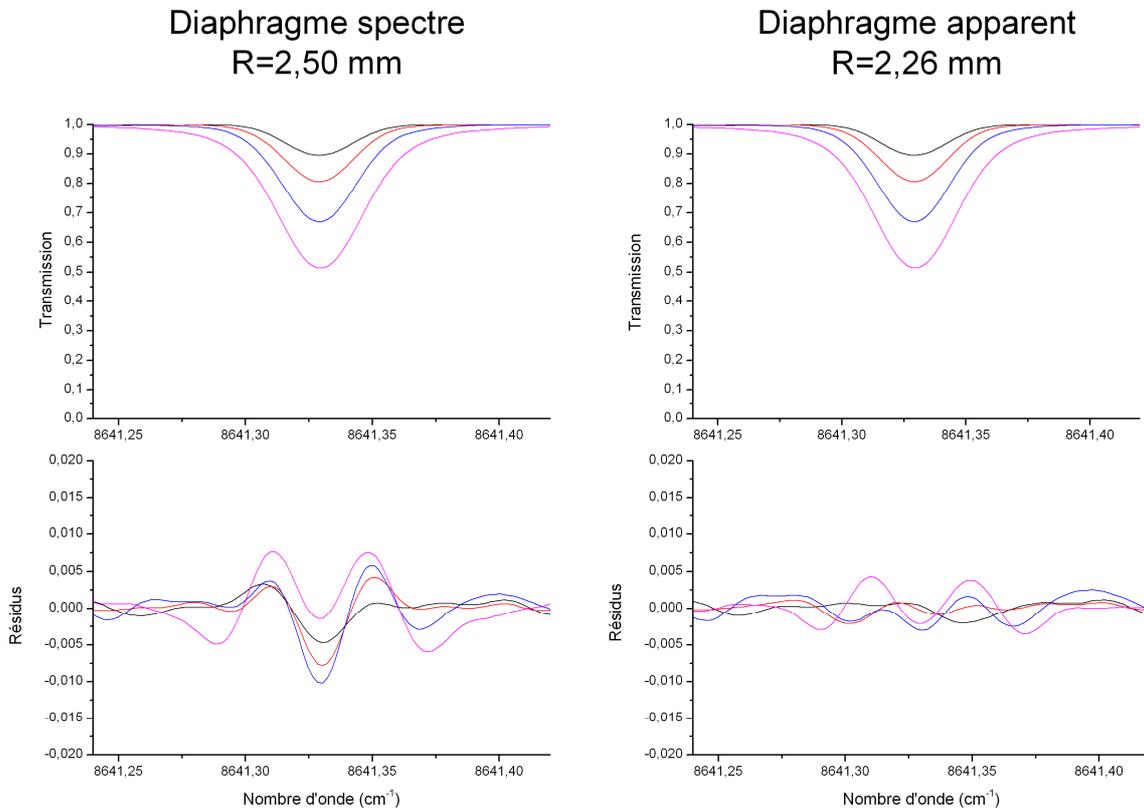
Les études spectroscopiques engagées durant ce doctorat ont conduit à regarder en détail l’ajustement des paramètres expérimentaux du diaphragme d’entrée et des pressions partielles. Ces ajustements ne sont pas réalisés de manière systématique sur tous les spectres enregistrés au laboratoire mais dans le cadre de conditions bien particulières. Ces conditions sont développées dans ce paragraphe ainsi que l’influence de ces paramètres sur la détermination des paramètres spectroscopiques des raies d’absorption.

#### ***3.a Diaphragme d’entrée***

Une mauvaise estimation de la fonction d’appareil entraîne une erreur sur la détermination des paramètres spectroscopiques des raies d’absorption. Le diaphragme, placé à l’entrée de l’interféromètre, est l’un des paramètres important qui intervient dans la définition de la fonction d’appareil théorique (Partie I, page 12). L’influence de la fonction d’appareil est plus marquée sur les spectres de basse pression, dans ce cas la largeur de la fonction d’appareil se rapproche de la largeur Doppler des raies. Il est donc nécessaire d’avoir une bonne précision sur la mesure du diamètre du diaphragme d’entrée, pour calculer avec précision la fonction d’appareil théorique. Pour cela on ne peut pas se contenter d’utiliser le diamètre du diaphragme (information contenue dans les fichiers spectres), il faut définir un diaphragme apparent. En particulier le calcul du diaphragme apparent est réalisé pour des spectres enregistrés avec des diaphragmes assez grands, où l’on peut penser que la totalité du diaphragme n’est pas éclairé correctement [44][46]. Le logiciel « MultiFIT » permet d’ajuster la valeur du diaphragme sur un spectre.

L’ajustement du diaphragme apparent doit être réalisé sur un spectre de basse pression. Car dans ce cas l’influence de la fonction d’appareil est plus marquée. Pour les spectres enregistrés à des pressions supérieures, c’est l’élargissement par la pression qui devient prépondérant et « masque » les effets de la fonction d’appareil. Le diaphragme apparent est ajusté sur des raies isolées et bien définies. La valeur du diaphragme obtenu est appliquée à la série de spectres enregistrés à la même longueur de parcours d’absorption avec des pressions différentes, à condition que ces spectres aient été enregistrés à la suite les uns des autres sans nouveaux réglages optiques.

La définition du diaphragme apparent et son application dans le calcul de la fonction d’appareil théorique a permis de réduire notablement les résidus de l’ajustement multi-spectres, mais également d’obtenir une meilleure estimation des paramètres spectroscopiques (position, intensité et coefficient d’élargissement).



**Figure 27 : Ajustement multi-spectres réalisé avec deux valeurs différentes du diaphragme d’entrée : diaphragme spectre et diaphragme apparent. Détail des ajustements : Table 1**

La Figure 27 présente la comparaison d’un ajustement multi-spectres mené avec deux valeurs différentes du diaphragme d’entrée introduit dans le calcul de la fonction d’appareil. Le « diaphragme spectre », celui effectivement placé à l’entrée de l’interféromètre, et le « diaphragme apparent », obtenu après ajustement. La Table 1 liste l’ensemble des détails des ajustements multi-spectres présentés Figure 27.

| <b>Transition analysée</b>                                       | Listées dans HITRAN2008 [15]<br>$\text{H}_2^{16}\text{O}$ attribution : 111 625 ← 000 726<br>- Position : 8641.3413 $\text{cm}^{-1}$<br>- Intensité : $4.385 \times 10^{-23}$ cm/molec<br>- coefficient d’auto-élargissement : 0.384 $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ |                         |                                       |
|--|--|-------------------------|---------------------------------------|
| <b>Spectres présentés</b>  | Longueur d’absorption : 12 m<br>Série de spectre n°6, Table 24 (page 145)  |                         |                                       |
| <b>Paramètres ajustés (pour chaque valeur de diaphragme)</b>     | Position, intensité et coefficient d’auto-élargissement  |                         |                                       |
| Détails de l’ajustement  | Diaphragme spectre   | Diaphragme apparent     | Différence entre les deux ajustements |
|  | Rayon 2.50 mm  | Rayon 2.26 mm           |                                       |
| Position ( $\text{cm}^{-1}$ )                                    | 8641.3411  | 8641.3389               | $2.5 \times 10^{-5}$ %                |
| Intensité (cm/molec)   | $5.208 \times 10^{-23}$  | $5.189 \times 10^{-23}$ | 0.4%                                  |
| Coefficient d’auto-élargissement ( $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ ) | 0.3191   | 0.3632                  | 14%                                   |
| Ecart type de l’ajustement                                       | 0.00266  | 0.00131                 | 50%                                   |

**Table 1 : Détails expérimentaux des ajustements multi-spectres menés avec deux valeurs différentes de diaphragme d’entrée : diaphragme spectre et diaphragme apparent**

La Figure 27 permet de montrer que lorsque l’on applique pour une série de spectre, le diaphragme apparent (mesuré sur le spectre de plus basse pression), les résidus de l’ajustement sont grandement améliorés. Dans l’exemple présenté ici ils sont divisés par deux entre les deux ajustements, voir l’écart type de l’ajustement dans la Table 1. Pour les paramètres spectroscopiques de la raie : la position reste pratiquement inchangée, mais pour l’intensité on observe un écart de 0.4 % entre les ajustements menés avec deux valeurs de diaphragmes différentes. L’écart est bien plus conséquent si on considère le coefficient d’auto-élargissement. On rappelle que le diaphragme d’entrée entraîne un déplacement en position des transitions mais influe également sur l’élargissement. Il est donc tout à fait cohérent d’observer une variation du coefficient d’auto-élargissement quasi identique à la variation du rayon du diaphragme d’entrée qui est de l’ordre de 10%.

### **3.b Pressions partielles**

La connaissance avec précision des rapports isotopiques des espèces présentes dans la cuve d’absorption est primordiale pour l’analyse des spectres enregistrés au laboratoire. En effet une erreur sur le rapport isotopique se traduira par une erreur systématique sur l’estimation des intensités des raies d’absorption. L’erreur commise sur l’intensité de la raie est directement proportionnelle à l’erreur commise sur la pression partielle. On est amené à rechercher les pressions partielles dans le cas d’études réalisées avec par exemple des gaz isotopiques ou des mélanges de gaz amenant la formation de nouvelles espèces dont il faudra connaître les pressions partielles. En particulier au cours de mon doctorat j’ai été amenée à travailler sur des spectres enrichis en  $^{18}\text{O}$  lors

de l’étude des isotopologues  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{18}\text{O}$  dans la région de  $10\ \mu\text{m}$  (développé partie III, à partir de la page 89).

Le logiciel « MultiFiT » permet d’ajuster la pression partielle d’une espèce. On peut ainsi remonter à la valeur du rapport isotopique. Pour réaliser l’ajustement des pressions partielles il faut commencer par considérer que la pression totale du spectre, mesurée lors de l’enregistrement, est la somme des pressions partielles des espèces présentes dans la cellule d’absorption. Par exemple dans le cas de la vapeur d’eau : la pression totale du spectre sera la somme des pressions partielles des isotopologues :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{17}\text{O}$ . L’ajustement de la pression partielle d’une espèce s’effectue sur un spectre de basse pression. Dans ces conditions l’influence de l’élargissement par la pression est négligeable. L’ajustement est réalisé sur des raies isolées et bien définies. L’intensité étant un paramètre corrélé à la pression du gaz, il est nécessaire de choisir des intensités de référence pour déterminer les pressions partielles de chaque isotopologue présent dans la cuve. Ces intensités de référence sont choisies en fonction de la littérature disponible et du degré de confiance que l’on peut y accorder.

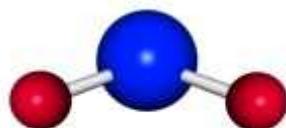


## **Chapitre 4.**

### **Attribution des spectres.**

#### **1 Généralités sur la molécule d'eau**

##### **1.a Modes de vibration de la molécule d'eau**



**Figure 28 : Molécule d'eau**

La molécule d'eau est une molécule triatomique, non linéaire et qui appartient au groupe des toupies asymétriques. Cette molécule possède des isotopologues symétriques ( $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ) et non symétriques ( $\text{HD}^{16}\text{O}$  par exemple). Dans tous les cas, pour les molécules non linéaires, le nombre de modes normaux de vibration est donné par la relation :  $3n - 6$  (avec  $n$  : le nombre d'atomes de la molécule). La molécule d'eau possède donc 3 modes normaux de vibration : 2 modes d'élongation et un mode de déformation, qui sont représentés sur la Figure 29. Leurs fréquences fondamentales sont données Table 2.

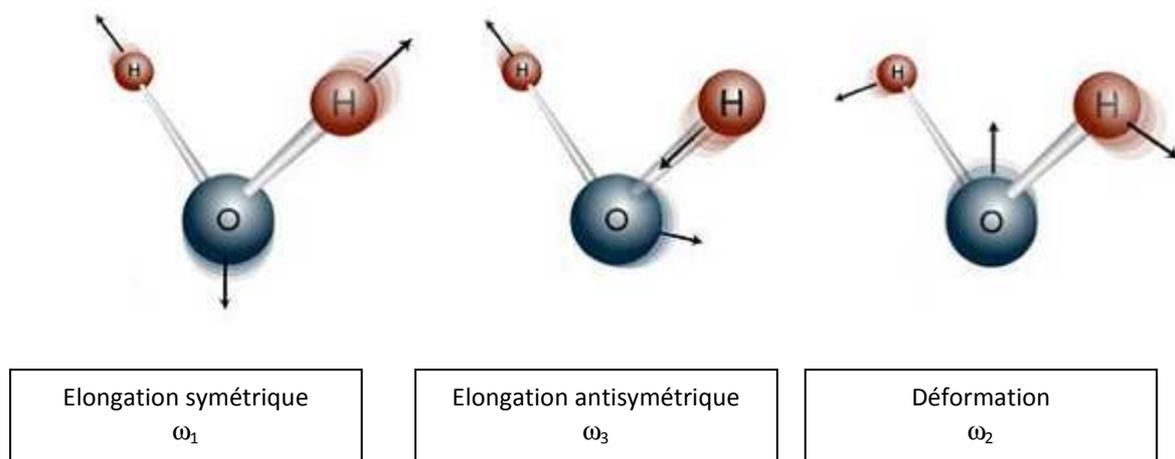


Figure 29 : Modes de vibration normaux de la molécule d'eau

|            | $\text{H}_2^{16}\text{O}$ | $\text{H}_2^{18}\text{O}$ | $\text{HD}^{16}\text{O}$ |
|------------|---------------------------|---------------------------|--------------------------|
| $\omega_1$ | 3656                      | 3822                      | 2823                     |
| $\omega_2$ | 1594                      | 1642                      | 1444                     |
| $\omega_3$ | 3755                      | 3925                      | 3888                     |

Table 2 : Fréquences fondamentales pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$  [28].

### 1.b Résultats de la théorie des groupes

La connaissance des propriétés de symétrie d'une molécule permet d'en simplifier et d'en comprendre les propriétés spectroscopiques. La théorie des groupes permet, de manière systématique, d'exploiter les propriétés de symétrie d'une molécule. La configuration de la molécule (configuration d'équilibre) permet de connaître son groupe de symétrie défini comme l'ensemble des opérations de symétrie laissant la configuration d'équilibre inchangée.

Les isotopologues symétriques appartiennent au groupe de symétrie  $C_{2v}$  et les isotopologues non symétriques au groupe  $C_s$ . Je redonne ici les éléments de symétrie de ces groupes, les tables de multiplication et les tables de caractères correspondantes.

**.1.b.1 Groupe  $C_{2v}$**

| Eléments de symétrie  |  |
|---|--|
| - Identité $E$ : qui correspond à la transformation de chaque point en lui-même   |  |
| - Axe de symétrie d'ordre $n=2$ , noté $C_2$ . Il définit la rotation autour d'un axe par rotation d'angle $\pi$  |  |
| - Plans de symétrie : la molécule d'eau présente deux plans de symétrie $\sigma_v$ (plan de symétrie vertical contenant l'axe principal) notés $\sigma_1$ et $\sigma_2$ |  |

**Table 3 : Groupe  $C_{2v}$ . Eléments de symétrie**

|                              |            |                         |                              |                              |
|------------------------------|------------|-------------------------|------------------------------|------------------------------|
|                              | <b>E</b>   | <b><math>C_2</math></b> | <b><math>\sigma_1</math></b> | <b><math>\sigma_2</math></b> |
| <b>E</b>                     | E          | $C_2$                   | $\sigma_1$                   | $\sigma_2$                   |
| <b><math>C_2</math></b>      | $C_2$      | E                       | $\sigma_2$                   | $\sigma_1$                   |
| <b><math>\sigma_1</math></b> | $\sigma_1$ | $\sigma_2$              | E                            | $C_2$                        |
| <b><math>\sigma_2</math></b> | $\sigma_2$ | $\sigma_1$              | $C_2$                        | E                            |

**Table 4 : Table de multiplication du groupe  $C_{2v}$**

Si l'on se place dans un repère R tel que :

- l'axe z suit l'axe de rotation  $C_2$ ,
- l'axe y est dans le plan  $\sigma_1$ , contenant la molécule
- l'axe x est dans le plan  $\sigma_2$ , perpendiculaire au plan de la molécule

| $C_{2v}$                | <b>E</b> | <b><math>C_2</math></b> | <b><math>\sigma_1</math></b> | <b><math>\sigma_2</math></b> |               |
|-------------------------|----------|-------------------------|------------------------------|------------------------------|---------------|
| <b><math>A_1</math></b> | 1        | 1                       | 1                            | 1                            | $q_1, q_2, z$ |
| <b><math>A_2</math></b> | 1        | 1                       | -1                           | -1                           | $R_z$         |
| <b><math>B_1</math></b> | 1        | -1                      | -1                           | 1                            | $x, R_y$      |
| <b><math>B_2</math></b> | 1        | -1                      | 1                            | -1                           | $q_3, y, R_x$ |

**Table 5 : Tables des représentations irréductibles du groupe  $C_{2v}$**

### .1.b.2 Groupe $C_s$

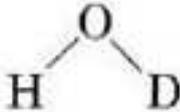
|  |   |
|--|---|
| Eléments de symétrie   |  |
| - Identité $E$   |   |
| - Plan de symétrie : noté $\sigma_o$ c'est le plan de la molécule ( $xy$ ) |   |

Table 6 : Eléments de symétrie du groupe  $C_s$

|            |            |            |
|------------|------------|------------|
|            | $E$        | $\sigma_o$ |
| $E$        | $E$        | $\sigma_o$ |
| $\sigma_o$ | $\sigma_o$ | $E$        |

Table 7 : Table de multiplication du groupe  $C_s$

|       |     |            |                                |
|-------|-----|------------|--------------------------------|
|       | $E$ | $\sigma_o$ |                                |
| $A'$  | 1   | 1          | $x, y, R_z$<br>$q_1, q_2, q_3$ |
| $A''$ | 1   | -1         | $z, R_x, R_y$                  |

Table 8 : Table des représentations irréductibles du groupe  $C_s$

## 2 Spectre de la vapeur d'eau et Règles de sélection des transitions

### 2.a Hamiltonien de vibration et de rotation

On se place dans l'approximation de Born-Oppenheimer, les solutions de l'équation de Schrödinger représentent les différents états ro-vibrationnels.

$$(T + V)\psi = E\psi$$

- $T$  : l'énergie cinétique des noyaux dans le référentiel du laboratoire. Cette énergie cinétique peut être décomposée comme la somme d'une énergie cinétique interne et d'une énergie cinétique de translation. Cette dernière est séparable et nous ne la traiterons pas dans la suite. Dans le référentiel moléculaire (référentiel lié au barycentre et qui tourne avec la molécule), l'énergie cinétique interne fait apparaître trois termes : une énergie cinétique de vibration, une énergie cinétique de rotation et des termes d'interactions
- $V$  : la fonction d'énergie potentielle. Cette fonction peut s'écrire en fonction des 3N-6 coordonnées internes.

L'Hamiltonien dans la forme décrite par Watson peut s'écrire de manière simple :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} (J_\alpha - P_\alpha) \mu_{\alpha\beta} (J_\beta - P_\beta) + \frac{1}{2} \sum_k P_k^2 + U + V$$

Avec :

- Les indices  $\alpha, \beta$  servent à désigner les composantes des opérateurs sur les axes  $x, y$  et  $z$  du repère mobile de la molécule
- $\vec{J}$  : moment angulaire total
- $\vec{P}$  : moment angulaire interne
- $P_k$  : moment conjugué de la coordonnée normale  $Q_k$
- $\mu_{\alpha\beta}$  : composante de l'inverse du tenseur d'inertie effectif
- $U = \frac{\hbar^2}{8} \sum_\alpha \mu_{\alpha\alpha}$
- $V$  : potentiel moléculaire

Cet Hamiltonien peut s'écrire sous la forme :

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + \dots$$

$H_0$  est appelé Hamiltonien d'ordre zéro. Dans le cas des molécules rigides, comme la molécule d'eau, l'introduction des coordonnées normales  $Q_k$  permet d'écrire l'énergie potentielle sous la forme :

$$V = \sum_{k=1}^{3N-6} \lambda_k Q_k^2$$

La forme de  $H_0$  fait alors apparaître l'Hamiltonien du rotateur rigide et de  $3n-6$  oscillateurs harmoniques.

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \mu_{\alpha\beta}^0 J_\alpha J_\beta + \frac{1}{2} \sum_k (P_k^2 + \lambda_k Q_k^2)$$

La prise en compte des termes suivants ( $H_1, H_2, \dots$ ) est plus complexe. L'hamiltonien est alors traité par une méthode de perturbation ou méthode dite de transformation de contact, notamment décrite par J. Lamouroux dans sa thèse [29].

### **.2.a.1 Hamiltonien vibrationnel d'ordre zéro, valeurs propre associées :**

L'hamiltonien vibrationnel, en première approximation est la somme de  $3n-6$  oscillateurs harmoniques de fréquences  $\omega_i$ , dont les valeurs propres sont données par :

$$E_{vib} = \sum_{i=1}^{3N-6} \omega_i \left( V_i + \frac{d_i}{2} \right)$$

Avec :

- $\omega_i$  : fréquences fondamentales
- $V_i = 0, 1, 2, \dots$  le nombre quantique de vibration
- $d_i$  : dégénérescence de la vibration. Pour les toupies asymétriques, groupe de la molécule d'eau tous les modes sont non-dégénérés donc  $d_i = 1$ .

Les fonctions d'ondes correspondantes sont notées  $V_1, V_2, V_3$  elles ont le même comportement vis-à-vis des symétries que  $q_1^{V_1}, q_2^{V_2}, q_3^{V_3}$  c'est-à-dire que dans le cas :

- $C_s$  est de type  $A'$
- $C_{2V}$  si  $V_3$  paire  $\rightarrow A_1$  et si  $V_3$  impaire  $\rightarrow A_2$

Si on prend en compte l'anharmonicité des oscillateurs harmoniques, l'énergie de vibration peut s'écrire de manière plus complexe avec des termes correctifs comme par exemple :

$$E_{vib} = \sum_i \omega_i \left( V_i + \frac{1}{2} \right) - \sum_{ij} x_{ij} \left( V_i + \frac{1}{2} \right) \left( V_j + \frac{1}{2} \right) + \dots$$

De même l'expression des constantes de rotation devient :

$$B_\alpha = B_\alpha - \sum_i a_\alpha^i \left( V_i + \frac{1}{2} \right) + \dots$$

Avec :

- $x_{ij}$  les constantes d'anharmonicité
- $a_\alpha^i$  les constantes de vibration – rotation

### .2.a.2 Hamiltonien rotationnel d'ordre zéro

L'hamiltonien rotationnel peut être exprimé en première approximation sous la forme d'un rotateur rigide si on choisit les axes ( $x, y, z$ ) liés à la molécule comme étant les axes d'inertie de la configuration d'équilibre :

$$H_{rot} = B_{\alpha} J_{\alpha}^2$$

Avec :

- $B_{\alpha} = \mu_{\alpha\beta}$ , les constantes d'inertie
- $J_{\alpha}$ , opérateur moment angulaire

Dans le cas des toupies asymétriques :  $B_x \neq B_y \neq B_z$  il n'est alors pas possible de donner une expression analytique pour l'énergie. On rappelle l'expression des énergies dans le cas des toupies sphériques ( $B_x = B_y = B_z = B$ ) :

$$E_{Rot}^{sp} = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1) = BJ(J+1)$$

Pour établir les propriétés du rotateur asymétrique, on a besoin des propriétés des cas extrêmes des toupies allongées (prolates) et aplaties (oblates). Ainsi en plus du nombre quantique  $J$  de rotation, on introduit les nombres quantiques  $K_a$  et  $K_c$  qui permettent de repérer un niveau d'énergie entre les cas limites des toupies oblates ou prolates.

- Energie d'une toupie allongée.

$$E(J, K_a) = CJ(J+1) + (A-C)K_a^2$$

Avec :  $A, B, C$  les valeurs de  $B_x, B_y, B_z$  avec la convention  $A \geq B \geq C$  et  $a, b, c$  les axes mobiles  $x, y, z$ .

- Energie d'une toupie aplatie :

$$E(J, K_c) = AJ(J+1) + (C-A)K_c^2$$

Entre ces deux cas limites, il n'y a pas d'expression de l'énergie de manière simple. Ainsi on imagine de faire varier  $B$  de  $C$  à  $A$  et de suivre l'évolution des énergies des niveaux. On obtient ainsi le diagramme présenté Figure 30.

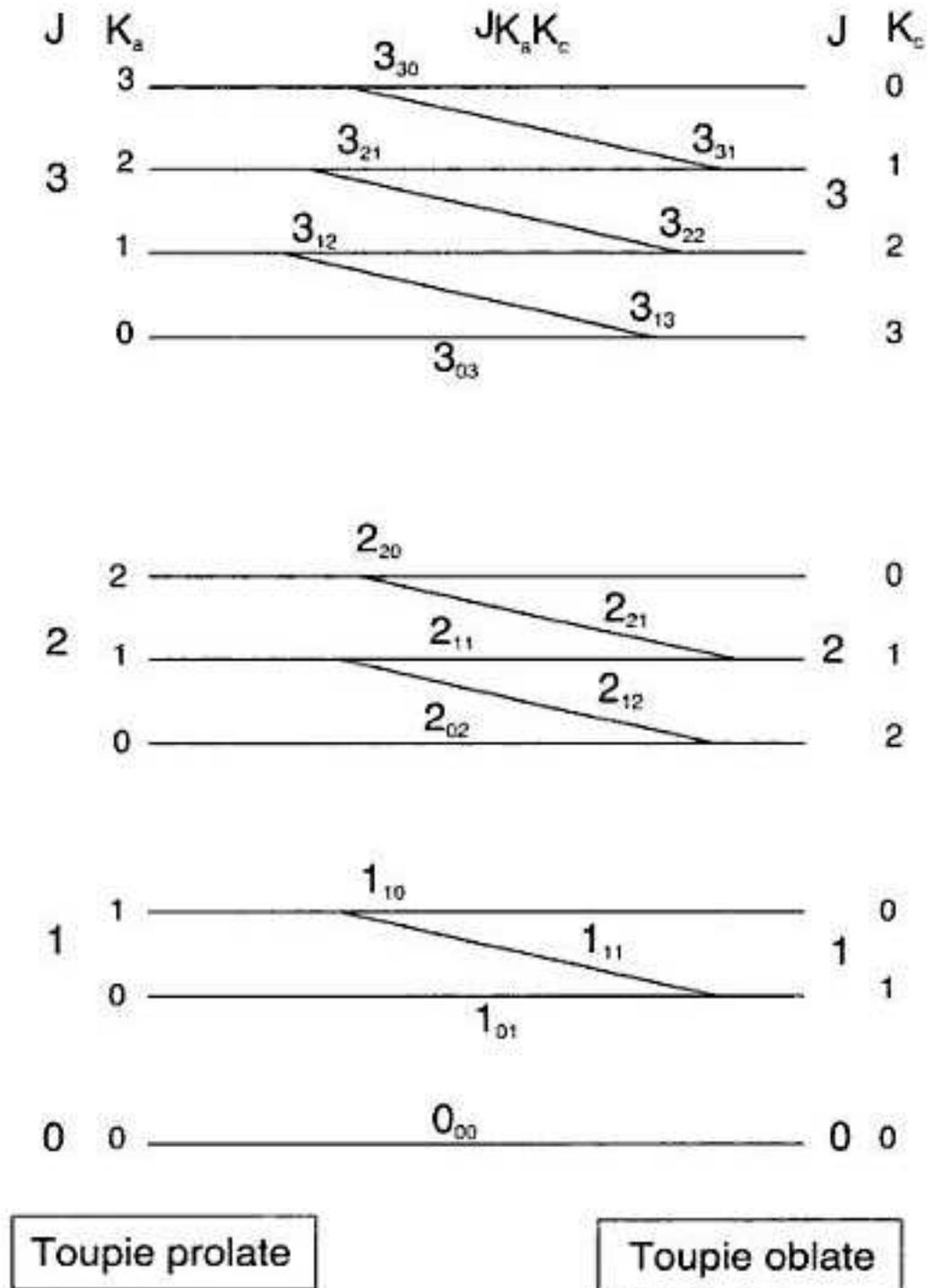


Figure 30 : Diagramme de corrélation entre les cas limites des toupies allongées (prolates) et aplaties (oblates) (figure de E. Biéumont (2006) [30]).

L'ensemble des nombres quantiques rotationnels  $J, K_a$  et  $K_c$  permettent d'attribuer de façon unique les niveaux d'énergie tels que :

$$0 \leq K_a \leq J ; 0 \leq K_c \leq J \text{ et } K_a + K_c = J \text{ ou } J + 1$$

## 2.b Spectres de Vibration-Rotation :

Chaque niveau vibrationnel est constitué d'un ensemble de niveaux rotationnels :

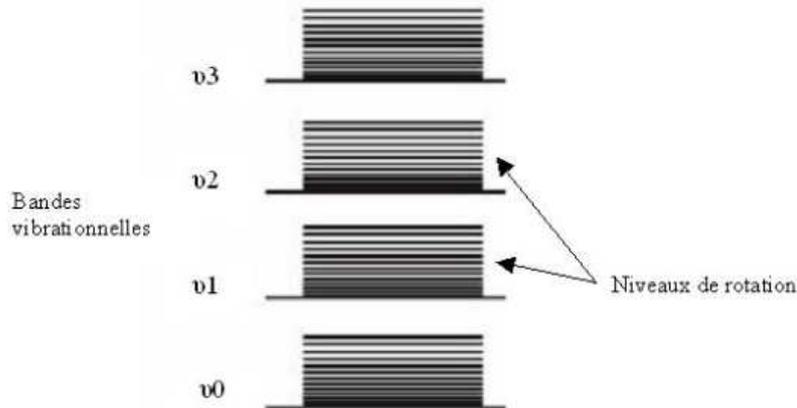


Figure 31 : Schématisation des niveaux vibrationnels et rotationnels

Dans le cas d'un spectre de Vibration-Rotation on observe les transitions des niveaux rotationnels d'un niveau de vibration  $V''_{1,2,3}$  vers les niveaux rotationnels d'un autre niveau vibrationnel  $V'_{1,2,3} = V''_{1,2,3} + \Delta V_{1,2,3}$ .

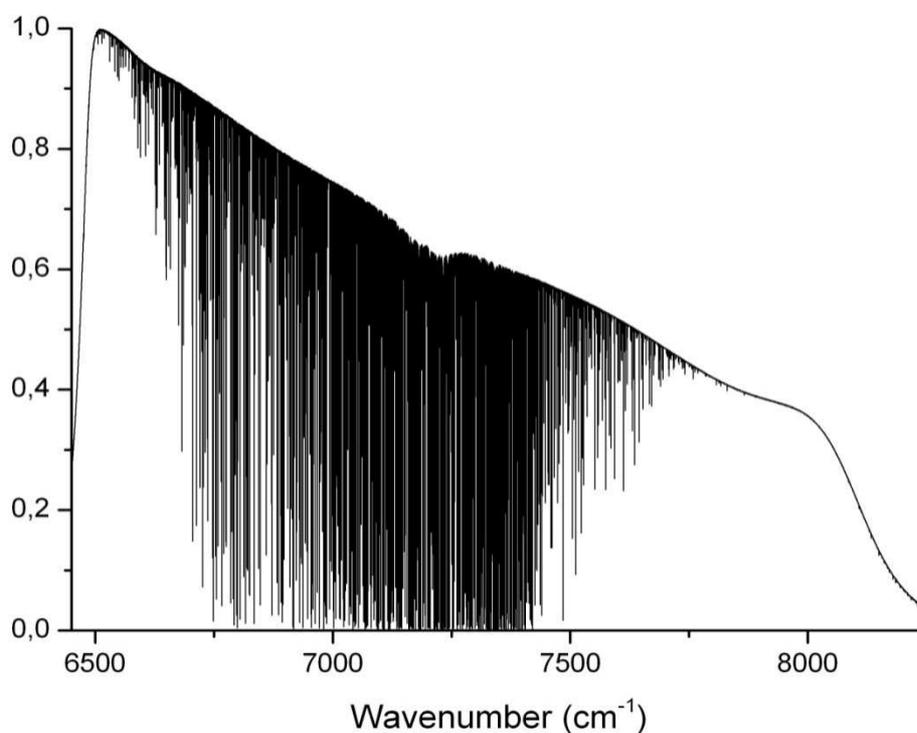
Pour  $H_2O$ , on remarque que les fréquences fondamentales d'élongations  $\omega_1$  et  $\omega_3$  ont des valeurs qui sont très proches et également la fréquence fondamentale  $\omega_2$  est proche de  $\frac{\omega_1}{2}$  ou  $\frac{\omega_3}{2}$ . A l'ordre zéro :  $\Delta E_V = \sum_i \omega_i \Delta V_i = \omega_2 \sum_i \frac{\omega_i}{\omega_2} \Delta V_i$ . Dans le cas de la molécule d'eau :

$$\Delta E_V \approx \omega_2 (2\Delta V_1 + \Delta V_2 + 2\Delta V_3) \approx \omega_2 \Delta P$$

Avec  $P = 2V_1 + V_2 + 2V_3$  les états de même mode ont des énergies très proches et forment des « polyades » comportant  $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$  états. Parmi ces états, ceux qui ont la même symétrie sont susceptibles d'interagir. Les bandes d'une même polyade absorbent dans la même région spectrale ainsi le spectre de la molécule d'eau est un spectre très complexe, par exemple la région à  $1.4 \mu m$  présentée Figure 32 montre le spectre correspondant à la région  $\Delta P = 4\delta$  et  $\Delta P = 5$  notés également  $2V$  et  $2V + \delta$ . Cette décomposition en polyades est de plus en plus compliquée à mesure que l'on considère des énergies élevées. Il peut également apparaître des phénomènes de résonance entre les bandes de polyades différentes. Ceci est du à l'anharmonicité des oscillateurs.

Ces résonances font que les fonctions d'onde sont des mélanges des fonctions d'onde d'ordre zéro. Dans ces mélanges, seules les symétries sont conservées (J, parité). Aussi, pour identifier un niveau d'énergie on se sert de la fonction d'ordre zéro qui a la composante la plus importante et on continue à noter  $\nu_1 \nu_2 \nu_3 JK_a K_c$  chaque niveau d'énergie. Cependant, dans le cas où les résonances amènent à des mélanges importants des fonctions d'onde d'ordre zéro, il est

possible de trouver plusieurs niveaux d'énergies ayant la même composante principale, il faut alors analyser chaque fonction d'onde pour attribuer de manière unique un jeu de nombres quantiques [31]. Les résonances de part les mélanges de fonctions d'onde qu'elles peuvent induire, se traduisent également par des transferts d'intensité depuis les bandes intenses vers les bandes faibles.



**Figure 32 : Spectre de vapeur d'eau enregistré en abondance naturelle : parcours d'absorption 36 m, pression totale 5 Torr. La forme de l'enveloppe est due aux filtres optiques.**

La notation complète d'une transition ou attribution d'une raie reprend les informations vibrationnelles couplées aux nombres quantiques de rotation  $J$ ,  $K_a$  et  $K_c$ . Cette notation est celle utilisée dans les bases de données spectroscopiques : HITRAN [32], GEISA [33], etc....

$$\nu_1 \nu_2 \nu_3 J K_a K_c \quad \nu_1'' \nu_2'' \nu_3'' J'' K_a'' K_c''$$

### 3 Attribution des spectres enregistrés au laboratoire

L'attribution des spectres de vapeur d'eau enregistrés au laboratoire a été réalisée par S. Mikhailenko, de l'IAO (Institute of Atmospheric Optics, Tomsk, Russie). La molécule d'eau présente un spectre très complexe. L'attribution des transitions d'un spectre expérimental est également très complexe. C'est pourquoi il a été nécessaire de développer des outils permettant l'attribution des transitions de manière plus rapide et plus efficace. C'est le but du logiciel développé à l'IAO. L'article de A. Bykov et al. [34] propose une présentation détaillée de ce système d'attribution, il s'agit ici d'en redonner les points principaux afin d'en comprendre le fonctionnement.

#### 3.a Règle de combinaison de Ryberg-Ritz

La règle de combinaison de Ryberg-Ritz est un outil très utile pour l'attribution des spectres d'une molécule. Selon cette règle, les transitions du spectre expérimental ayant le même niveau supérieur, telles que  $f \leftarrow i_N$ , avec  $f$  : niveau haut des transitions et  $i_N$  : niveaux bas des transitions, obéissent à la relation :

$$\left| \nu_1^{exp} - \nu_2^{exp} \right| - \left| E_{i_1}^{low} - E_{i_2}^{low} \right| \leq \Delta\nu_1 + \Delta\nu_2 + \Delta E_{i_1} + \Delta E_{i_2}$$

Avec :

- $\nu_1^{exp}$  ;  $\nu_2^{exp}$  : les positions expérimentales
- $\Delta\nu_1$  ;  $\Delta\nu_2$  : les erreurs de mesures sur les positions expérimentales
- $E_{i_1}^{low}$  ;  $E_{i_2}^{low}$  : les énergies des niveaux bas  $i_1$  et  $i_2$
- $\Delta E_{i_1}$  ;  $\Delta E_{i_2}$  : les erreurs sur les énergies
- $i_1$  et  $i_2$  : les nombres quantiques des niveaux bas des transitions telles que  $f \leftarrow i_1$  et  $f \leftarrow i_2$

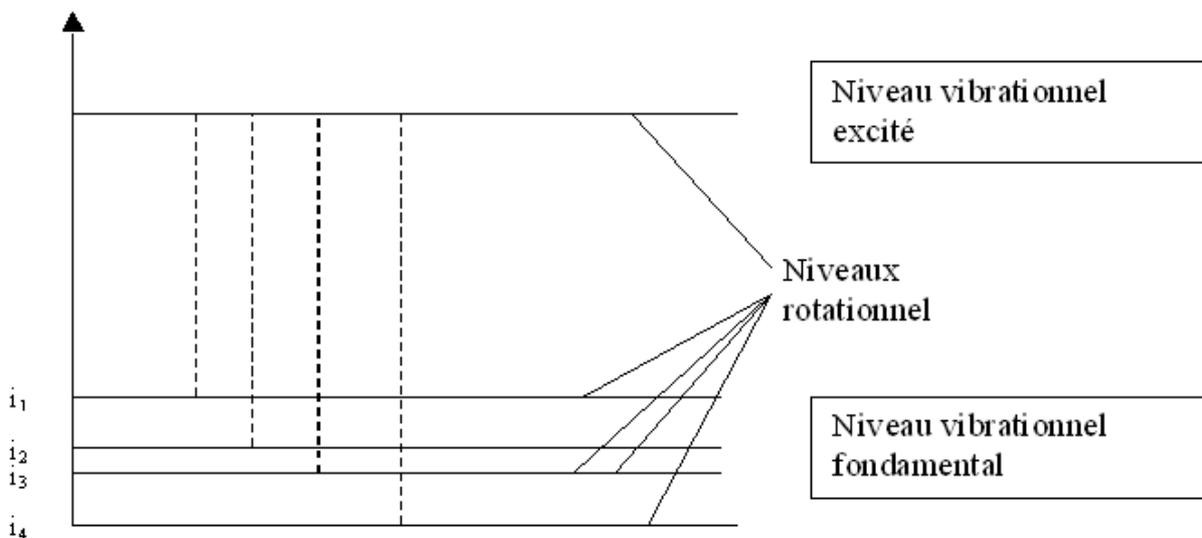


Figure 33 : Schématisation d'un groupe de combinaison

On suppose que l'énergie des niveaux bas est déterminée avec une précision plus grande que l'erreur sur les positions expérimentales. Les transitions obéissant à cette relation forment un groupe de combinaison. Ces groupes de raies sont facilement repérables dans un spectre expérimental. Ce principe permet de vérifier que les attributions pour les raies appartenant à un même groupe de combinaison sont cohérentes avec les énergies inférieures des transitions. Cependant si le spectre expérimental est très dense, le nombre de groupes de combinaisons possibles que l'on peut associer aux transitions est lui aussi très élevé.

### **3.b Logiciel d'attribution de l'IAO**

Le logiciel d'attribution développé à l'IAO fonctionne selon un système de reconnaissance des transitions. Cette méthode est décrite dans [35][36][37]. La procédure de reconnaissance permet de choisir le groupe de combinaison correct parmi un grand nombre de ces groupes. Pour l'attribution des transitions, il est nécessaire d'utiliser la règle des différences de combinaison en même temps que les calculs théoriques des positions et intensités des transitions.

Pour fonctionner le logiciel nécessite des fichiers d'entrée :

- une liste de paramètres expérimentaux (positions et intensités)
- une liste de données théoriques. A ce niveau deux possibilités sont offertes à l'utilisateur :
  - Utiliser une liste théorique déjà prête. Par exemple une liste produite par H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]. Les listes de raies de ces auteurs peuvent être obtenues via le site SPECTRA (<http://spectra.iao.ru/>).
  - Calculer une liste théorique directement avec le logiciel.

Pour les spectres enregistrés au cours de mon doctorat, ce sont les listes de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39] qui ont été utilisées. L'attribution a été menée pour le travail dans la région de 10  $\mu\text{m}$  sur les isotopologues  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{18}\text{O}$ , ainsi que pour l'ensemble des transitions mesurées pour la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ .

Pour l'attribution des raies d'un spectre il faut regarder en premier la règle de combinaison des différences. Pour cela, il faut identifier au moins deux raies qui semblent appartenir au même groupe de combinaison. On peut alors écrire :

$$E_f = \nu_1 + E_1^{low} = \nu_2 + E_2^{low}$$

Avec :

- $\nu_1$  et  $\nu_2$  deux transitions appartenant au même groupe de combinaison
- $E_1^{low}$  et  $E_2^{low}$  les niveaux d'énergie bas associés aux transitions  $\nu_1$  et  $\nu_2$ .

La règle de combinaison des différences s'écrit pour ces deux raies :  $\nu_2 - \nu_1 = E_2^{low} - E_1^{low}$ .

Si cette règle est vérifiée alors il est fort possible que les deux raies appartiennent au même groupe de combinaison, et il est alors possible de les identifier. Que faire dans le cas où deux couples de transitions sont proches :

$$\begin{aligned}\nu_2 - \nu_1 &= E_2^{low} - E_1^{low} \\ \nu'_2 - \nu'_1 &= E_2^{low} - E_1^{low}\end{aligned}$$

Pour déterminer quel est le bon couple de transition, il faut regarder la liste calculée, ici la liste de H. Partridge et D.W. Schwenke. En comparant les intensités calculées et expérimentales, on peut arriver à déterminer s'il faut choisir  $\nu_1$  et  $\nu_2$  ou  $\nu'_1$  et  $\nu'_2$ . Le mieux est à la fois de comparer les intensités et les positions calculées et expérimentales pour donner un avis définitif.

L'analyse d'un spectre expérimental, peut se faire en partant des raies les plus fortes de la région spectrale, qui sont généralement les mieux connues. Puis ensuite regarder les raies les plus faibles, dans ce cas la comparaison avec les données calculées est très importante et permet de donner un avis sur l'attribution des transitions.

On peut également avoir le cas de figure où une transition ne semble pas appartenir à un groupe de combinaison. Il reste néanmoins possible d'attribuer ces transitions à l'aide de la liste calculée théorique en s'appuyant sur les positions et les intensités.



## ***Partie III.***

# ***Etude de la vapeur d'eau à 10 $\mu\text{m}$ . - Région d'intérêt pour l'analyse des données IASI***



## **Contexte de l'étude.**

# **IASI : Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge**

IASI, Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge, est l'un des instruments embarqués sur la série des satellites météorologiques européens METOP. Il est développé par le Centre National d'Etudes Spatiales (CNES) dans le cadre d'une collaboration avec EUMETSAT (EUropean organisation for the exploitation of METeorological SATellites). Le programme IASI compte trois instruments qui seront embarqués successivement sur les satellites METOP. Le premier vol a été lancé le 16 octobre 2006 sur le satellite METOP-A, qui sera suivi de METOP-B et METOP-C, qui embarqueront le deuxième et troisième instrument IASI. Leurs lancements sont prévus en 2012 pour METOP-B et en 2016 pour METOP-C.

IASI a été conçu pour permettre des sondages météorologiques de grande précision pour l'amélioration des prévisions météorologiques à moyen terme, pour lesquels les informations sur la vapeur d'eau dans l'atmosphère sont primordiales. Cet instrument a également été conçu afin de suivre la chimie de l'atmosphère et de détecter des gaz à l'état de trace : comme l'ozone, le méthane ou encore le monoxyde de carbone à l'échelle mondiale.

Les informations spectrales sont obtenues grâce à un Spectromètre par Transformation de Fourier, construit selon le modèle d'un interféromètre de Michelson, (décrit page 9) travaillant dans la gamme spectrale 3.7 – 15.5  $\mu\text{m}$  ( $645\text{ cm}^{-1}$  –  $2760\text{ cm}^{-1}$ ).

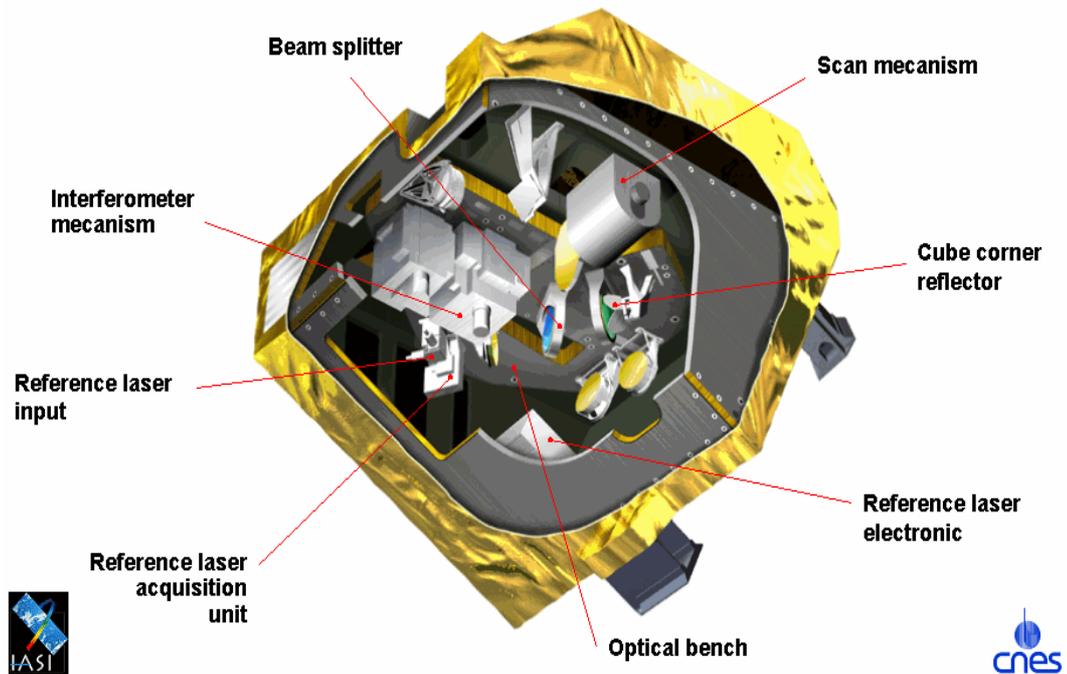


Figure 34 : Spectromètre IASI, embarqué sur le satellite METOP-A

Dans cette large gamme spectrale, le sondage de la vapeur d'eau intervient plus particulièrement dans la zone allant de  $1210$  à  $1650\text{ cm}^{-1}$ . Pour des raisons de performance la gamme spectrale de l'instrument a été subdivisée en trois bandes :

| Bande | Gamme ( $\text{cm}^{-1}$ ) | Gamme ( $\mu\text{m}$ ) |
|-------|----------------------------|-------------------------|
| 1     | 645 à 1210                 | 15,5 à 8,26             |
| 2     | 1210 à 2000                | 8,26 à 5                |
| 3     | 2000 à 2760                | 5 à 3,62                |

Table 9 : Bandes spectrales de l'instrument IASI

La bande 2 contribue principalement à la restitution de l'humidité de l'atmosphère et à l'abondance des gaz à l'état de traces. Un exemple de spectre enregistré par IASI [47], en 2006 au-dessus de l'Australie est présenté à la Figure 35. Ce spectre, en noir sur la figure, est la somme de toutes les contributions des espèces absorbantes de l'atmosphère sondée. Parmi ces espèces certaines sont très absorbantes, comme la vapeur d'eau et les espèces présentées sur le troisième panneau. D'autres espèces sont présentes uniquement à l'état de trace, c'est le cas des molécules présentées sur les deux derniers panneaux. Ces espèces ont toutes été détectées par IASI, mais certaines d'entre elles ne sont visibles qu'en cas d'événements particuliers comme des feux de forêt ou des éruptions volcaniques [48][49].

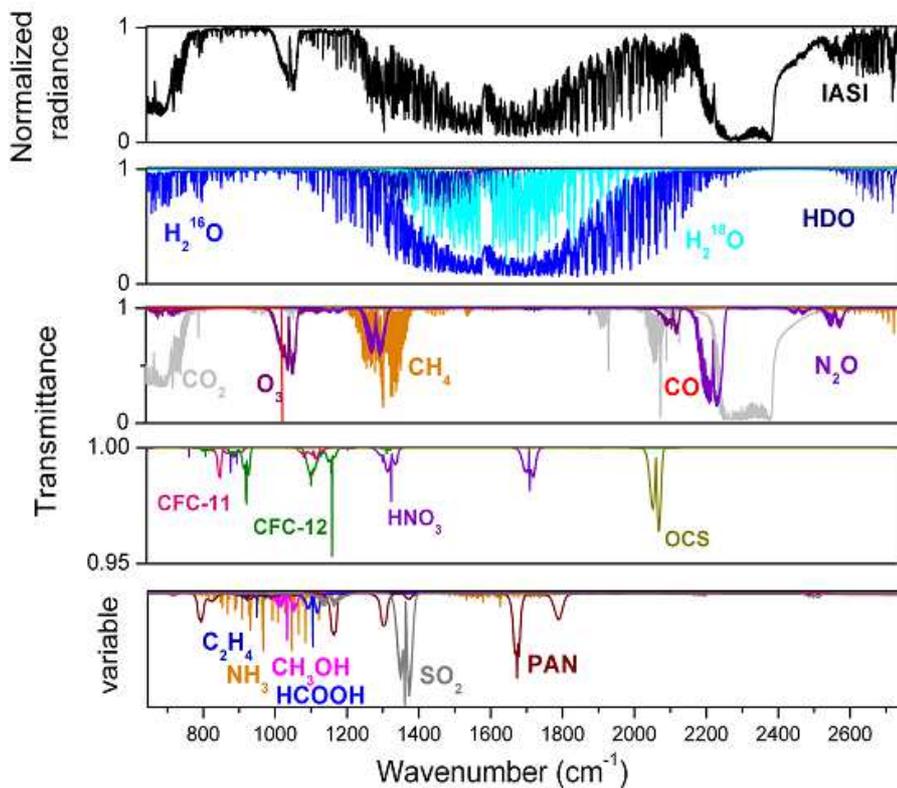


Figure 35 : Spectre IASI, en noir, enregistré en 2006 au dessus de l'Australie [47]. Les panneaux suivant présentent les absorptions, calculées à partir des bases de données, des molécules pouvant être détectées sur un spectre IASI. (figure de C. Clerbaux (2009))

D'une manière générale, pour effectuer les travaux d'inversion et de détermination de concentration des espèces présentes sur les spectres satellitaires, il est primordial de connaître précisément les paramètres spectroscopiques de toutes les espèces atmosphériques. Une mauvaise estimation de leurs paramètres peut intervenir de manière dramatique dans la restitution des concentrations et en conséquence sur les prévisions météorologiques. Dans le cas d'une molécule très absorbante comme la vapeur d'eau, l'incertitude sur les paramètres spectroscopiques intervient à plusieurs échelles. Dans un premier temps cette incertitude provoque une imprécision sur la mesure de l'humidité de l'atmosphère que l'on peut relier in fine à une imprécision sur les prévisions météorologiques. Ensuite dans le cadre de l'inversion des spectres satellitaires, cette incertitude entraîne une mauvaise estimation de la contribution de la vapeur d'eau qui va également influencer sur l'identification ainsi que la restitution des concentrations des espèces atmosphériques à l'état de trace.

Les bases de données spectroscopiques HITRAN [32] et GEISA [33] fournissent des paramètres spectroscopiques de référence pour de nombreuses molécules d'intérêt atmosphériques. La base GEISA [33] propose en outre pour chaque édition une base GEISA/IASI dédiée à l'analyse des spectres IASI, les données, identiques à GEISA, y sont regroupées pour la région spectrale de 600 à 3000  $\text{cm}^{-1}$ . Les références des données de la vapeur d'eau, valables pour les positions et intensités, sont regroupées dans la Table 10, pour chaque version des bases de données depuis GEISA03 [50]. Dans la version de 2003 de GEISA, une liste alternative [51] est disponible pour la vapeur d'eau dans la région spectrale couverte par IASI. Cette liste de raies a également été incluse dans notre étude. Les différentes versions des bases de données ont intégré successivement les travaux de R.A. Toth [52][53][54][56][57] (voir le détail dans la Table 10, page 93). Pour les versions les plus récentes, les données d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  correspondent au travail de L.H. Coudert publié en 2008 [58], les autres isotopologues proviennent de la liste compilée par R.A. Toth [52]. Un petit bémol est à apporter à cette distinction rapide puisque les données attribuées à L.H. Coudert et al. regroupent des raies d'intensité de  $1 \times 10^{-19}$  à  $1 \times 10^{-25}$   $\text{cm}/\text{molec}$  (voir chapitre 1). Les raies d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  les plus faibles actuellement listées font référence aux données de R.A. Toth [52].

Au final, HITRAN et GEISA présentent des données comparables (Table 10).

Les bases de données spectroscopiques les plus récentes [15] [59] nécessitent d'être revisitées et augmentées de nouvelles transitions pour la vapeur d'eau dans la région spectrale de IASI (de 600 à 3000  $\text{cm}^{-1}$ ). On constate que peu de données expérimentales sont disponibles dans la littérature, en particulier pour les isotopologues mineurs. Il est donc apparu nécessaire, aussi bien pour les positions que les intensités d'apporter de nouvelles mesures de laboratoire. Dans la gamme couverte par l'instrument IASI, c'est la région spectrale de la bande 2 de l'instrument IASI qui nous a plus particulièrement intéressés dans le cas de la vapeur d'eau. Dans ce domaine, de 1200 à 2000  $\text{cm}^{-1}$ , la vapeur d'eau présente des absorptions très importantes (Figure 35). Notre travail a porté sur l'isotope principal  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  pour la région allant de 1200 à 1400  $\text{cm}^{-1}$ , et pour les isotopologues  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{18}\text{O}$ , dans la gamme 1000 à 2300  $\text{cm}^{-1}$ .

|  | Région changée              | Références des données  |
|--|-----------------------------|---|
| <b>GEISA 2003 [50]<br/>(ou GEISA/IASI03)</b> | 50 – 2850 $\text{cm}^{-1}$  | R.A. Toth : 1999, 2000 [53][54][56]<br>R.A. Toth et al. , 1998 [57]<br>Liste alternative : Stewart (2003)[51] |
| <b>HITRAN2004 [16]</b>                       | 50 – 2850 $\text{cm}^{-1}$  | R.A. Toth : 1999, 2000[53][54][56]<br>R.A. Toth et al. , 1998[57]   |
| <b>HITRAN2008 [15]</b>                       | 500 – 7973 $\text{cm}^{-1}$ | R.A. Toth[52]<br>$\text{H}_2^{16}\text{O}$ intensité* : L.H. Coudert et al. (2008)<br>[58]                    |
|  | 10 – 2000 $\text{cm}^{-1}$  |   |
| <b>GEISA 2009 [59]<br/>(ou GEISA/IASI09)</b> | 500 – 7973 $\text{cm}^{-1}$ | R.A. Toth[52]<br>$\text{H}_2^{16}\text{O}$ intensité* : L.H. Coudert et al. (2008)<br>[58]                    |
|  | 10 – 2000 $\text{cm}^{-1}$  |   |

**Table 10 : Région spectrale autour de 10  $\mu\text{m}$ . Evolution des bases de données pour la vapeur d'eau valable pour les positions et intensités.**

**\* les données de L.H. Coudert intégrées au BDD08 rassemblent les raies d'intensité les plus fortes jusqu'à  $1 \times 10^{-25}$   $\text{cm}/\text{molec}$ , les raies les plus faibles sont reprise d'HITRAN2004.**

Pour simplifier l'écriture dans la suite de cette partie, je ferai correspondre à :

- BDD04 : les versions HITRAN2004 [16] et GEISA03 [50]
- BDD08 : les versions HITRAN2008 [15] et GEISA09 [59]



## **Chapitre 1.**

# **Etude de l'intensité des raies d'absorption d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O dans la région spectrale de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup>.**

Le travail dans la région spectrale allant de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup> a été initié au GSMA par J.M. Flaud par un contrat<sup>7</sup> financé par le CNES en 2005/2006 en collaboration avec le LISA (Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques). Cette région spectrale est particulièrement intéressante car elle est centrée sur la bande de CH<sub>4</sub> détectable par IASI. Le but du travail de notre équipe était de déterminer la meilleure base de données pour l'exploitation des spectres IASI en mesurant en laboratoire de nouvelles données spectrales sur H<sub>2</sub><sup>16</sup>O. C'est pourquoi, notre travail s'est orienté uniquement sur l'étude puis la comparaison des raies listées et attribuées dans la base HITRAN.

Les données produites au LISA [60][61][62] et la base HITRAN2004 [16] montrent un important désaccord pour les intensités des raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O. La comparaison des intensités des raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O pour ces deux séries de données est présentée sur la Figure 36, en particulier le désaccord est de l'ordre de 20 % pour les raies d'absorption dont l'intensité est en dessous de  $1 \times 10^{-24}$  cm/molec (Figure 36). On remarque également une dispersion qui reste importante pour les raies les plus intenses.

---

<sup>7</sup> Choix de base de données pour GEISA-IASI : Etude des intensités des raies de la vapeur d'eau.

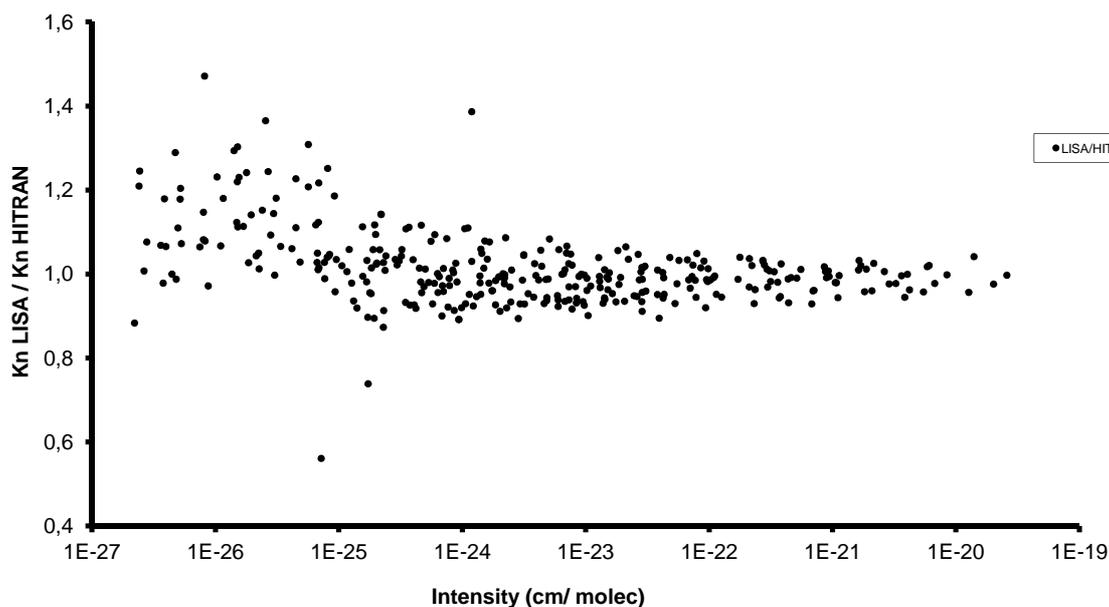


Figure 36 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  région spectrale 1200 – 1400  $\text{cm}^{-1}$ . Comparaison des intensités calculées du LISA [60][61][62] et HITRAN2004 [16] (figure de L. Régalia [63])

Pour être dans les meilleures conditions expérimentales, nous avons enregistré des spectres avec le STF du laboratoire, pour des parcours d'absorption allant de 3 cm jusqu'à 1000 m. Cette étude a été menée en deux temps :

- La première partie de ce travail, menée en 2005/2006 par L. Régalia [63], a permis d'enregistrer des spectres petits parcours (longueur maximum 36 m) et d'apporter de nouvelles mesures pour les raies fortes d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  de la région 1200 – 1400  $\text{cm}^{-1}$ . Mais ces mesures restent insuffisantes pour le choix de la base de données optimale pour le traitement des spectres IASI.
- Le couplage optique, entre le STF et la cellule de White de 50 m de base, fin 2007, a rendu possible l'enregistrement de spectres très long parcours (jusqu'à 1.6 km), et la mesure de raies faibles ( $1 \times 10^{-27}$   $\text{cm}/\text{molec}$ ) dans cette région spectrale. Cette seconde partie de l'étude s'est poursuivie dans le cadre du projet « Etude expérimentale et théorique du spectre d'absorption de la vapeur d'eau pour des applications atmosphériques : Paramètres spectroscopiques et Continuum » financé par le programme LEFE-ChAt<sup>8</sup> (2006-2009).

<sup>8</sup> Les Enveloppes Fluides et l'Environnement - Chimie et Atmosphère

# **1 Enregistrement des spectres et conditions expérimentales**

Les spectres ont été enregistrés avec le STF du laboratoire décrit dans la partie I de ce manuscrit, en utilisant des échantillons d'eau naturelle distillés. Pour répondre à la problématique proposée à notre équipe, c'est à dire la validation des bases de données LISA et HITRAN2004, diverses cellules ont été utilisées permettant d'atteindre des parcours d'absorption allant de 3 cm à 1000 m :

- cellules simples passages de 3 cm et 30 cm
- cellules de White de 1 m et de 50 m

Cette gamme de longueurs d'absorption a rendu possible les mesures spectrales d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O dans une gamme d'intensité allant de  $1 \times 10^{-19}$  cm/molec jusqu'à  $1 \times 10^{-26}$  cm/molec. Celle-ci permet de couvrir la majeure partie des raies d'absorption de la région 1200 – 1400 cm<sup>-1</sup>, et de proposer de nouvelles mesures d'intensité pour les raies faibles, qui présentent un désaccord important avec les bases de données (Figure 36). Pour chaque spectre enregistré dans le cadre de cette étude, les conditions expérimentales (longueur du parcours, température, pression et diamètre du diaphragme d'entrée) sont réunies dans le tableau ci-dessous :

| Spectre | Parcours d'absorption (m) | T (K) | H <sub>2</sub> O Pression (mbar) | Diamètre du diaphragme d'entrée (mm) |
|---------|---------------------------|-------|----------------------------------|--------------------------------------|
| 1       | 0.029                     | 295.2 | 2.81                             | 5.0                                  |
| 2       | 0.029                     | 295.4 | 5.46                             | 5.0                                  |
| 3       | 0.311                     | 295.8 | 2.11                             | 5.0                                  |
| 4       | 8.17                      | 297.3 | 1.27                             | 5.0                                  |
| 5       | 8.17                      | 297.5 | 2.68                             | 5.0                                  |
| 6       | 24.20                     | 297.5 | 2.65                             | 5.0                                  |
| 7       | 36.22                     | 297.7 | 2.72                             | 5.0                                  |
| 8       | 36.22                     | 297.5 | 20.14                            | 5.0                                  |
| 9       | 201.34                    | 290.0 | 13.38                            | 3.0                                  |
| 10      | 602.32                    | 289.4 | 13.51                            | 3.0                                  |
| 11      | 1002.82                   | 289.2 | 14.17                            | 3.0                                  |

**Table 11 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O région spectrale de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup> : Conditions d'enregistrement des spectres**

Pour mener à bien ce travail le STF a été équipé d'une optique adaptée en ZnSe (séparatrice et miroirs). Dans ce domaine spectral, la seule source à notre disposition est un Globar (bâtonnet de carbure de silicium). En effet la source tungstène étant enfermée dans une enceinte en quartz, elle n'émet pas en dessous de 3  $\mu\text{m}$ . Les difficultés instrumentales, notamment dans le réglage optique, dans cette région spectrale nous ont conduit à choisir avec précaution les conditions d'enregistrement des spectres. En particulier sur le choix des pressions de vapeur d'eau introduit dans la cuve :

- Pour les spectres de moyens parcours (1 à 8, Table 11). Pour mesurer les raies les plus fortes et pouvoir s'affranchir de l'influence de l'élargissement par la pression, les spectres ont été enregistrés avec des pressions basses.
- Pour les spectres longs parcours (9, 10 et 11, Table 11). En raison des difficultés rencontrées pour les réglages optiques avec la cellule de 50 m de base, nous avons préféré enregistrer ces spectres avec des pressions élevées. Dans ce cas l'influence de la fonction d'appareil, mal connue, est très minoritaire.

## **2 Restitution des paramètres de raie : rapports isotopiques**

Dans cette étude on s'intéresse plus particulièrement aux intensités des raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O qui est l'isotopologue majoritaire de la vapeur d'eau (abondance naturelle de 0.997). Les derniers travaux menés au laboratoire par A. Jenouvrier et al. (2007) [10] sur la vapeur d'eau a permis de montrer une pollution des parois des la cuve de 50 m de base. Cette pollution résulte d'une campagne de mesure réalisée courant 2007 avec des échantillons d'eau enrichis en deutérium. Ces espèces se sont fixées aux parois de la cuve et désorbent au contact de la vapeur d'eau. C'est pourquoi les pressions partielles des spectres 9, 10 et 11 de la Table 11 ont été contrôlées suivant la procédure décrite précédemment (Partie II, chap. 4, page 70 de ce manuscrit). Sur ces spectres seuls les isotopologues H<sub>2</sub><sup>16</sup>O, H<sub>2</sub><sup>18</sup>O, H<sub>2</sub><sup>17</sup>O et HD<sup>16</sup>O sont visibles. Puisque HD<sup>17</sup>O et HD<sup>18</sup>O présentent de très faibles proportions en abondance naturelle, respectivement  $1.16 \times 10^{-7}$  et  $6.23 \times 10^{-7}$ . On peut considérer qu'une légère augmentation de leur proportion n'influera pas sur la proportion d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O, et que leurs rapports isotopiques restent proches des rapports naturels.

Dans la région spectrale autour de 10 μm, les intensités pour la vapeur d'eau dans la base de données HITRAN2008 [15] proviennent des travaux de R.A. Toth [52]. L'ajustement des pressions partielles avec le logiciel « MultiFIT » a été réalisé en prenant ces valeurs d'intensité pour référence pour les espèces : H<sub>2</sub><sup>18</sup>O, H<sub>2</sub><sup>17</sup>O et HD<sup>16</sup>O. La valeur finale de la pression partielle d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O sera obtenue par :

$$P(H_2^{16}O) = P_{spectre} - [P(H_2^{18}O) + P(H_2^{17}O) + P(HD^{16}O) + P(HD^{17}O) + P(HD^{18}O)]$$

Comme cela a été évoqué au paragraphe précédant, les spectres longs parcours ont été enregistrés avec des pressions totales autour de 13 mbar. Or avec ces pressions l'influence de l'élargissement n'est plus négligeable, mais il est toujours possible d'ajuster les pressions partielles, à condition de mener une vérification supplémentaire. Le détail des rapports isotopiques obtenus pour ces spectres (9 à 11, Table 11) sont regroupés dans la table ci dessous :

| Spectre                  | H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O | H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O | H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O | HDO            |
|--------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|----------------|
| Abondance naturelle [64] | 0.9973                         | 0.001999                       | 0.000372                       | 0.000311       |
| 9                        | 0.9970                         | 0.00181 (9%)                   | 0.000355 (4%)                  | 0.000831 (62%) |
| 10                       | 0.9975                         | 0.00172 (14%)                  | 0.000357 (4%)                  | 0.000421 (26%) |
| 11                       | 0.9976                         | 0.00170 (15%)                  | 0.000321 (13%)                 | 0.000376 (17%) |

**Table 12 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O Région 1200 – 1400 cm<sup>-1</sup>. Rapports isotopiques obtenus sur les spectres 9, 10 et 11, enregistrés avec la cellule de 50m de base. Entre parenthèses, le pourcentage de différence entre le rapport isotopique du spectre et rapport naturel.**

Si on considère la moyenne des proportions expérimentales pour H<sub>2</sub><sup>16</sup>O on trouve 0.9973. Au final, la pollution de la cuve par les espèces HD<sup>16</sup>O, HD<sup>17</sup>O et HD<sup>18</sup>O, n'influe que très peu sur les mesures d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O. Vu que les pressions partielles n'ont pas été obtenues dans les conditions optimales, i. e. mesurées sur des spectres de basse pression, nous avons également mené une inter-comparaison entre les valeurs d'intensité d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O obtenues sur les spectres moyens parcours et sur les spectres longs parcours. L'inter-comparaison, présentée Table 13 pour des raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O isolées et bien définies montre une très bonne cohérence. Ce résultat conforte la conclusion de l'ajustement des pressions partielles. La proportion d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O dans les spectres enregistrés avec la cellule de 50 m de base est ainsi très proche de la valeur naturelle.

| Position (cm <sup>-1</sup> ) | Spectres long parcours<br>(9, 10 et 11)<br>S(Obs)cm/molec | Spectres petit parcours<br>(7, 8)<br>S(Obs) cm/molec | Différence (%) |
|------------------------------|---|--|----------------|
| 1225.820                     | 8.51×10 <sup>-25</sup>                                    | 8.44×10 <sup>-25</sup>                               | 0.8            |
| 1246.681                     | 1.91×10 <sup>-24</sup>                                    | 1.89×10 <sup>-24</sup>                               | 1.1            |
| 1261.924                     | 9.34×10 <sup>-25</sup>                                    | 9.25×10 <sup>-25</sup>                               | 0.9            |
| 1268.761                     | 2.24×10 <sup>-24</sup>                                    | 2.27×10 <sup>-24</sup>                               | 1.3            |
| 1284.426                     | 1.34×10 <sup>-24</sup>                                    | 1.33×10 <sup>-24</sup>                               | 0.7            |
| 1296.993                     | 8.81×10 <sup>-25</sup>                                    | 8.73×10 <sup>-25</sup>                               | 0.9            |
| 1322.557                     | 9.30×10 <sup>-24</sup>                                    | 9.38×10 <sup>-24</sup>                               | 0.8            |
| 1327.571                     | 1.76×10 <sup>-23</sup>                                    | 1.77×10 <sup>-23</sup>                               | 0.9            |
| 1334.610                     | 6.19×10 <sup>-25</sup>                                    | 6.26×10 <sup>-25</sup>                               | 1.1            |
| 1382.062                     | 3.00×10 <sup>-22</sup>                                    | 2.99×10 <sup>-22</sup>                               | 0.3            |

**Table 13 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O région spectrale 1200 – 1400 cm<sup>-1</sup>. Inter-comparaison des valeurs d'intensité d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O obtenues sur les spectres long parcours (9 à 11, Table 11) par rapport aux spectres moyens parcours (7 et 8, Table 11).**

### **3 Construction de la liste de transitions expérimentales**

Les spectres ont été analysés en méthode simple ou multi-spectres avec le logiciel « MultiFIT ». Dans la mesure du possible c'est l'ajustement multi-spectres qui a été privilégié, mais les raies les plus faibles mesurées dans cette étude n'ont pu être atteintes que sur le spectre n°11 de 1000 m de parcours d'absorption. Dans ce cas c'est un ajustement simple spectre qui a été réalisé.

Dans cette étude, l'analyse des transitions s'est focalisée sur les transitions listées et attribuées dans la base HITRAN. Le logiciel « MultiFIT » nous a permis d'obtenir directement les paramètres de raie au format HITRAN : à la température de référence de 296 K et corrigés du rapport isotopique. Compte tenu des incertitudes expérimentales liées à la mesure de la température et de la pression dans la cuve d'absorption, et de l'écart type de l'ajustement (pris multiplié par 3 fois), la précision des intensités mesurées est annoncée à 2.5 % pour des transitions isolées et bien définies.

Avec l'ensemble des spectres enregistrés pour cette région spectrale, la gamme d'intensité mesurée s'étend entre  $5 \times 10^{-20}$  cm/molec et  $6 \times 10^{-27}$  cm/molec à 296 K. Un ensemble de plus de 340 transitions ont été mesurées et sont résumées dans la table ci-dessous :

| Bande            | Nb de transitions mesurées | Position HITRAN (cm <sup>-1</sup> ) |           | Intensités mesurées (cm/molec) |                        |
|------------------|----------------------------|-------------------------------------|-----------|--------------------------------|------------------------|
|                  |                            | Min                                 | Max       | Min                            | Max                    |
| <b>010 – 000</b> | 237                        | 1200.8117                           | 1399.2042 | $1.09 \times 10^{-26}$         | $5.14 \times 10^{-20}$ |
| <b>020 – 010</b> | 104                        | 1205.0273                           | 1384.1703 | $6.74 \times 10^{-27}$         | $7.74 \times 10^{-23}$ |
| <b>000 – 000</b> | 5                          | 1217.0055                           | 1288.6644 | $2.91 \times 10^{-26}$         | $6.39 \times 10^{-26}$ |
| <b>030 – 020</b> | 4                          | 1298.6603                           | 1366.2742 | $2.84 \times 10^{-26}$         | $5.40 \times 10^{-26}$ |
| <b>100 – 010</b> | 1                          | 1247.8814                           | 1247.8814 | $9.27 \times 10^{-26}$         | $9.27 \times 10^{-26}$ |
| <b>001 – 010</b> | 1                          | 1200.8117                           | 1298.1172 | $1.31 \times 10^{-25}$         | $1.31 \times 10^{-25}$ |

**Table 14 : Transitions d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O mesurées dans la région spectrale de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup>.**

## **4 Comparaison des intensités mesurées d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O avec les données de la littérature**

Les références des données insérées dans les bases spectroscopiques HITRAN et GEISA sont listées dans la Table 10, présentée page 93. Les bases de données les plus récentes, que je noterai BDD08 [15][59], présentent des données comparables. Elles listent pour l'isotopologue principal dans la gamme 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup> les intensités publiées par L.H. Coudert et al. (2008) [58] (raies d'intensité de  $1 \times 10^{-19}$  cm/molec à  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec) et celles compilées par R.A. Toth [52] pour les raies les plus faibles. Hormis ces données peu de travaux expérimentaux sont disponibles dans la littérature :

- Liste Stewart (2003) [51] : proposée en liste alternative pour H<sub>2</sub>O dans la région spectrale de IASI, disponible dans les archives de GEISA/IASI 03.
- Les données du LISA : L.H. Coudert (1999) [60], J-M. flaud et al. (2003) [61] et R. Lanquetin et al. (2001) [62]. C'est l'écart entre ces données et la base HITRAN2004, présenté à la Figure 36, qui a motivé dès 2005 les travaux sur cette région dans notre laboratoire.
- R.A. Toth et al. (2011) [65] : nouvelles mesures de la bande  $\nu_2$  et  $2\nu_2-\nu_2$ .

Des comparaisons ont été menées avec chacune de ces références et sont présentés dans la suite de ce paragraphe. La Table 15 résume ces comparaisons :

|                       | Bande 010-000     |                                  | Bande 020-010     |                                  |
|-----------------------|-------------------|----------------------------------|-------------------|----------------------------------|
|                       | Nb de transitions | S(Littérature)/S(Obs)<br>(moyen) | Nb de transitions | S(Littérature)/S(Obs)<br>(moyen) |
| BDD04 [15][59]        | 237               | 1.024                            | 104               | 1.006                            |
| LISA [60] [61] [62]   | 237               | 1.057                            | 104               | 0.985                            |
| B.C. Stewart [58]     | 237               | 0.998                            | 104               | 0.982                            |
| PS / BT2 [38][39][67] | 237               | 1.022                            | 104               | 0.990                            |
| L.H. Coudert (2008)   | 149               | 0.987                            | 71                | 0.974                            |
| R.A. Toth (2011) [65] | //                | //                               | 83                | 0.006                            |

Table 15 : Comparaisons menées entre la liste d'intensités mesurée de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup> et les données de la littérature.

#### **4.a Comparaison de l'apport des mesures réalisées au LISA : données 2005 et données de L.H. Coudert, parues en 2008**

Dans un premier temps, il paraît important de visualiser l'apport des données récemment publiées par L.H. Coudert et al. (2008) [58] par rapport aux données LISA [60][61][62] disponibles en 2005, auxquelles cet auteur avait participé. La comparaison de ces données avec les bases BDD04 (HITRAN2004 et GEISA03) [16][50], à la Figure 37, montre une amélioration de la dispersion du rapport d'intensité pour les raies ayant une intensité de  $1 \times 10^{-19}$   $\text{cm}/\text{molec}$  jusqu'à  $1 \times 10^{-22}$   $\text{cm}/\text{molec}$ . Cependant on observe pour les données parues en 2008 [58], que le rapport d'intensité décroît de manière linéaire pour les raies d'intensité de  $1 \times 10^{-19}$   $\text{cm}/\text{molec}$  à  $1 \times 10^{-24}$   $\text{cm}/\text{molec}$ . Pour les raies d'intensité les plus fortes l'accord avec les BDD04 est de quelques pourcents, alors que pour les raies d'intensité vers  $1 \times 10^{-24}$   $\text{cm}/\text{molec}$  l'écart se creuse et atteint plus de 10 %. En outre, la Figure 37 permet de constater que la gamme d'intensité mesurée par L.H. Coudert et al. [58] en 2008 s'étend pour des raies d'intensité allant de  $1 \times 10^{-19}$   $\text{cm}/\text{molec}$  jusqu'à  $1 \times 10^{-25}$   $\text{cm}/\text{molec}$ . Les raies d'intensité les plus faibles, ou se concentrent les écarts entre les données de 2005 du LISA et HITRAN2004 (Figure 36) n'ont donc pas été remesurées par ces auteurs.

Il est également intéressant de comparer les raies d'absorptions d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  mesurées par notre étude aux deux séries de données provenant de l'équipe du LISA. Cette comparaison est présentée à la Figure 38. Les valeurs d'intensités récentes de L.H. Coudert et al. (2008) [58] montrent un meilleur accord avec nos mesures que les données de 2005. Si l'on considère la Figure 37 et la Figure 38, on peut conclure que les données de L.H. Coudert ont permis d'améliorer les données précédentes du LISA disponibles en 2005. En particulier pour les raies d'intensité allant de  $1 \times 10^{-19}$   $\text{cm}/\text{molec}$  jusqu'à  $1 \times 10^{-24}$   $\text{cm}/\text{molec}$ , les données de L.H. Coudert et al. (2008) présentent un meilleur accord avec les BDD04, ainsi qu'avec nos mesures, que les données du LISA de 2005. Pour ces raies, l'écart constaté entre nos données ( $S(\text{Obs})$ ) et les données du LISA de 2005 est de l'ordre de 5 %. Alors que cet écart est presque totalement absent si l'on considère le rapport d'intensité avec Les données de L.H. Coudert et al. (2008) [58]. Cependant pour les raies les plus faibles mesurées par l'équipe du LISA, que ce soit en 2005 ou en 2008, on constate sur la Figure 37 et la Figure 38, que la dispersion reste aux alentours de 15 %. Le travail mené par L.H. Coudert et al. en 2008, n'a donc pas permis d'améliorer les intensités des raies d'absorption en  $10^{-25}$   $\text{cm}/\text{molec}$ .

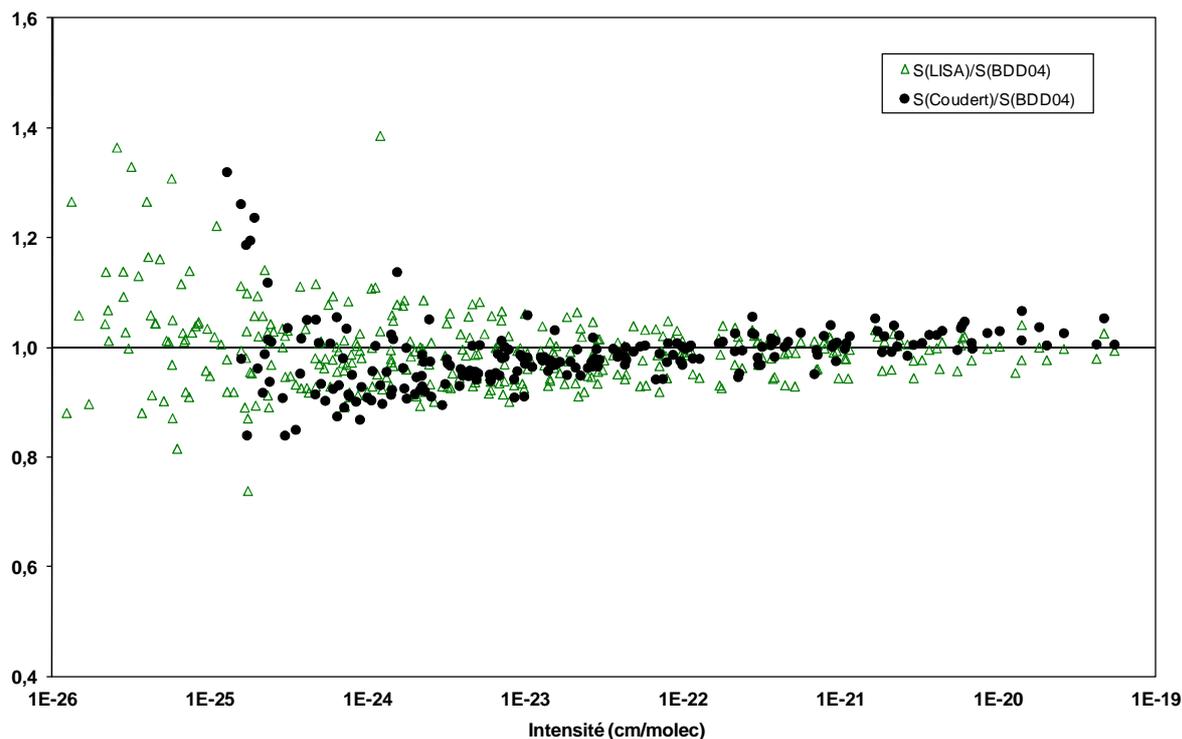


Figure 37 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale 1200 – 1400  $\text{cm}^{-1}$  : Comparaison des intensités des BDD04 (HITRAN2004 [16], GEISA03 [50]) avec les données LISA de 2005 [60][61][62] et les données L.H. Coudert et al. (2008) [58].

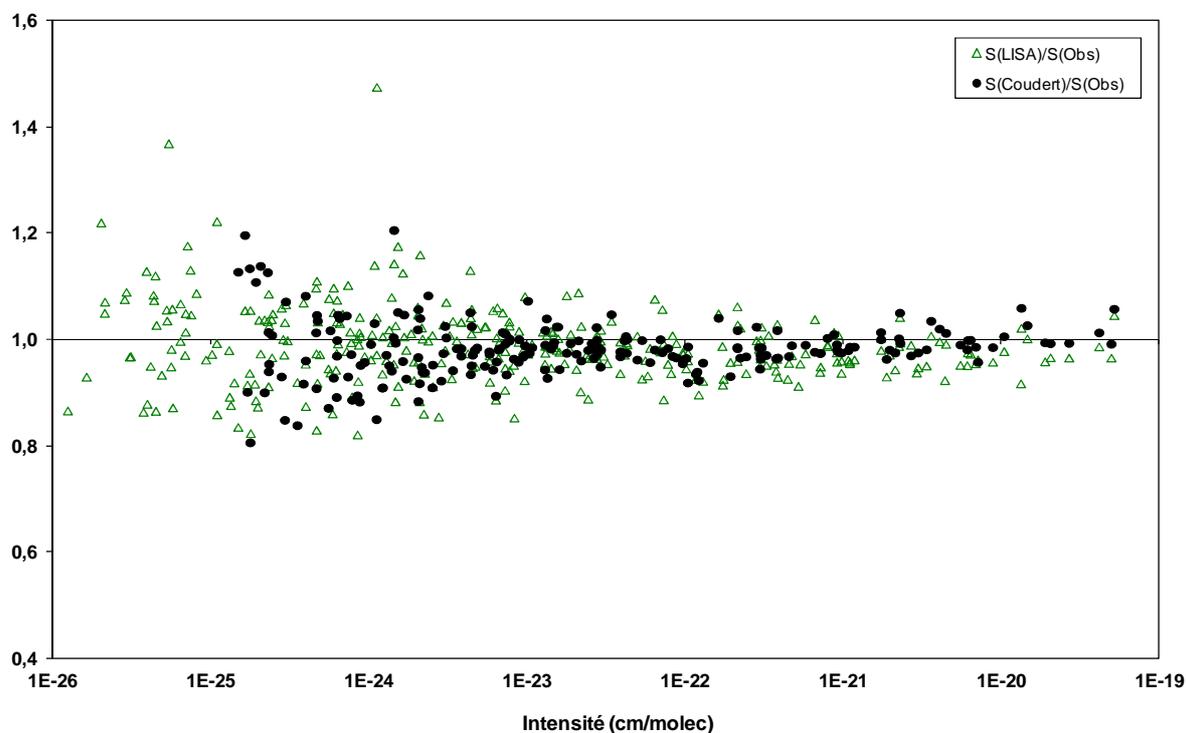


Figure 38 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale 1200 – 1400  $\text{cm}^{-1}$  : Comparaison des données LISA (2005) [60][61][62] et L.H Coudert et al.(2008) [58] avec nos mesures S(Obs).

## **4.b** *Détail des comparaisons bande par bande*

Dans la région spectrale de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup>, deux bandes en particulier sont majoritaires : les bandes  $\nu_2$  et  $2\nu_2 - \nu_2$ . La Figure 39 et la Figure 40 présentent pour ces deux bandes séparément, la comparaison des rapports d'intensité entre nos mesures avec les BDD04 [16][50], et les données L.H. Coudert et al. (2008) [58].

### **.4.b.1** *Bande $\nu_2$*

Pour la bande  $\nu_2$  l'accord entre nos mesures d'intensité et les données de L.H. Coudert et al. est très bon de l'ordre de 3 à 5 %, comme le montre la Figure 39. Cette bande regroupe également les raies les plus fortes de la région spectrale allant de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup>. Enfin si on considère les BDD04, nos mesures montrent également un bon accord de l'ordre de quelques pourcents, quelle que soit l'intensité des raies d'absorption.

### **.4.b.2** *Bande $2\nu_2 - \nu_2$*

La situation pour la bande  $2\nu_2 - \nu_2$  est très différente (Figure 40). En effet, on observe un écart très important entre nos mesures et les données de L.H. Coudert et al. Dans la région spectrale de notre étude la bande  $2\nu_2 - \nu_2$  présente des absorptions plus faibles. C'est donc cette bande en particulier qui apporte de la dispersion dans la comparaison entre les données de L.H. Coudert de 2008 et nos mesures. Au contraire avec les bases de données BDD04, nos mesures sont en bon accord de l'ordre de 5 %, quel que soit l'intensité des raies. Puisque ce sont les intensités proposées par L.H. Coudert et al. [58] qui sont listées dans les BDD08 [15][59], la Figure 40 permet de montrer que la bande  $2\nu_2 - \nu_2$  reste mal définie dans ces bases de données.

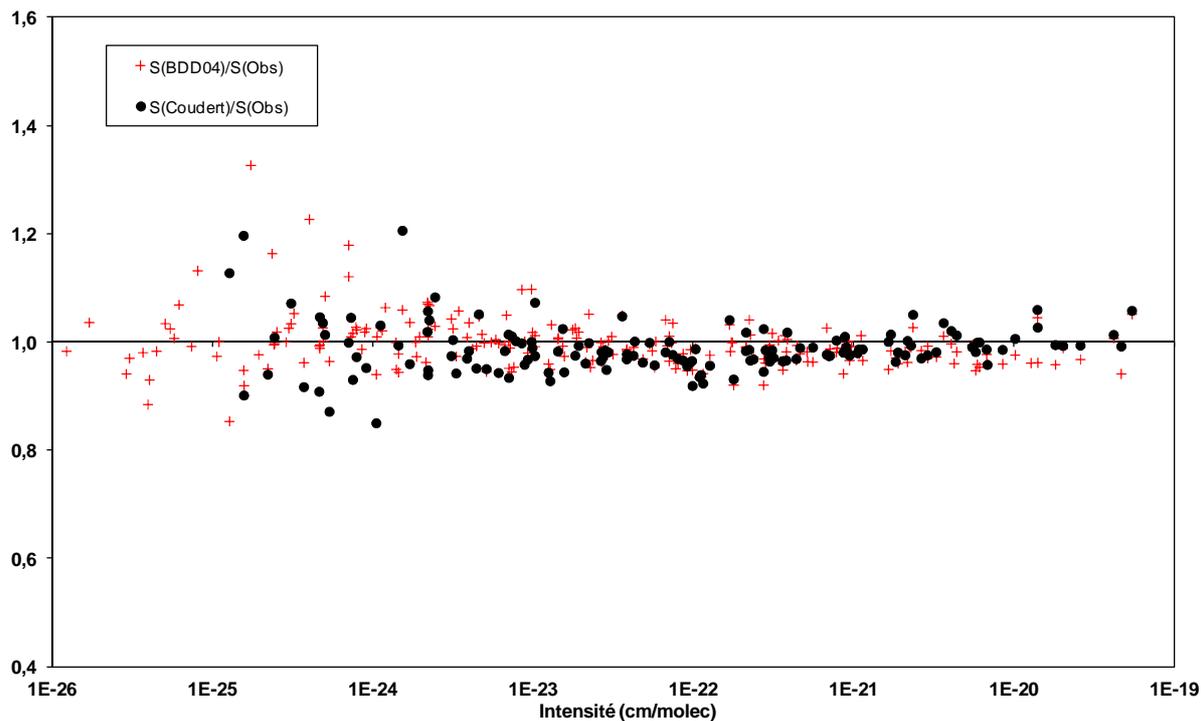


Figure 39 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale 1200 – 1400  $\text{cm}^{-1}$  : Rapports d'intensité pour la bande  $\nu_2$  entre nos mesures S(Obs) et les bases spectroscopiques BDD04 ([16][50]) ou L.H. Coudert et al. (2008) [58]

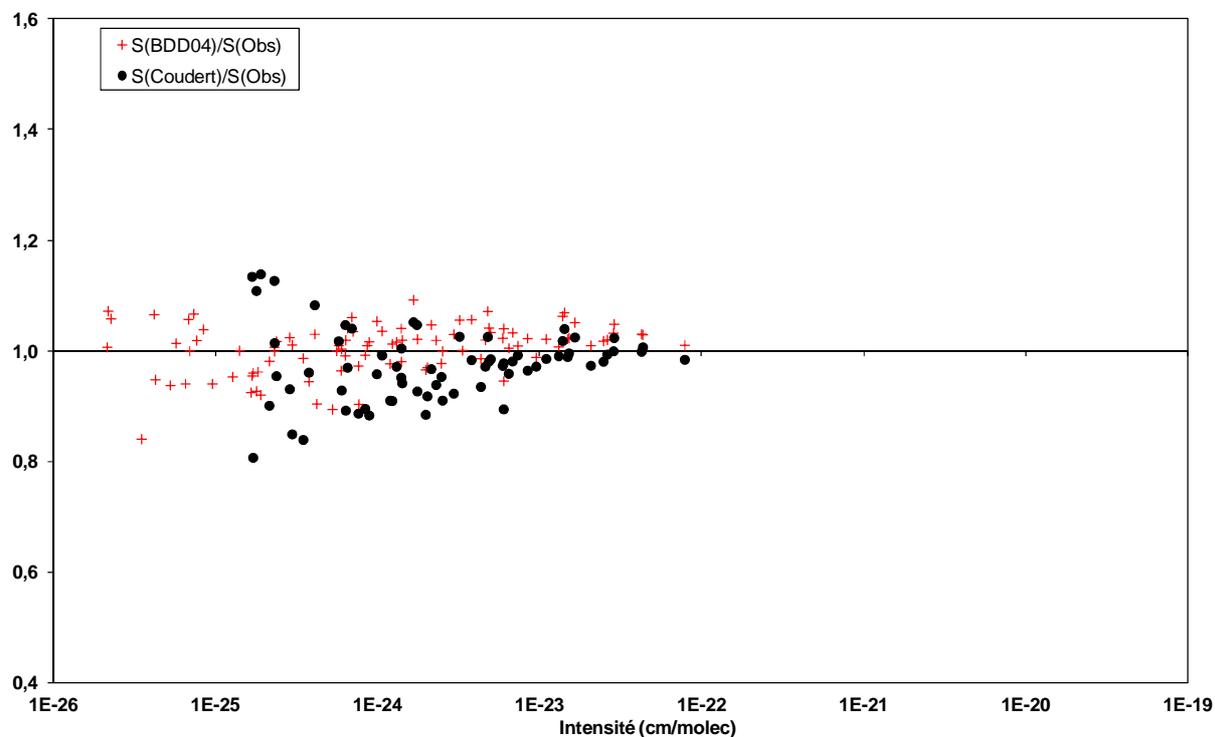
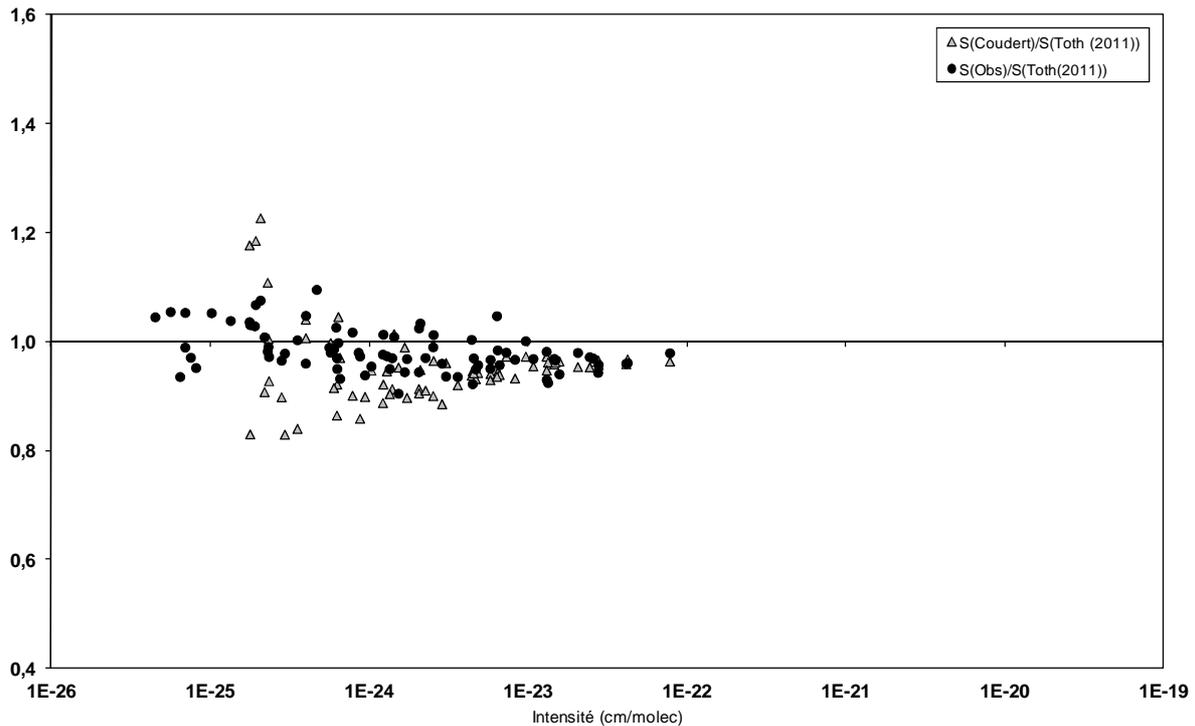


Figure 40 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale 1200 – 1400  $\text{cm}^{-1}$ . Rapports d'intensité pour la bande  $2\nu_2 - \nu_2$  entre nos mesures S(Obs) et les bases spectroscopiques BDD04 ([16][50]) ou L.H. Coudert et al. (2008) [58]

### **.4.b.3 Etude des bandes $\nu_2$ et $2\nu_2 - \nu_2$ par R.A. Toth et al. (2011) [65]**

Ce travail a été mené à la suite de la publication des travaux de L.H. Coudert et al. (2008) [58] et de nos mesures [7] parues en 2010. R.A. Toth a de nouveau analysé les spectres enregistrés pour les études précédentes [53][57], dans la région spectrale de 780 à 1900 cm<sup>-1</sup>, mais en modifiant le programme d'ajustement afin qu'il tienne compte d'un problème de 0 % de transmission sur les spectres. Bien entendu, cette correction a particulièrement influé sur l'intensité observée des raies d'intensité les plus fortes allant de  $1 \times 10^{-20}$  à  $1 \times 10^{-19}$  cm/molec. Ainsi, les intensités de ces raies obtenues en 2011 sont de 5 % plus hautes que les valeurs obtenues précédemment. Le centre des bandes  $\nu_2$  et  $2\nu_2 - \nu_2$  se situent autour de 1600 cm<sup>-1</sup>, hors de la région spectrale de notre étude (1200 à 1400 cm<sup>-1</sup>). Ainsi peu de raies d'intensités de l'ordre de  $1 \times 10^{-20}$  ou  $1 \times 10^{-19}$  cm/molec ont été atteintes. Pour ce point particulier notre étude ne permet pas d'apporter une conclusion.

Cependant, l'étude récente de R.A. Toth et al. (2011) [65] reprend les raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O pour des intensités allant de  $1 \times 10^{-19}$  cm/molec jusqu'à  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec. La comparaison entre ces données et les intensités de L.H. Coudert et al. (2008) [58] pour la bande  $\nu_2$  montre un très bon accord, de l'ordre de 4 %. Ce résultat rejoint notre conclusion puisque nos mesures sont en moyenne entre 3 à 5% des données de L.H. Coudert et al. (2008). Ensuite pour la bande  $2\nu_2 - \nu_2$ , R.A. Toth et al. (2011) montre un désaccord entre ses nouvelles données et les intensités de L.H. Coudert et al. (2008). L'écart entre les deux séries de données atteint jusqu'à 15 % pour les raies d'absorption de l'ordre de  $1 \times 10^{-24}$  cm/molec, ce qui est semblable à la conclusion de la Figure 40, comparant nos mesures aux données de L.H. Coudert et al. (2008).



**Figure 41 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale 1200 – 1400  $\text{cm}^{-1}$ . Bande  $2\nu_2 - \nu_2$ . Rapports d'intensité entre nos mesures et R.A. Toth et al. (2011), en noir, ou entre L.H. Coudert et al. (2008) et R.A. Toth (2011), en gris.**

La Figure 41 regroupe les comparaisons entre nos intensités et les intensités proposées par L.H. Coudert et al. (2008) [58] et les données de R.A. Toth (2011) [65]. Les intensités R.A. Toth et al. (2011), sont finalement très proches des données listées dans les bases BDD04 [16][50]. Bien que ces nouvelles données aient été remesurées, la correction appliquée en raison d'un problème de saturation des spectres affecte principalement les raies d'intensité allant de  $1 \times 10^{-20}$   $\text{cm}/\text{molec}$  jusqu'à  $1 \times 10^{-19}$   $\text{cm}/\text{molec}$ . R.A. Toth confirme ainsi les valeurs d'intensités mesurées pour la bande  $2\nu_2 - \nu_2$  entre les travaux menés en 1998 [53] et en 2011 [65]. Cela semble confirmer que les données de L.H. Coudert présentent des écarts pour cette bande et que ses données, intégrées dans les BDD08 [15][59], doivent être reconsidérées.

#### **4.c Comparaison avec la liste de Stewart et les intensités calculées**

La liste de Stewart (2003) proposée en liste alternative pour GEISA/IASI 03 [50], présente peu de différences avec les données présentes dans GEISA 03. Cette liste alternative regroupe uniquement des données pour la vapeur d'eau dans la région spectrale de l'instrument IASI. La comparaison entre ces deux séries de données et nos mesures est donnée à la Figure 42. La dispersion avec des données de B.C. Stewart (2003) [51] est globalement plus grande qu'avec les données de GEISA03, et plus particulièrement pour les raies d'intensités inférieures à  $1 \times 10^{-22}$  cm/molec. Pour l'isotopologue principal, la liste GEISA03 sera préférée à la liste alternative de B.C. Stewart (2003).

Des comparaisons ont été également menées avec les intensités théoriques de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39] ainsi que la liste BT2 [66]. Pour la région spectrale de cette étude ces deux listes présentent des valeurs d'intensités équivalentes (moins de 0,4 % de différence, quelle que soit la valeur des intensités des raies). La comparaison entre les valeurs calculées et nos mesures d'intensité, Figure 43, montre un accord de l'ordre de 5 %. Pour quelques raies faibles on remarque des écarts plus grands, qui sont présents pour l'une ou l'autre des sources d'intensités calculées.

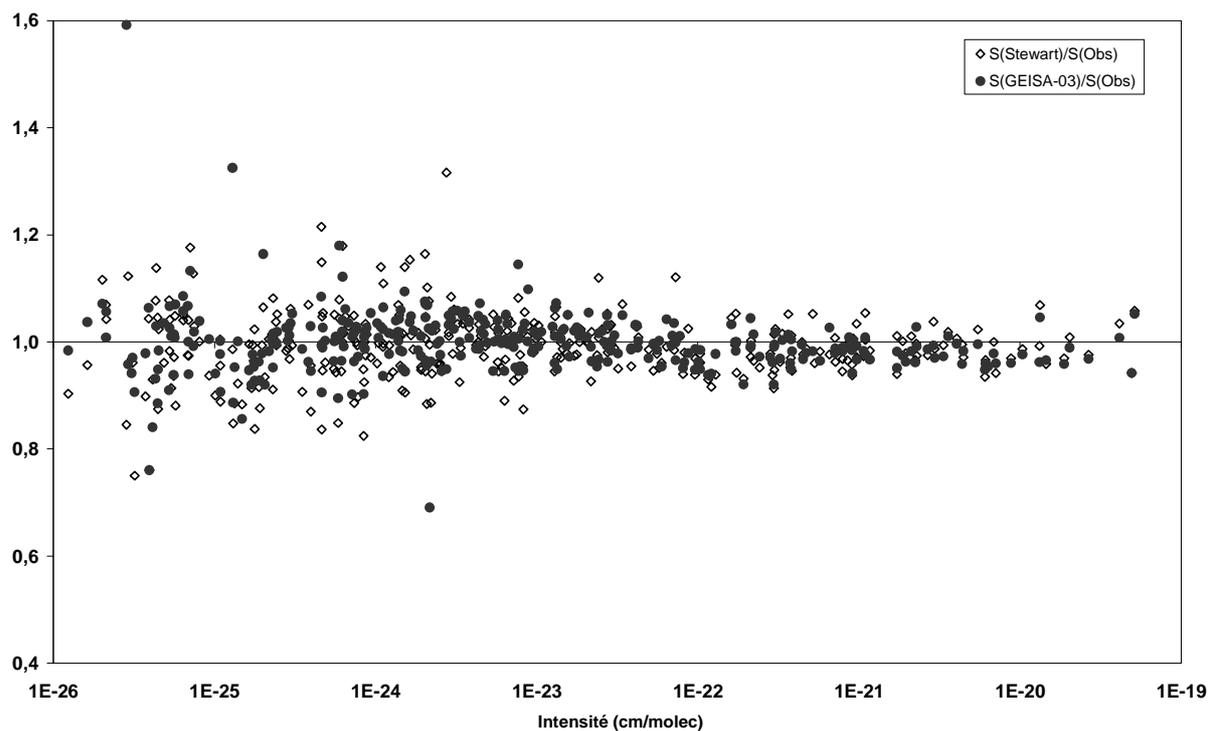


Figure 42 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O Région spectrale 1200 – 1400 cm<sup>-1</sup>. Rapports d'intensités entre nos mesures et GEISA 03 [50] et la liste alternative proposée par Stewart (2003) [51].

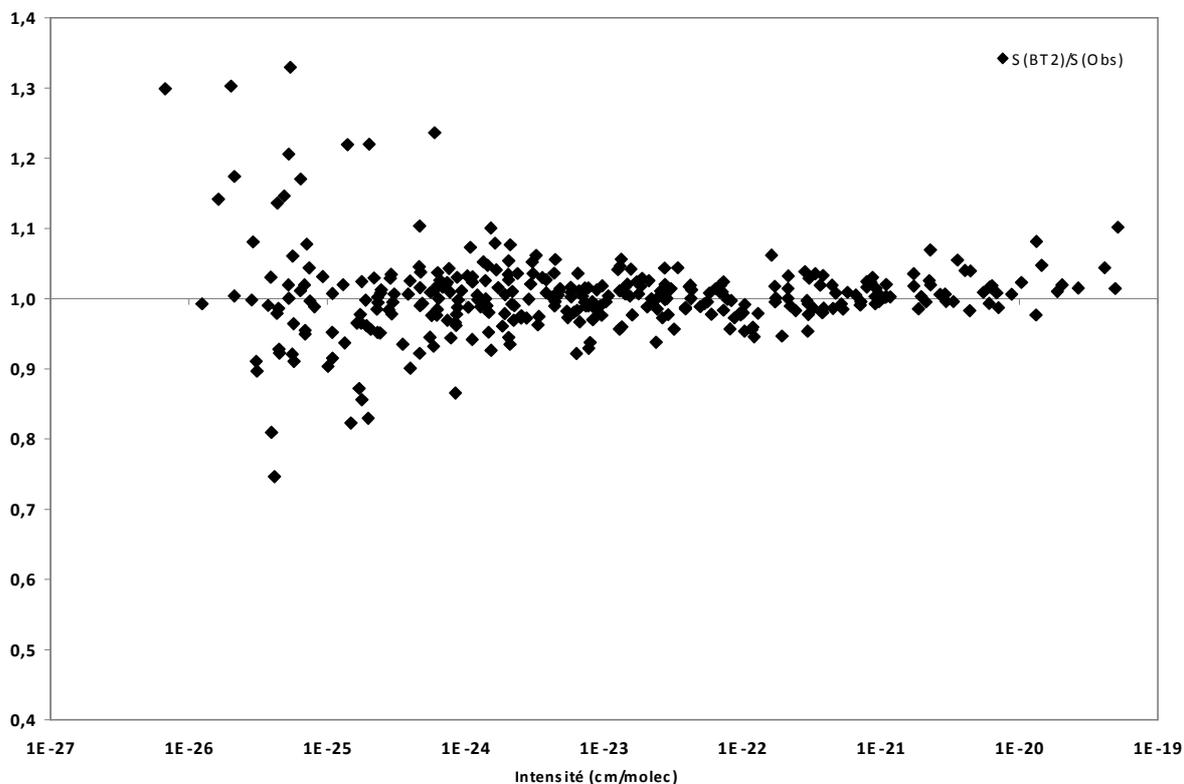
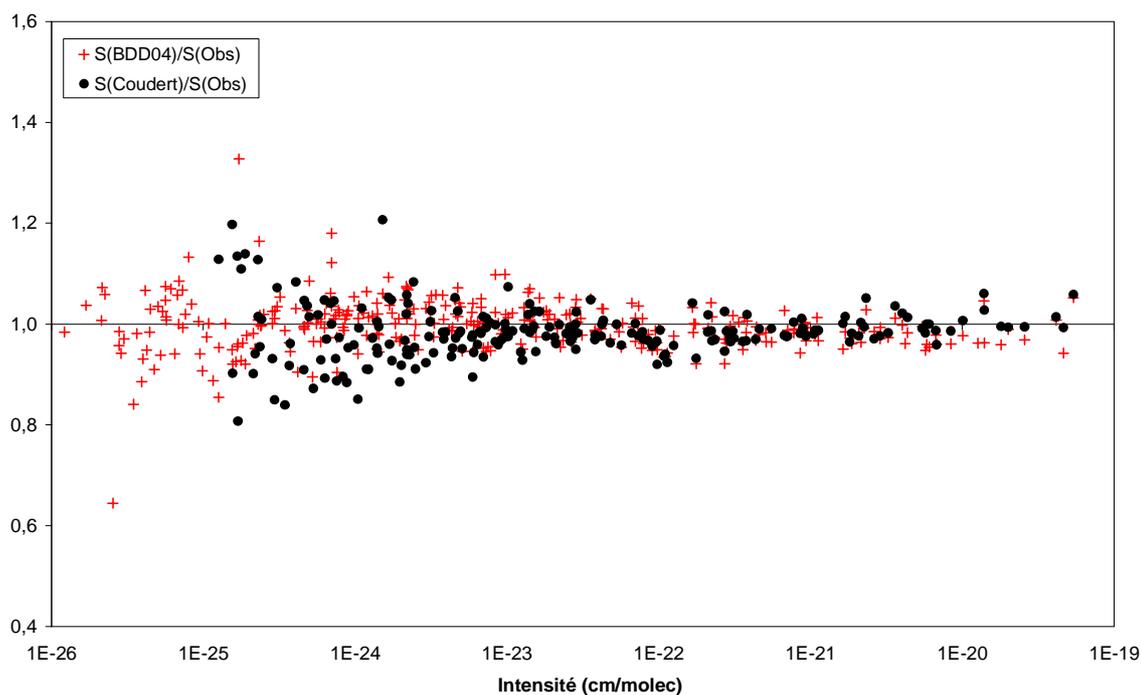


Figure 43 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O Région spectrale 1200 – 1400 cm<sup>-1</sup>. Rapport d'intensité entre nos mesures et les valeurs d'intensités théoriques des listes BT2 [66] ou PS [38][39].

## **5 Eléments de réponse. Choix de la base de données spectroscopique pour l'analyse des spectres IASI.**

L'étude sur la région spectrale de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup>, a permis de mesurer environ 340 raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O d'intensités allant de 1×10<sup>-19</sup> cm/molec jusqu'à 1×10<sup>-26</sup> cm/molec. La liste complète des transitions mesurées dans ce travail est disponible dans les annexes de ce manuscrit (à partir de la page 229).

L'ensemble des raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O mesurées pour la région de 1200 – 1400 cm<sup>-1</sup> sont présentées à la Figure 44. Notre travail a ainsi permis de proposer de nouvelles intensités pour les raies d'intensité faibles, qui n'ont pas été revues par L.H. Coudert et al. [58]. Ces raies, environ une centaine, font référence dans les BDD08 à la liste compilée par R.A. Toth [52].



**Figure 44 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O Région spectrale 1200 – 1400 cm<sup>-1</sup>. Pour l'ensemble des raies mesurées dans cette étude, rapports d'intensité entre nos mesures et les données HITRAN2004 [16] ainsi que les données publiées par L.H. Coudert [58].**

Les comparaisons menées entre nos mesures et les BDD08 ont montré une bonne cohérence générale des raies de forte intensité allant de  $1 \times 10^{-23}$  à  $1 \times 10^{-19}$   $\text{cm}/\text{molec}$ , avec en moyenne 3 % d'écart. Cependant pour les raies de plus faibles intensités, la dispersion avec les BDD08 reste de l'ordre de 15 %. Nous avons montré que ces écarts provenaient principalement de la bande  $2\nu_2 - \nu_2$ . Pour cette bande, les comparaisons entre nos mesures [7] et les données de R.A. Toth et al. (2011) [65] ou les BDD04 [16][50], présentent une bonne cohérence. Ce point confirme que les intensités proposées par L.H. Coudert et intégrées aux BDD08 [15][59] doivent être reconsidérées.

Pour revenir à la question qui a motivé cette étude, c'est à dire : qu'elle est la meilleure base de données à utiliser pour l'analyse des données IASI ? Nous pouvons apporter quelques éléments de réponse grâce à l'étude menée au laboratoire. Les bases spectroscopiques BDD08, ont toutes deux intégré les valeurs d'intensité des travaux de L.H. Coudert et al. (2008) [58] et de R.A. Toth [52] pour l'isotopologue principal. Elles sont donc comparables. Les comparaisons menées dans ce chapitre ont permis de montrer que pour les raies fortes nos mesures [7] d'intensité sont en très bon accord avec les bases de données spectroscopiques. Cependant les raies d'intensité allant de  $1 \times 10^{-25}$  à  $1 \times 10^{-26}$   $\text{cm}/\text{molec}$ , présentent des écarts pouvant aller jusqu'à 15 %. Afin de fournir la meilleure liste de données pour l'analyse des spectres IASI, les raies d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  de faibles intensités dans cette région spectrale doivent être revues dans les bases de données récentes [15][59]. Ce point est confirmé par les travaux récents de R.A. Toth parus en 2011 [65] qui confirme les valeurs des intensités des raies faibles listées dans les bases BDD04.

## **Chapitre 2.**

# **Etude des isotopologues H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O** **dans la région spectrale 1000 – 2300 cm<sup>-1</sup>.**

L'étude des isotopologues H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O dans la fenêtre spectrale de l'instrument IASI a été menée au laboratoire durant l'année 2010-2011. Ce travail est soutenu par le programme LEFE-ChAt « Spectroscopie de l'eau pour les inversions atmosphériques » (2011-2013). C'est l'isotopologue H<sub>2</sub><sup>18</sup>O qui a motivé en priorité ce travail de mesure, car il montre une absorption très importante dans la région spectrale du sondeur IASI, plus particulièrement de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup> (Figure 35, second panneau). De plus, le nombre de transitions attribuées à cet isotopologue reste largement incomplet dans les bases de données spectroscopiques. D'autre part, dans l'atmosphère terrestre, la quantité d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O peut être utilisée comme un marqueur des événements météorologiques tels que les tempêtes ou les ouragans, ce qui nécessite une connaissance précise de ses paramètres spectroscopiques.

Les données présentes dans les bases de données récentes BDD08 (HITRAN2008 [15] ou GEISA09 [59]) restent assez limitées et ne concernent que les raies les plus fortes de cette région spectrale. Hormis les données de R.A. Toth [52] intégrées aux bases de données, il existe peu d'autres listes de données expérimentales disponibles dans la littérature pour ces isotopologues. Seul le travail mené par A.W. Liu et al. (2006) [73] dans la région de 1080 à 7800 cm<sup>-1</sup>, propose une liste de valeurs d'intensité expérimentales pour H<sub>2</sub><sup>18</sup>O.

Cette étude se propose de revisiter complètement la région spectrale de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup> afin de fournir une nouvelle liste de données expérimentales pouvant être intégrée aux bases de données spectroscopiques afin d'améliorer les traitements atmosphériques. l'isotopologue HD<sup>18</sup>O est apparu en assez forte abondance et a été inclus à ce travail.

## **1 Conditions expérimentales**

Dans un échantillon d'eau naturelle le rapport isotopique d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O est donné à 0,2%. Afin de mesurer un grand nombre de transitions de cet isotologue et pour une gamme d'intensité de plusieurs décades il a été choisi de travailler avec des échantillons commerciaux d'eau enrichie en <sup>18</sup>O annoncé à 95 % (<http://www.eurisotop.com>). Un ensemble de 32 spectres ont été enregistrés avec le STF du laboratoire dans la région de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup>. En raison des limitations des éléments optiques (filtres et séparatrices), la région spectrale globale de ce travail a été subdivisée en trois parties : n°1 de 1000 à 1200 cm<sup>-1</sup>, n°2 de 1200 et 1400 cm<sup>-1</sup> et n°3 de 1400 à 2300 cm<sup>-1</sup>. L'optique utilisée pour ces enregistrements est résumée dans la Table 16. Les zones de recouvrements entre ces différentes bandes spectrales ont permis de vérifier la cohérence des résultats sur l'ensemble de la gamme spectrale étudiée (Figure 45). Enfin pour s'assurer de la précision de la mesure des intensités, il est également important de vérifier que le zéro de transmission est correct. Le zéro de transmission peut être observé pour les raies saturées comme le montre un détail du spectre 2g (Figure 46). Enfin, plusieurs cellules d'absorption ont été utilisées : les cellules simples passages de 3 et 30 cm ainsi que la cellule de White de 1 m de base, qui a permis d'atteindre les parcours d'absorption de 4 m jusqu'à 36 m. L'ensemble des conditions expérimentales pour chaque spectre est réuni dans la Table 17.

| Région | Détecteur | Source | Séparatrice      | Lentilles/fenêtre      |
|--------|-----------|--------|------------------|------------------------|
| 1      | HgCdTe    | Globar | ZnSe             | ZnSe, BaF <sub>2</sub> |
| 2      | HgCdTe    | Globar | ZnSe             | ZnSe, BaF <sub>2</sub> |
| 3      | HgCdTe    | Globar | CaF <sub>2</sub> | BaF <sub>2</sub>       |

**Table 16 : Spectres enrichis <sup>18</sup>O. Détail des éléments optiques utilisés pour l'enregistrement des spectres.**

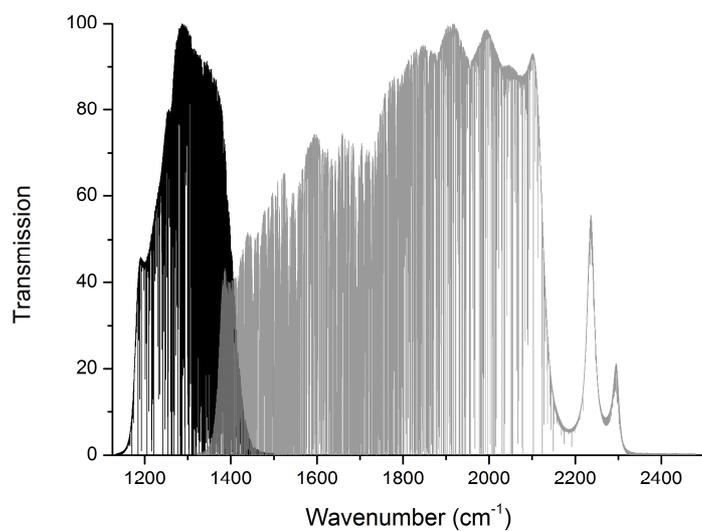


Figure 45: Exemples de spectres enregistrés dans les régions n°2 (1200 – 1400 cm<sup>-1</sup>) et n°3 (1400 – 2300 cm<sup>-1</sup>).

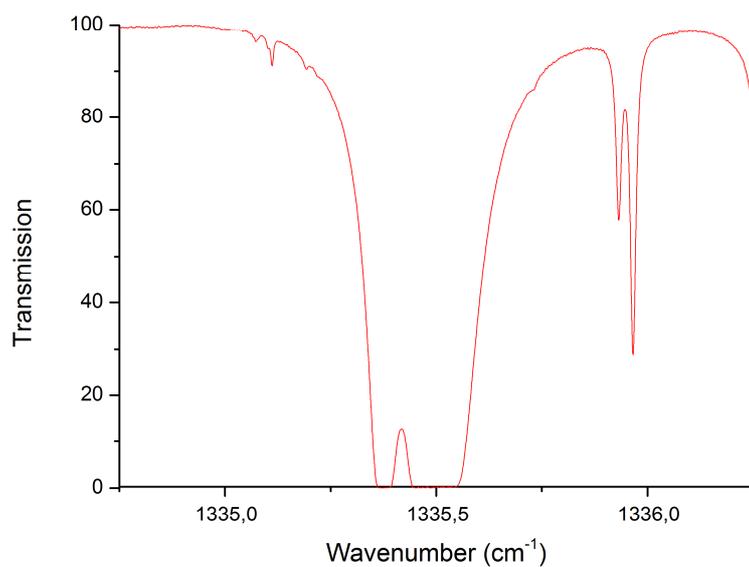


Figure 46: Détail du spectre 2g montrant le zéro de transmission observé sur deux transitions saturées.

|   | Spectre | Parcours<br>d'absorption (m) | Température<br>(K) | Pression<br>(mbar) |
|---|---------|------------------------------|--------------------|--------------------|
| <b>Région 1</b><br><b>900 – 1300</b><br><b>cm<sup>-1</sup></b>  | 1a      | 4.17                         | 294.8              | 13.303             |
|   | 1b      | 4.17                         | 294.6              | 6.718              |
|   | 1c      | 32.21                        | 294.8              | 13.383             |
|   | 1d      | 32.21                        | 294.7              | 6.721              |
|   | 1e      | 32.21                        | 294.7              | 2.723              |
| <b>Région 2</b><br><b>1200 – 1400</b><br><b>cm<sup>-1</sup></b> | 2a      | 0.297                        | 293.9              | 13.429             |
|   | 2b      | 0.297                        | 293.5              | 6.665              |
|   | 2c      | 0.297                        | 293.2              | 2.676              |
|   | 2d      | 4.17                         | 292.7              | 13.432             |
|   | 2e      | 4.17                         | 292.7              | 6.732              |
|   | 2f      | 4.17                         | 292.8              | 2.686              |
|   | 2g      | 12.18                        | 293.1              | 13.522             |
|   | 2h      | 12.18                        | 293.2              | 6.679              |
|   | 2i      | 12.18                        | 293.2              | 2.611              |
|   | 2j      | 36.22                        | 293.1              | 13.306             |
|   | 2k      | 36.22                        | 293.3              | 6.675              |
|   | 2l      | 36.22                        | 293.2              | 2.692              |
| <b>Région 3</b><br><b>1350 – 2400</b><br><b>cm<sup>-1</sup></b> | 3a      | 0.028                        | 293.7              | 13.351             |
|   | 3b      | 0.028                        | 293.3              | 6.873              |
|   | 3c      | 0.028                        | 292.5              | 2.671              |
|   | 3d      | 0.297                        | 293.7              | 13.451             |
|   | 3e      | 0.297                        | 293.3              | 6.654              |
|   | 3f      | 0.297                        | 293.5              | 2.683              |
|   | 3g      | 4.17                         | 293.1              | 13.469             |
|   | 3h      | 4.17                         | 293.1              | 6.386              |
|   | 3i      | 4.17                         | 293.0              | 2.538              |
|   | 3j      | 12.18                        | 293.4              | 13.503             |
|   | 3k      | 12.18                        | 293.2              | 6.734              |
|   | 3l      | 12.18                        | 293.1              | 2.728              |
|   | 3m      | 36.22                        | 292.4              | 13.470             |
|   | 3n      | 36.22                        | 292.7              | 6.725              |
|   | 3o      | 36.22                        | 292.6              | 2.723              |

Table 17 : Spectres enrichis <sup>18</sup>O. Conditions d'enregistrement des spectres.

## **2 Construction de la liste de paramètres expérimentaux**

L'ensemble des 32 spectres enregistrés dans la région de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup>, présentés Table 17, ont été traités en méthode d'ajustement multi-spectre avec le logiciel MultiFIT. Ce travail s'intéresse plus particulièrement aux intensités des transitions d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et d'HD<sup>18</sup>O. Suivant les conditions expérimentales d'enregistrement des spectres, détaillées au paragraphe précédent, cette étude regroupe les intensités mesurées d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O comprises dans une gamme entre 1×10<sup>-21</sup> à 1×10<sup>-28</sup> cm/molec. Enfin, plus de 2500 transitions uniques ont été mesurées dans la région spectrale de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup>.

### **2.a Attribution des raies et statistique**

L'attribution des raies a été réalisée en considérant les calculs variationnels de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39] ainsi que les valeurs d'énergies expérimentales de la littérature. Les listes de raies calculées sont disponibles sur le site web <http://spectra.iao.ru/> (Spectroscopy of Atmospheric Gases Information System). Les niveaux d'énergie expérimentaux proviennent de J. Tennyson et al. (2009) [67] pour H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O. Après attribution, seules quelques raies restent non attribuées, moins de 1% du total des raies mesurées.

Pour plus de commodité lors des comparaisons, l'ensemble des résultats de cette étude est présenté dans le format HITRAN : i.e. intensités corrigées du rapport isotopique naturel [64] et données à la température de référence de 296 K. L'incertitude sur les intensités peut être estimée à 4 % en tenant compte :

- des incertitudes liées à l'expérience, notamment relative à la mesure de la température et de la pression dans la cuve d'absorption
- incertitude sur les pressions partielles (écart type moyen x 3)
- incertitude sur l'ajustement de l'intensité (écart type x 3)

La Table 18 résume l'ensemble des mesures bandes par bande pour les isotopologues H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O. Elle présente :

- les positions minimum et maximum mesurées (cm<sup>-1</sup>)
- le nombre de transitions mesurées

- les nombres quantiques  $J_{\text{Max}}$ ,  $K_{\text{aMax}}$  (attribution S. Mikhailenko)
- les intensités observées  $S(\text{Obs})$  minimum et maximum (cm/molec) à 296 K
- la somme des intensités observées  $\Sigma[S(\text{Obs})]$  et des intensités calculées pour les transitions mesurées de H. Partridge et D.W. Schwenke  $\Sigma[S(\text{PS})]$
- la différence entre la somme des intensités observées et calculées (%)

## **2.b Détermination des pressions partielles :**

Dans un premier temps, en travaillant sur des spectres enrichis, il est primordial de déterminer les pressions partielles de chacune des espèces présentes dans la cuve d'absorption. L'ensemble des échantillons d'eau utilisés pour cette étude provient d'une même bouteille commerciale enrichie en <sup>18</sup>O annoncée à 95 %. Cette valeur d'enrichissement est à vérifier afin d'obtenir des intensités absolues de raies qui soient précises. Cette vérification a été faite séparément sur les spectres moyens parcours (enregistrés à des longueurs de 4 m à 36 m) et les spectres petits parcours (30 cm et 3 cm).

### **.2.b.1 Spectres moyens parcours :**

Les pressions partielles ont été ajustées en respectant le protocole décrit précédemment (Partie II, chap.4, page 70). Suite à l'étude décrite précédemment de l'isotopologue principal H<sub>2</sub><sup>16</sup>O dans la région spectrale de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup> [7], nous disposons pour cette région de valeurs d'intensité expérimentales dont la cohérence a été vérifiée. Nous avons choisi de comparer les abondances obtenues avec ces données [7] et avec les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]. Cette comparaison a été effectuée pour les spectres 2f, 2i et 2l de la Table 17. Les valeurs moyennes d'abondance obtenues, pour la région de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup> en prenant pour intensités de référence les données H<sub>2</sub><sup>16</sup>O du laboratoire et les intensités calculées sont respectivement 0.031 et 0.032. L'écart entre ces deux valeurs est de l'ordre de 3 %. Comme nous ne disposons pas de mesures d'intensité pour l'ensemble de la région spectrale de cette étude, nous avons choisi de prendre pour référence les intensités calculées H. Partridge et D.W. Schwenke pour l'ensemble des isotopologues. De plus la liste théorique propose beaucoup plus de raies d'absorption que les données présentes dans HITRAN, et donc l'ajustement de la pression partielle a pu être réalisé sur plus de raies, ce qui permet d'augmenter la statistique. Pour chaque série de spectres, les pressions partielles des isotopologues : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O, H<sub>2</sub><sup>17</sup>O, HD<sup>16</sup>O, HD<sup>18</sup>O et HD<sup>17</sup>O ont été déterminées par ajustement. La pression partielle de l'isotopologue H<sub>2</sub><sup>18</sup>O sera obtenue en soustrayant les pressions partielles de tous les isotopologues à la pression totale du spectre, mesurée lors de l'enregistrement.

|                                    | Bande   | ν (cm <sup>-1</sup> ) |         | Nb de transitions | J <sub>Max</sub> | K <sub>a</sub> max | S(Obs)                                   |          | Σ[S(Obs)] | Σ[S(PS)] | Σ[S(Obs)]/Σ[S(PS)] |
|------------------------------------|---------|-----------------------|---------|-------------------|------------------|--------------------|--|----------|-----------|----------|--------------------|
|                                    |         | Min                   | Max     |                   |                  |                    | Min                                      | Max      |           |          |                    |
| <b>H<sub>2</sub><sup>18</sup>O</b> | 010-000 | 1005.67               | 2310.51 | 1071              | 18               | 10                 | 2.11E-28                                 | 6.00E-22 | 2.11E-20  | 2.28E-20 | -8%                |
|                                    | 020-010 | 1104.71               | 2091.59 | 325               | 14               | 7                  | 3.07E-28                                 | 5.24E-25 | 1.73E-23  | 1.78E-23 | -3%                |
|                                    | 100-010 | 1294.69               | 2297.65 | 123               | 10               | 6                  | 2.07E-28                                 | 8.81E-27 | 2.56E-25  | 2.56E-25 | 0%                 |
|                                    | 001-010 | 1940.44               | 2331.87 | 109               | 10               | 6                  | 2.50E-28                                 | 1.84E-26 | 4.23E-25  | 4.41E-25 | -4%                |
|                                    | 000-000 | 1009.02               | 1193.14 | 16                | 15               | 8                  | 4.07E-28                                 | 7.68E-27 | 3.82E-26  | 3.82E-26 | 0%                 |
|                                    |         |                       |         |                   |                  |                    | <b>Total H<sub>2</sub><sup>18</sup>O</b> |          | 2.11E-20  | 2.28E-20 | -8%                |
| <b>HD<sup>18</sup>O</b>            | 010-000 | 1069.53               | 1863.65 | 900               | 18               | 8                  | 2.36E-29                                 | 1.72E-25 | 5.63E-24  | 5.72E-24 | -2%                |
|                                    | 020-000 | 1212.45               | 1448.55 | 28                | 6                | 4                  | 1.69E-29                                 | 1.39E-28 | 1.72E-27  | 1.78E-27 | -4%                |
|                                    |         |                       |         |                   |                  |                    | <b>Total HD<sup>18</sup>O</b>            |          | 5.63E-24  | 5.72E-24 | -2%                |

Table 18 : Statistique des attributions des transitions d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O mesurées dans la région spectrale de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup>.

| Spectre             | H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O |                   |                  | H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O |                   |                  | HD <sup>18</sup> O    |                   |                  | HD <sup>16</sup> O     |                   |                  | HD <sup>17</sup> O    |                   |                  |
|---------------------|--------------------------------|-------------------|------------------|--------------------------------|-------------------|------------------|-----------------------|-------------------|------------------|------------------------|-------------------|------------------|-----------------------|-------------------|------------------|
|                     | Abondance                      | Ajustement        |                  | Abondance                      | Ajustement        |                  | Abondance             | Ajustement        |                  | Abondance              | Ajustement        |                  | Abondance             | Ajustement        |                  |
|                     |                                | Nb de transitions | Ecart type moyen |                                | Nb de transitions | Ecart type moyen |                       | Nb de transitions | Ecart type moyen |                        | Nb de transitions | Ecart type moyen |                       | Nb de transitions | Ecart type moyen |
| Abondance naturelle | 0.9973                         |                   |                  | 3.72x10 <sup>-4</sup>          |                   |                  | 6.23x10 <sup>-7</sup> |                   |                  | 3.11x10 <sup>-4</sup>  |                   |                  | 1.16x10 <sup>-7</sup> |                   |                  |
| 1b                  | 0.015                          | 5                 | 0.00307          | N/A                            |                   |                  | N/A                   |                   |                  | N/A                    |                   |                  | N/A                   |                   |                  |
| 1e                  | 0.020                          | 6                 | 0.00786          | N/A                            |                   |                  | 3.08x10 <sup>-3</sup> | 9                 | 0.01554          | N/A                    |                   |                  | N/A                   |                   |                  |
| 2f                  | 0.028                          | 21                | 0.01336          | 5.4x10 <sup>-3</sup>           | 10                | 0.00627          | 3.03x10 <sup>-3</sup> | 22                | 0.00241          | 8.14x10 <sup>-5</sup>  | 16                | 0.00136          | N/A                   |                   |                  |
| 2i                  | 0.038                          | 25                | 0.01256          | 5.4x10 <sup>-3</sup>           | 11                | 0.00880          | 3.12x10 <sup>-3</sup> | 92                | 0.00308          | 10.28x10 <sup>-5</sup> | 26                | 0.00263          | 1.35x10 <sup>-5</sup> | 7                 | 0.00110          |
| 2l                  | 0.032                          | 21                | 0.01679          | 5.8x10 <sup>-3</sup>           | 16                | 0.00901          | 3.07x10 <sup>-3</sup> | 64                | 0.00393          | 9.12x10 <sup>-5</sup>  | 14                | 0.00534          | 1.46x10 <sup>-5</sup> | 29                | 0.00171          |
| 3i                  | 0.036                          | 93                | 0.01160          | 5.2x10 <sup>-3</sup>           | 4                 | 0.00348          | 3.10x10 <sup>-3</sup> | 32                | 0.00280          | 14.28x10 <sup>-5</sup> | 14                | 0.00195          | N/A                   |                   |                  |
| 3l                  | 0.026                          | 93                | 0.01371          | 5.2x10 <sup>-3</sup>           | 6                 | 0.00188          | 3.04x10 <sup>-3</sup> | 61                | 0.00513          | 10.65x10 <sup>-5</sup> | 32                | 0.00954          | 2.05x10 <sup>-5</sup> | 6                 | 0.00232          |
| 3o                  | 0.055                          | 85                | 0.00798          | 5.7x10 <sup>-3</sup>           | 7                 | 0.00399          | 2.71x10 <sup>-3</sup> | 64                | 0.00625          | 19.85x10 <sup>-5</sup> | 26                | 0.00233          | 1.23x10 <sup>-5</sup> | 5                 | 0.00322          |

Table 19 : Spectres enrichis <sup>18</sup>O. Détails des rapports isotopiques déterminés sur les spectres basses pression de chaque série de spectres enregistrés avec la cellule de 1 m de base.

La Table 19 détaille pour chaque série de spectres, les rapports isotopiques obtenus suivant cette procédure. Pour les spectres qui présentaient des raies d'absorption trop faibles pour donner une estimation de la pression partielle précise, l'acronyme N/A remplace la valeur de l'abondance expérimentale. C'est le cas principalement des spectres enregistrés de 1000 à 1200 cm<sup>-1</sup>. En conclusion de ces mesures de pressions partielles, on remarque que l'abondance enrichie d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O est très proche de celle annoncée sur la bouteille commerciale. En moyenne cette abondance est de 0.955. D'autre part cette table a également fait apparaître une abondance d'HD<sup>18</sup>O suffisante pour fournir une liste de paramètres de raie pour cet isotopologue, c'est pourquoi il a été inclus à ce travail.

### .2.b.2 Spectres petits parcours

Concernant les spectres enregistrés avec les parcours d'absorption de 30 cm et 3 cm plusieurs points sont à prendre en compte :

- La longueur d'absorption dans la cellule est au mieux 10 fois plus faible que le parcours total du faisceau lumineux depuis la source jusqu'à l'entrée de l'interféromètre (environ 3 m). Ce trajet externe ne peut plus alors être considéré comme négligeable. Malgré la mise sous vide totale de l'appareil pendant plusieurs heures avant le début et durant des enregistrements, il peut rester une quantité d'eau naturelle résiduelle dans le parcours extérieur à la cellule d'absorption. Cette quantité résiduelle peut influencer sur la mesure des pressions partielles.
- Avec ces parcours d'absorption très faibles, seuls les isotopologues H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et H<sub>2</sub><sup>16</sup>O sont visibles. De plus, en raison de l'abondance d'environ 4 % pour H<sub>2</sub><sup>16</sup>O, les transitions pour cet isotopologue sont faibles.

Pour les spectres de 30 cm (2c et 3f, Table 17), il a été possible de déterminer la pression partielle d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O dans de bonnes conditions (Table 20). On retrouve d'ailleurs des valeurs d'abondance comparables à celle obtenues sur les spectres de moyens parcours.

| H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O naturel [64] | H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O moyenne spectres moyens parcours (Table 19) | H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O spectre 2c | H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O spectre 3f |
|---|--|---|---|
| 0.997                                       | 0.036  | 0.042                                     | 0.036                                     |

Table 20 : Spectres enrichis <sup>18</sup>O. Pressions partielles H<sub>2</sub><sup>16</sup>O spectres 30 cm.

Pour les spectres enregistrés avec 3 cm de parcours d'absorption, le spectre de basse pression ne permet pas d'ajuster la pression partielle d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O. Les raies d'absorption étant trop faibles. Comme la

bouteille enrichie en <sup>18</sup>O a été la même pour tous les enregistrements, nous avons pu, après les vérifications précédentes, considérer que les pressions partielles restaient identiques.

## 2.c Calibration en position

Dans un premier temps, pour calibrer les spectres enregistrés au laboratoire, les positions des transitions d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O d'HITRAN2008 [15] ont été considérées. Ces données se réfèrent aux travaux de R.A. Toth [52], et sont affichées dans la base de données avec une très bonne précision. Les mesures de pression partielles ont montré que la proportion d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O est d'environ 4%, ce qui implique que seules les transitions de plus forte intensité sont observables sur les spectres dans de bonnes conditions d'absorption. Ce point conduit à un nombre très réduit de transition d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O pouvant être utilisées pour une calibration. C'est pourquoi il a été préféré d'utiliser les positions d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O calculées obtenues par S. Mikhailenko pour l'attribution des spectres. Ces positions ont été obtenues d'après les niveaux d'énergies listés par le groupe IUPAC [67] et les calculs ab initio de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]<sup>9</sup>. La précision de ces paramètres de positions est directement reliée à la précision sur les niveaux d'énergie. Les corrections appliquées aux positions expérimentales d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O sont présentées à la Figure 47, celles-ci dépendent de la région spectrale et de la cellule d'absorption utilisée.

Pour les régions spectrales n°1 et 2, les corrections correspondent à des shifts globaux en position obtenus à partir d'un petit nombre de transitions en raison du faible interval spectral de ces deux domaines. Au contraire dans pour la région spectrale n°3, la correction est déterminée sur un interval spectral beaucoup plus large (1350 à 2300 cm<sup>-1</sup>) et deux équations ont été obtenues. La première équation associée aux symboles pleins correspond aux transitions mesurées sur les spectres enregistrés avec la cellule de 1-m de base. La seconde (symboles en gris) est associée aux transitions obtenues sur les spectres de 30 et 3 cm de longueur d'absorption.

Après cette procédure de calibration les RMSD calculées entre les positions expérimentales d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et les positions calculées est autour de 20×10<sup>-5</sup> cm<sup>-1</sup>, cet écart est de l'ordre de l'incertitude expérimentale sur les positions. Pour l'ensemble des transitions mesurées dans cette étude (hormis les raies doubles) le RMSD calculé est de 140×10<sup>-5</sup> cm<sup>-1</sup>, cette valeur plus élevée provient des transitions d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O de faible intensité pour lesquelles l'incertitude expérimentale est plus importante. Enfin, les mêmes corrections ont été appliquées aux transitions d'HD<sup>18</sup>O.

---

<sup>9</sup> Très récemment une liste de position a été proposée par J. Tennyson et al (JQSRT 2012) pour H<sub>2</sub><sup>18</sup>O avec une précision de 20×10<sup>-5</sup> cm<sup>-1</sup>. Malheureusement cette liste n'était pas disponible lors de la détermination de la calibration des spectres enrichis.

| Région spectrale        | Nombre de transitions | Précision moyenne (10 <sup>-5</sup> cm <sup>-1</sup> ) [67] | RMSD (10 <sup>-5</sup> cm <sup>-1</sup> ) |
|-------------------------|-----------------------|---|---|
| 1000 – 1200 (1-m cell)  | 13                    | 20  | 16  |
| 1200 – 1400 (1-m cell)  | 25                    | 24  | 18  |
| 1400 – 2300 (1-m cell)  | 48                    | 21  | 18  |
| All (30 and 3 cm cells) | 67                    | 12  | 0,9                                       |

Table 21: Résumé des transitions d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O sélectionnées pour la calibration des specters expérimentaux. Pour chaque région spectrale, la précision moyenne des positions calculées [67] est renseignée ainsi que le RMSD correspondant entre les positions expérimentales et calculées.

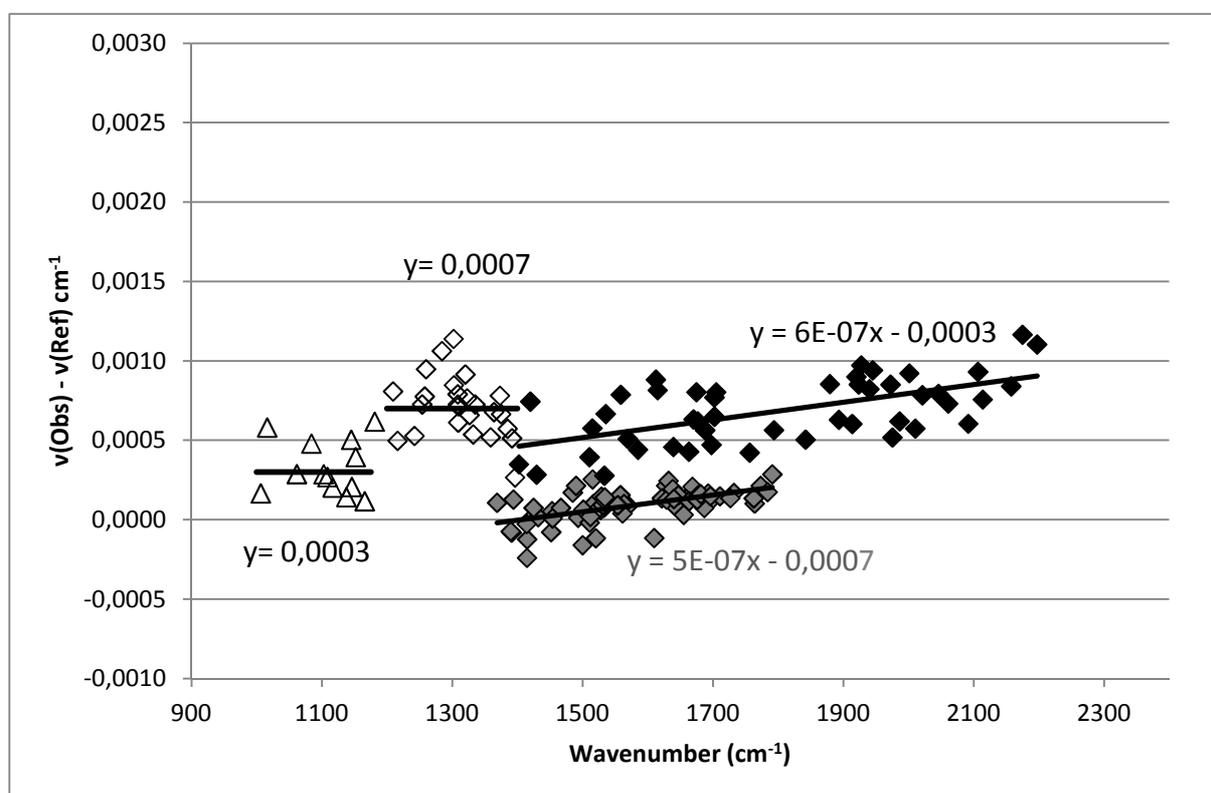


Figure 47 : Spectres enrichis <sup>18</sup>O. Calibration de la position par comparaison de raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O isolées et bien définies entre HITRAN2008 [15] et nos mesures.

### 3 Résultats - Comparaisons et discussions

Au total, un ensemble de plus de 1600 transitions d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et 900 transitions d'HD<sup>18</sup>O ont été mesurées dans la région de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup> (Table 21). La Figure 48 présente de manière globale les raies mesurées au laboratoire, par rapport aux données listées dans les BDD08 en noir. L'enregistrement de spectre enrichis en <sup>18</sup>O, a permis d'atteindre les raies faibles des isotopologues H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O de la région spectrale 1000 – 2300 cm<sup>-1</sup>, qui sont absentes des bases de données.

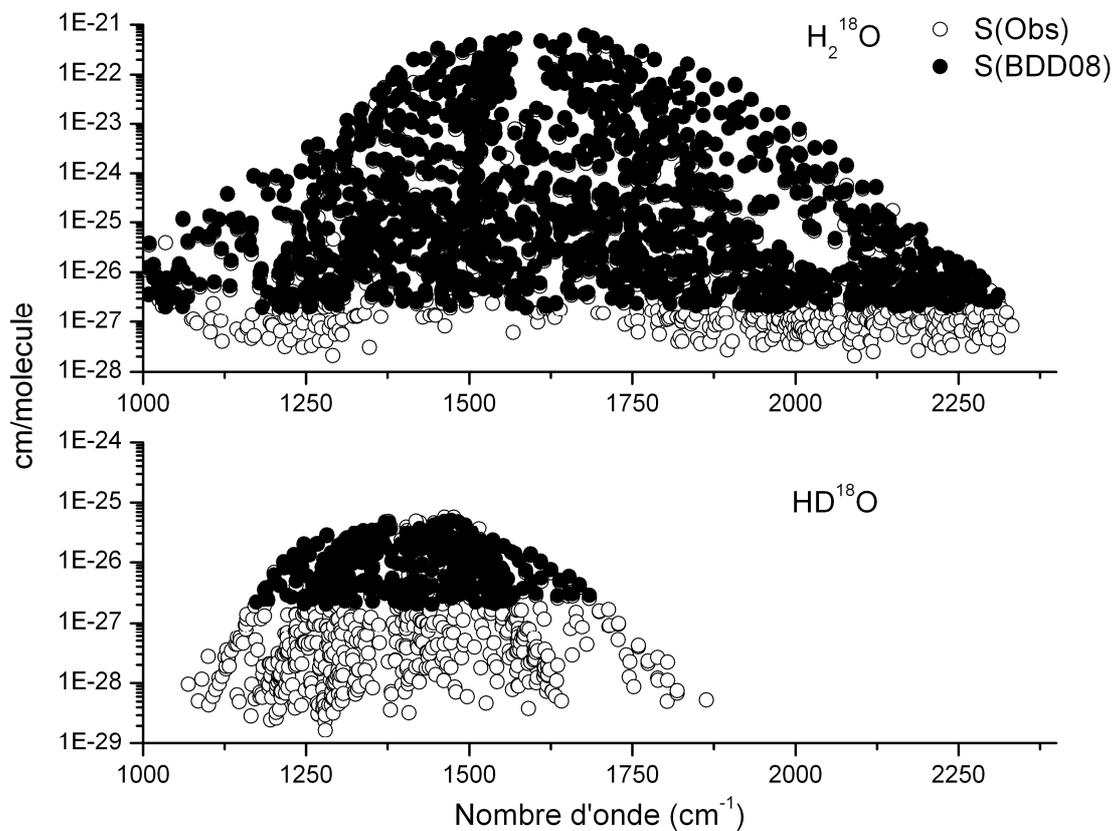


Figure 48 : Ensemble des raies mesurées d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O par rapport aux transitions listées dans les BDD08 [15][59].

### 3.a Molécule H<sub>2</sub><sup>18</sup>O

Selon J. Tennyson et al. (2009) [67] dans un article du groupe IUPAC<sup>10</sup>, 6 articles [53][68][69][70][71][72] présentent l'étude du spectre d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O dans la région spectrale de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup>. En tout, ces articles présentent 1570 transitions observées et attribuées. Dans le cadre de ce doctorat plus de 1600 transitions d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O ont été obtenues. Ainsi ce travail a permis d'apporter de nouvelles transitions, en particulier des transitions de faible intensité. Cet apport est visible sur le panneau supérieur de la Figure 48, qui représente les données issues des bases spectroscopiques et l'ensemble des résultats de cette étude. Enfin dans la littérature, A.W. Liu et al. (2006) [73] propose pour H<sub>2</sub><sup>18</sup>O, une liste de données expérimentales (position, intensité et énergie) dans la région spectrale de 1080 à 7800 cm<sup>-1</sup>.

Finalement pour H<sub>2</sub><sup>18</sup>O, trois comparaisons sont proposées entre les données expérimentales et les listes des bases de données, les intensités calculées [38][39] et la liste de Liu et al. Ces comparaisons sont résumées à la Table 22. Il n'est en général pas très utile de présenter une comparaison avec les données intensités (intensités calculées [38][39]) qui ont servi pour déterminer les pressions partielles (voir le paragraphe détermination des pressions partielles de ce chapitre), puisque ce sont ces données qui servent de référence. Cependant vu le peu de listes disponibles dans la littérature, cette comparaison sera présentée et discutée.

| Bande   | Liu et al [73] |      |       | BDD08        |      |       | PS linelist [38][39] |      |       |
|---------|----------------|------|-------|--------------|------|-------|----------------------|------|-------|
|         | S(Obs)/S(Liu)  | RMS  | Raies | S(Obs)/(HIT) | RMS  | Raies | S(Obs)/S(PS)         | RMS  | Raies |
| 000-000 | 0,32           | 0,34 | 4     | 0,99         | 1,00 | 7     | 0,97                 | 0,99 | 16    |
| 001-010 | 2,18           | 5,52 | 85    | 0,94         | 0,94 | 56    | 0,94                 | 0,95 | 106   |
| 010-000 | 1,02           | 1,15 | 469   | 0,90         | 0,91 | 880   | 0,97                 | 0,99 | 969   |
| 020-010 | 1,18           | 3,29 | 273   | 0,94         | 0,95 | 250   | 0,98                 | 1,00 | 310   |
| 100-010 | 1,59           | 9,29 | 104   | 0,74         | 0,74 | 62    | 0,96                 | 0,97 | 120   |

**Table 22: Isotopologue H<sub>2</sub><sup>18</sup>O. Résumer des comparaisons menées entre les intensités expérimentales et les données de la littérature, pour chaque bande. Les RMSD sont calculés pour l'ensemble des transitions comparables (excepté les transitions doubles).**

<sup>10</sup> IUPAC : International Union of Pure and Applied Chemistry

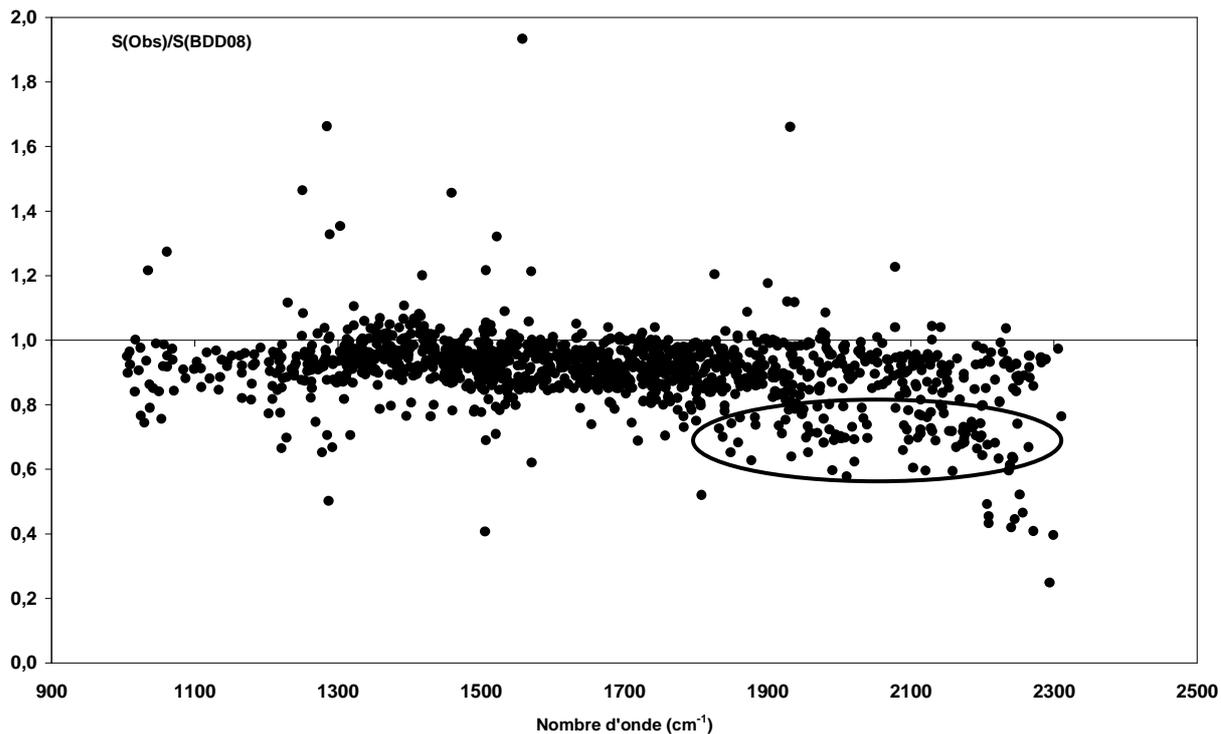


Figure 49 : H<sub>2</sub><sup>18</sup>O Région spectrale 1000 – 2300 cm<sup>-1</sup> : Rapport d'intensité entre nos mesures d'intensité S(Obs) et les BDD08 [15][59]

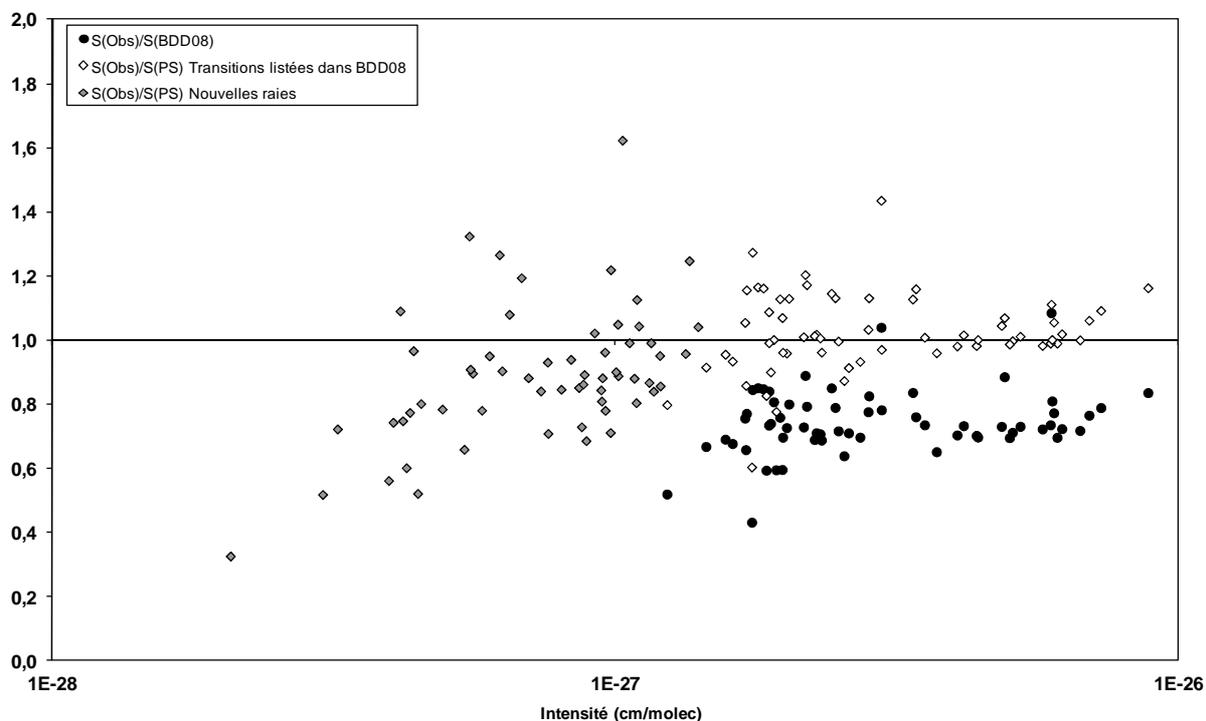
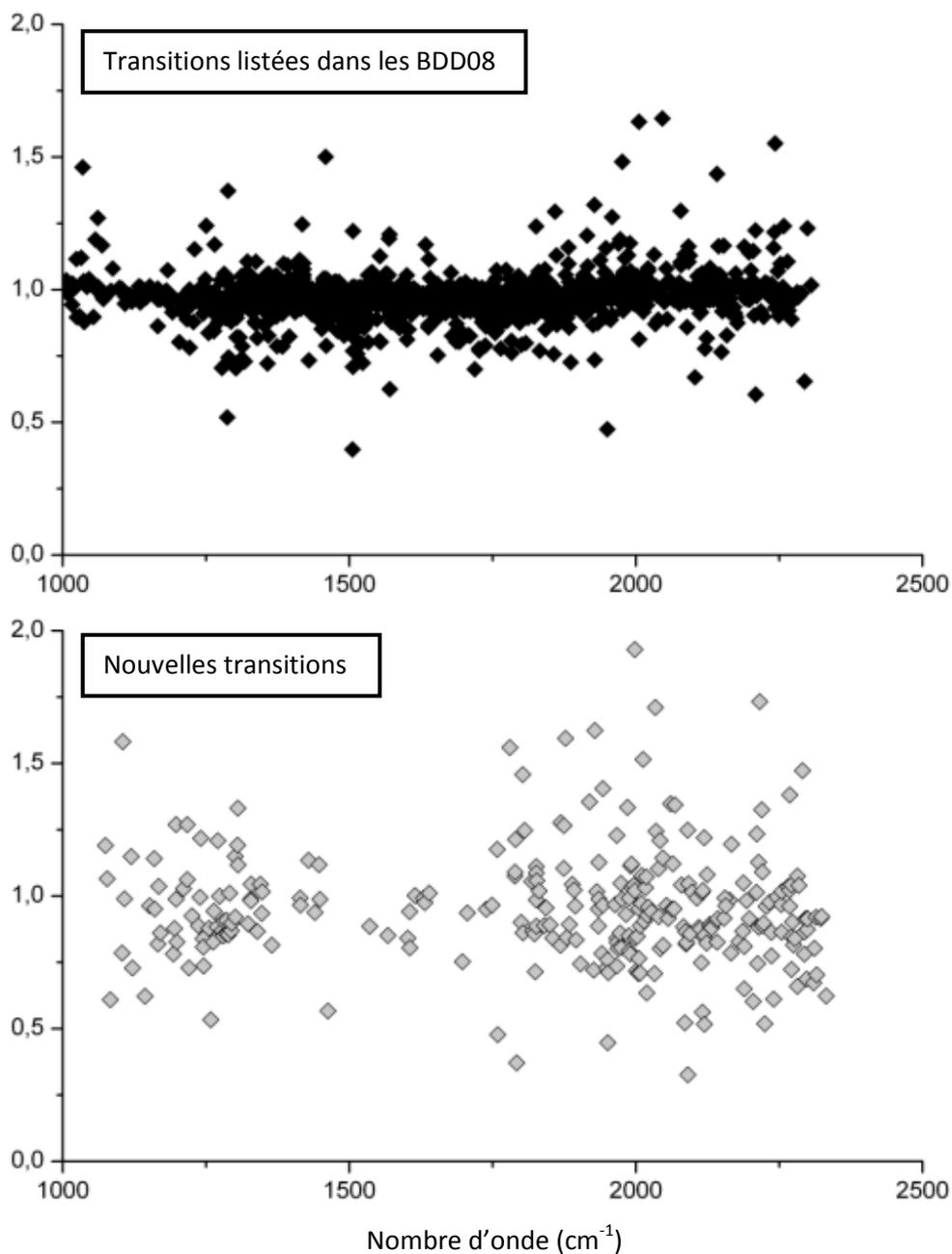


Figure 50 : H<sub>2</sub><sup>18</sup>O, bande  $\nu_1$ -  $\nu_2$ . Comparaison des intensités observées avec les BDD08 [15][59], en noir, et avec les intensités de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39], symbole ouvert : raies listées dans les BDD08, symbole gris : raies nouvelles.

Dans un premier temps, il est intéressant de comparer les valeurs d'intensités mesurées et les intensités listées dans les bases de données (Figure 49). Cette comparaison montre, pour la majorité des transitions, des rapports d'intensité en dessous de 1, qui semblent indiquer que les intensités listées dans les BDD08 sont surestimées. Les écarts moyens reportés dans la Table 22 confirment que les intensités des bases de données apparaissent sous-estimées de l'ordre de 10%. Dans la gamme spectrale de 1800 cm<sup>-1</sup> à 2300 cm<sup>-1</sup>, un certain nombre de raies présentent un écart plus important (entourées à la Figure 49). On peut montrer que ces raies appartiennent toutes à la bande  $\nu_1-\nu_2$  qui est présentée séparément sur la Figure 50. Pour l'ensemble des raies de la bande  $\nu_1-\nu_2$  mesurées de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup>, l'écart moyen obtenu avec les bases de données est donné à 0.74 (Table 22). Ce qui correspond bien à la situation de la Figure 50. En comparaison, les écarts pour cette bande avec les données calculées [38][39] montrent un bon accord avec un écart moyen calculé à 0.96.

La comparaison globale entre les intensités expérimentales et les données calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39], est présentée à la Figure 51. Les écarts moyens calculés par bande et les RMSD montrent un bon accord général avec une différence moyenne de l'ordre de 5%. Cette figure distingue les raies d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O listées dans les bases de données BDD08 [15][59], symboles vides, et les raies non encore listées dans ces bases sont représentées avec des symboles pleins. En particulier ces dernières correspondent à des raies faibles de l'ordre de 10<sup>-27</sup> cm/molec en abondance naturelle à 296 K. Les rapports d'intensités entre nos mesures et les intensités calculées (PS) présentent un bon accord, spécialement pour les raies les plus fortes (symbole vide) de la région spectrale de 1000 à 2400 cm<sup>-1</sup>. Pour ces raies, l'écart moyen est de 5 %. Cette comparaison confirme que les valeurs d'intensité des bases de données BDD08 sont surestimées pour l'isotopologue H<sub>2</sub><sup>18</sup>O de l'ordre de 10 %.



**Figure 51 : H<sub>2</sub><sup>18</sup>O. Région spectrale 1000 – 2300 cm<sup>-1</sup>. Comparaison entre les intensités observées et calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]. Le panneau supérieur représente les raies listées dans les BDD08 [15][59], et le panneau inférieur les nouvelles raies non encore listées dans ces bases.**

La liste de B.C. Stewart (2003) [51] (proposée comme concurrente de GEISA09 [59]) liste des valeurs d'intensités pour H<sub>2</sub><sup>18</sup>O similaires à celle des bases BDD08, mais les raies faibles en 10<sup>-27</sup> cm/molec (abondance naturelle à 296 K) y sont absentes. Ainsi les raies de la bande  $\nu_1-\nu_2$ , ne sont pas listées par B.C. Stewart (2003) [51]. Il n'est donc pas utile de présenter cette comparaison.

La comparaison globale entre cette étude et les valeurs d'intensités de A.W. Liu [73] est présentée Figure 52. L'étude A.W. Liu et al. (2006) menée dans la région de 1080 à 7800 cm<sup>-1</sup> pour les isotopologues H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HD<sup>18</sup>O (échantillons enrichis en <sup>18</sup>O à 95%) et pour une longueur maximum de parcours d'absorption de 15 m propose une liste de positions, intensité et niveau d'énergie. Suivant ces conditions expérimentales, seules les raies d'intensité relativement fortes ont pu être atteintes. A.W. Liu et al. Propose des valeurs d'intensités expérimentales avec une incertitude de l'ordre de 15 %, en considérant des raies isolées et d'absorption moyenne. Cette incertitude, relativement importante, résulte en grande partie de l'incertitude sur la détermination des pressions partielles [73].

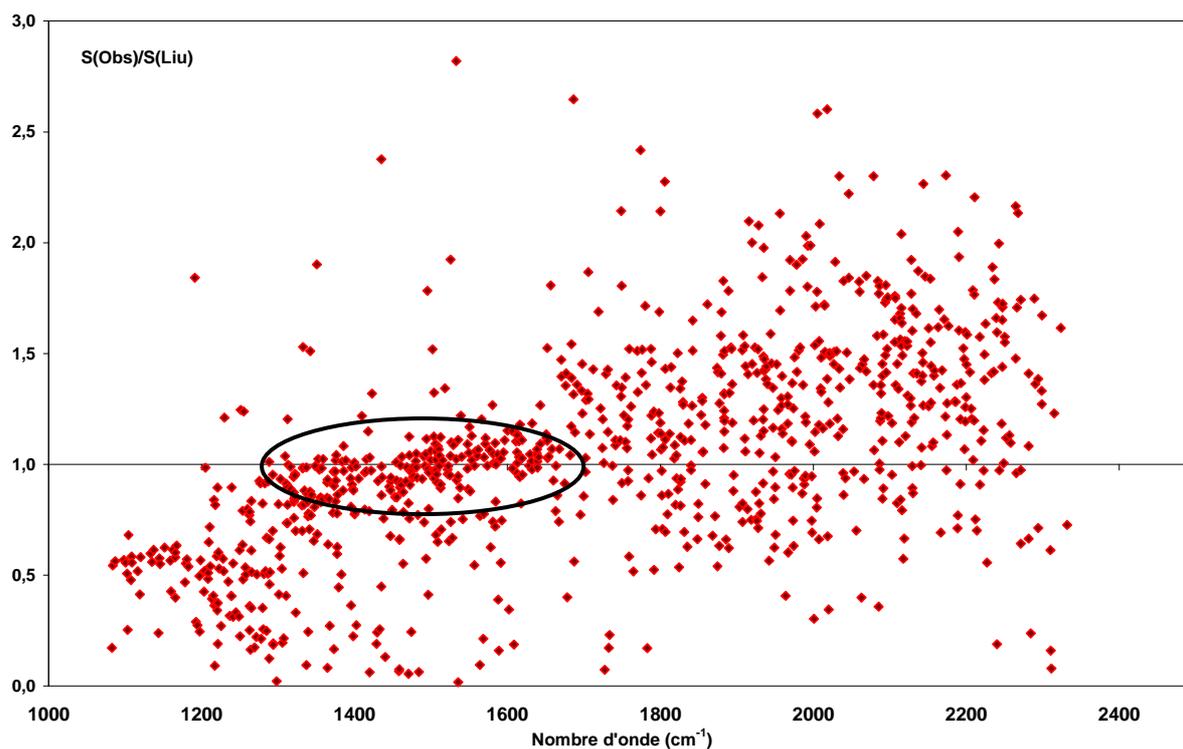


Figure 52 : H<sub>2</sub><sup>18</sup>O. Région spectrale 1000 – 2300 cm<sup>-1</sup>. Rapport d'intensité entre nos mesures S(Obs) et les mesures de A.W. Liu et al. (2006) [73].

Dans la région de 1300 de 1650 cm<sup>-1</sup>, un ensemble de raies, entourées sur la Figure 52 présentent des rapports d'intensité en assez bon accord de l'ordre de 10 ou 15 % avec mes valeurs expérimentales. On retrouve pour ces transitions des carts qui sont de l'ordre de l'incertitude annoncée par les auteurs. En dehors de cette zone, les écarts sont beaucoup plus importants, ils peuvent aller jusqu'à 50% ou plus. Ces rapports représentées en fonction de l'intensité des transitions, nous montre que seules les transitions d'intensité autour de 10<sup>-23</sup> cm/molec sont en bon accord avec nos mesures d'intensités. En dehors de ces intensités, les transitions sont trop faibles ou saturées sur le spectre de A.W. Liu. Ces transitions ne correspondent plus au cadre de l'incertitude de 15% annoncé par A.W. Liu et al. (2006) [73] pour des raies d'absorptions moyennes et isolées. Dans ce cas on ne peut plus considérer la comparaison entre A.W. Liu et nos mesures comme cohérente.

### 3.b Molécule HD<sup>18</sup>O

Concernant la molécule HD<sup>18</sup>O, la littérature est encore plus réduite que pour l'isotopologue H<sub>2</sub><sup>18</sup>O. L'ensemble des études menées sur HD<sup>18</sup>O a été évalué par S.N. Mikhailenko et al. (2009) [75] et plus récemment par le groupe de travail IUPAC (2011) [76]. Dans la région spectrale de cette étude, les positions d'HD<sup>18</sup>O sont reportées dans A.W. Liu et al. (2006) [73], (2011) [74] et dans R.A. Toth (1993) [77]. Les bases de données spectroscopiques récentes BDD08 [15][59] ont intégré les données de la compilation de R.A. Toth [52] (pour les positions et intensités). Ces données ont été publiées en 1993 [77] et regroupent les mesures des raies d'absorption d'HD<sup>18</sup>O pour la bande  $\nu_2$ , qui est la bande majoritaire dans la région spectrale de 1000 et 2400 cm<sup>-1</sup>. Avec les parcours d'absorption choisis pour cette étude nous avons pu atteindre environ 900 raies d'HD<sup>18</sup>O, ce qui représente plus du double par rapport aux raies listées dans les bases spectroscopiques. Le panneau inférieur de la Figure 48, qui présente l'ensemble des transitions d'HD<sup>18</sup>O mesurées dans ce travail par rapport aux données listées dans les BDD08, montre bien que ce travail a permis de mesurer un important nombre de transitions supplémentaires.

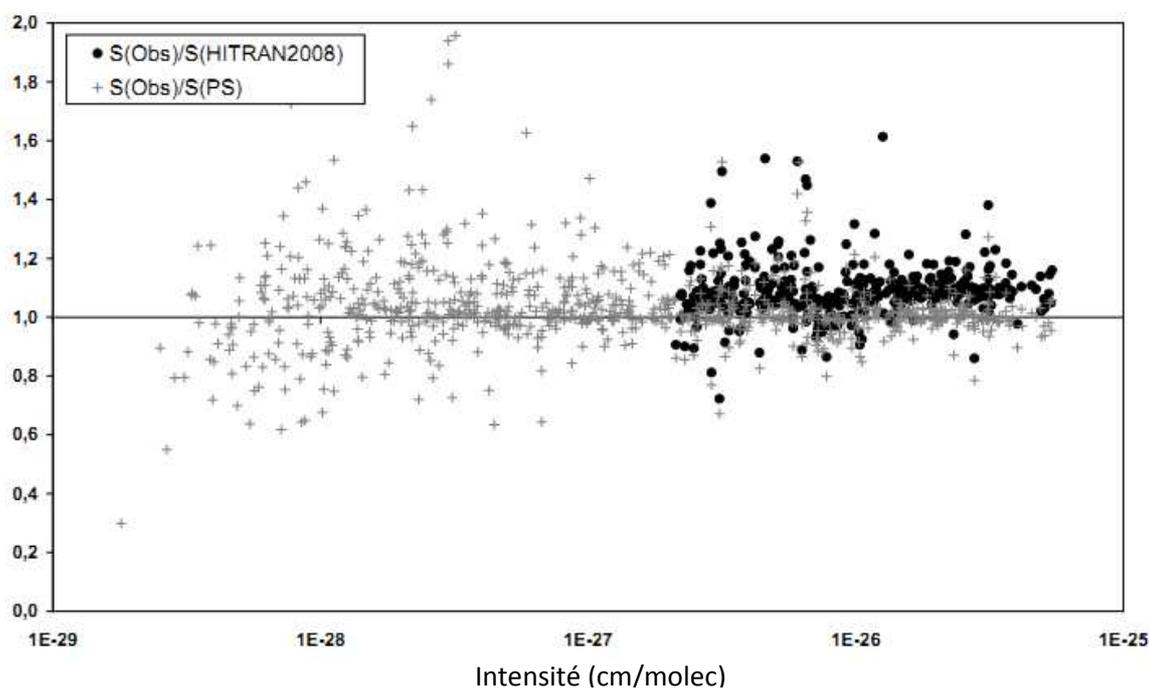


Figure 53 : HD<sup>18</sup>O. Région spectrale 1000 – 2300 cm<sup>-1</sup>. Comparaison des intensités observées S(Obs) avec HITRAN2008 [15] ou H. Partridge et D.W. Schwenke (PS) [38][39].

L'ensemble des raies d'HD<sup>18</sup>O mesurées dans la région spectrale de 1000 à 2300 cm<sup>-1</sup> est présenté à la Figure 53, les intensités sont données en abondance naturelle à 296 K. La comparaison de nos mesures avec les intensités d'HITRAN2008 [15] montre un écart moyen de 1.13, qui apparaissent ainsi sous-estimées. L'écart moyen obtenu avec les intensités calculées est de 1.05. Il reste globalement centré autour de 1, sur toute la gamme d'intensité. On remarque cependant que la dispersion a tendance à augmenter si l'on considère les transitions les plus faibles. Ces transitions présentent des absorptions faibles sur nos spectres ce qui peut expliquer les écarts observés à la Figure 53.

## **Conclusion**

Les études spectroscopiques menées dans la région spectrale de l'instrument IASI au laboratoire ont permis de fournir de nouvelles données pour les isotopologues  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{18}\text{O}$ . Dans cette région spectrale les bases de données spectroscopiques HITRAN2008 [15] et GEISA09 [59] proposent les mêmes données, et il y a peu d'études expérimentales disponibles dans la littérature.

Pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , notre travail s'est porté dans la région de 1200 à 1400  $\text{cm}^{-1}$ , volontairement restreinte afin de répondre à la question qui était posée au laboratoire : qu'elle est la meilleure base de données pour l'analyse des données IASI ? L'enregistrement des spectres long parcours avec la cellule de 50 m de base a permis la mesure des raies faibles de cette région qui présentaient des différences importantes entre les données du LISA [60][61][62] et les bases HITRAN2004 [16] et GEISA03 [50]. En effet, ces raies d'intensité de l'ordre de  $1 \times 10^{-25}$  à  $1 \times 10^{-26}$   $\text{cm}/\text{molec}$  n'ont pas été revues par L.H. Coudert et al. (2008) [58] dont les travaux ont été intégrés aux bases de données spectroscopiques les plus récentes [15][59]. En particulier, nos mesures ont montré que la bande  $2\nu_2 - \nu_2$ , nécessite d'être réévaluée dans ces bases de données.

Pour les isotopologues  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{18}\text{O}$ , les spectres enrichis en  $^{18}\text{O}$  enregistrés dans la région de 1000 à 2300  $\text{cm}^{-1}$ , ont permis de proposer de nouvelles mesures en position et intensité. En particulier nous avons pu mesurer les raies dans une gamme d'intensité de  $1 \times 10^{-19}$  à  $1 \times 10^{-27}$   $\text{cm}/\text{molec}$ , dont des raies faibles qui ne sont pas listées dans les bases spectroscopiques. Pour ces isotopologues le but de notre travail était de fournir une nouvelle liste de paramètres spectroscopiques. Les données des bases spectroscopiques pour  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , montre un écart de l'ordre de 5 à 10%, et sont globalement inférieures à nos mesures. Pour l'isotopologues  $\text{HD}^{18}\text{O}$ , notre étude a permis de mesurer plus du double de raies présentes dans les bases spectroscopiques.



## ***Partie IV.***

***Etude de la vapeur d'eau en  
abondance naturelle dans la  
région spectrale de 6400 à  
9400 cm<sup>-1</sup>***



## **Introduction.**

L'étude de la vapeur d'eau en abondance naturelle est l'un des thèmes de recherche dans lequel est engagé le laboratoire du GSMA [10][78][79]. L'étude de la région spectrale allant de 4200 à 6600  $\text{cm}^{-1}$  a été publiée par A. Jenouvrier et al. (2007) [10] et les données ont été intégrées aux bases de données spectroscopiques récentes (HITRAN2008 [15] et GEISA09 [59]). L'étude de l'eau naturelle dans la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  a fait l'objet d'un financement national dans le cadre d'un projet LEFE-ChAt « Les Enveloppes Fluides et l'Environnement » porté par A. Campargue de 2006 à 2009. Ce projet était intitulé « Etude expérimentale et théorique du spectre d'absorption de la vapeur d'eau pour des applications atmosphériques : Paramètres spectroscopiques et Continuum ».

A mon arrivée au laboratoire, en octobre 2008, des spectres avaient été enregistrés avec des parcours d'absorption de quelques dizaines de mètres, dans la région de 8800  $\text{cm}^{-1}$ . L'étude préliminaire menée sur ces spectres a montré un profond désaccord des intensités d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  avec la base de données HITRAN2008 [15] dans cette région. Ce travail s'est poursuivi au cours de mon doctorat avec l'enregistrement complet de la région spectrale allant de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ .

L'étude complète de la vapeur d'eau dans cette région spectrale a pour but d'apporter une liste de paramètres spectroscopiques pour la vapeur d'eau : positions, intensités et coefficients d'élargissement qui pourront être insérés dans les bases de données spectroscopiques. Les isotopologues  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$  ont pu être mesurés sur nos spectres. L'étude préliminaire menée sur la région spectrale centrée à 8800  $\text{cm}^{-1}$ , nous a conduit à regarder en détail les données sources à partir desquelles des bases de données HITRAN [32] et GEISA [33] ont été construites, ainsi que la littérature pour cette région spectrale.



## Chapitre 1.

### Contexte de l'étude.

Les bases de données spectroscopiques HITRAN [32] et GEISA [33] sont régulièrement mises à jour et de nouvelles transitions sont intégrées. Pourtant certaines régions spectrales restent encore mal connues ou n'ont pas été mesurées de nouveau récemment. C'est le cas de la région spectrale centrée à  $8800\text{ cm}^{-1}$ , contrairement à celles allant de  $6600$  à  $8000\text{ cm}^{-1}$  et de  $9250$  à  $10\ 000\text{ cm}^{-1}$ .

|                  | Région spectrale             |   |  |
|------------------|------------------------------|---|--|
|                  | Région 1                     | Région 2  | Région 3   |
|                  | $6600 - 8000\text{ cm}^{-1}$ | $8000 - 9250\text{ cm}^{-1}$                      | $9250 - 10\ 000\text{ cm}^{-1}$                        |
| HITRAN91/92 [80] | Inchangé                     | Mandin et al.(1988) [81]                          | Chevillard et al.(1989) [82]                           |
| HITRAN96 [83]    | Toth (1994) [84]             | Inchangé  | Inchangé   |
| HITRAN2000 [85]  | Inchangé                     | Correction des intensités Giver et al.(1999) [86] | Brown et al.(2002) [87]                                |
| HITRAN2004 [16]  | Toth [52]                    | Inchangé  | Inchangé   |
| HITRAN2008 [15]  | Inchangé                     | Inchangé  | Tolchenov and Tennyson [88] et Brown et al.(2002) [87] |
|                  |                              |   |  |
| GEISA 1997 [89]  | Toth (1994) [84]             | Mandin et al.(1988) [81]                          | Chevillard et al.(1989) [82]                           |
| GEISA 2003 [50]  | Inchangé                     | Inchangé  | Brown et al.(2002) [87]                                |
| GEISA 2009 [59]  | Toth [52]                    | Correction des intensités Giver et al.(1999) [86] | Tolchenov and Tennyson [88]                            |

**Table 23 : Evolution des données d'intensité d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  des bases spectroscopiques HITRAN et GEISA**

La Table 23 présente de manière synthétique les sources des données d'intensité pour H<sub>2</sub><sup>16</sup>O des bases de données spectroscopiques HITRAN depuis la version de 91/92 [80] et de GEISA depuis la version de 1997 [89] jusqu'aux versions les plus récentes [15][59]. Les intensités de référence pour la région spectrale n°2 restent à ce jour les travaux de J.Y. Mandin [81] parus en 1988, contrairement à la région allant de 6600 à 8000 cm<sup>-1</sup> a été améliorée à deux reprises par les travaux de R.A. Toth [84][52].

Le travail mené par L.P. Giver et al. publié en 1999 [86], a permis de montrer des différences systématiques entre les intensités données dans la base HITRAN et les intensités mesurées proposées dans les articles de référence de la base de données [81][82][90][91][92]. Ces différences ont été observées pour la région spectrale allant de 8036 cm<sup>-1</sup> à 22 657 cm<sup>-1</sup>. Les auteurs ont proposé pour la région de 8000 à 9400 cm<sup>-1</sup>, une correction des intensités listées dans HITRAN91/92 [80] par un facteur :

$$\exp \left[ -2E'' \left( \frac{hc}{k} \right) \left( \frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T_{\text{exp}}} \right) \right]$$

Avec : T<sub>exp</sub>, la température à laquelle les paramètres expérimentaux sont donnés ; T<sub>ref</sub>, la température de référence d'HITRAN (296 K).

Ce facteur permet de corriger la conversion en température des données expérimentales au format HITRAN (296 K). La correction proposée par L.P. Giver a été acceptée et intégrée à la base HITRAN2000, depuis ces données sont restées inchangées. Néanmoins ce travail n'a pas pu apporter d'éléments supplémentaires concernant les nombreuses raies non assignées et les paramètres spectroscopiques des isotopologues mineurs dans cette région spectrale. En 2000, L.P. Giver et al. [93] propose également la révision raie par raie de la base HITRAN96 dans le domaine de 5750 à 7965 cm<sup>-1</sup>. En effet les auteurs ont constaté des différences significatives mais non systématiques entre les données de R.A. Toth [84] et les données d'HITRAN96 [80]. L'intégration des nouvelles données de R.A. Toth de 500 à 8000 cm<sup>-1</sup> [52] dans la version de 2004 [16] de la base a permis de répondre à ce problème. Les conclusions amenées par L.P. Giver [86] pour H<sub>2</sub><sup>16</sup>O montrent que tous les problèmes concernant la région de 6400 à 9400 cm<sup>-1</sup> ne sont pas encore réglés. En particulier pour la région de 8000 à 9400 cm<sup>-1</sup>. Plusieurs autres articles depuis les années 2000 s'accordent sur ce point [94] [95] [96] [97]. J'ai listé ci-dessous leurs observations :

- D. Belmiloud et al. (2000) [94].

Cet article présente de récentes mesures en laboratoire comparées aux données HITRAN2000 pour la région spectrale 8500 à 15 800  $\text{cm}^{-1}$ . La conclusion majeure de ce travail est qu'il reste des incohérences sur les intensités et que les corrections apportées par L.P. Giver ne permettent pas d'améliorer les comparaisons avec la base HITRAN.

- K.M. Smith et al. (2004) [95].

Dans le cadre d'une étude des intensités des bandes d'absorption à partir de spectres enregistrés avec un STF, les auteurs ont montré que la base de données HITRAN2000 nécessitait plusieurs révisions. Notamment pour la région 6600 à 8000  $\text{cm}^{-1}$  où les écarts constatés avec l'expérience sont de l'ordre de 10%. Et pour la région de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  ces écarts augmentent jusqu'à 20 %, malgré la correction apportée par L.P. Giver.

- S.E. Casanova and K.P. Shine (2006) [96].

Ce travail mené dans une large gamme spectrale (2000 à 12 500  $\text{cm}^{-1}$ ) avait pour but de mesurer l'absorption de la vapeur d'eau dans l'atmosphère. Les spectres enregistrés à partir du sol ont été analysés avec les versions 2000 et 2004 de la base HITRAN. Les conclusions pour la région spectrale de notre étude (6400 – 9400  $\text{cm}^{-1}$ ), ont montré une meilleure cohérence avec les données d'HITRAN2004 dans la région 6600 à 8000  $\text{cm}^{-1}$  qu'avec celles d'HITRAN2000, correspondant à l'intégration des travaux de R.A. Toth [52] dans la base de données. Au contraire, la région de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  montre une incohérence de l'ordre de 18 % avec HITRAN2004. Les intensités de la base spectroscopique apparaissent pour les auteurs sous – estimées.

- J. Bailey (2009) [97].

Cet article porte sur la détermination de la quantité de la vapeur d'eau dans les basses couches de l'atmosphère de Vénus dans la région spectrale de 8330 à 8770  $\text{cm}^{-1}$ . J. Bailey a proposé une vision générale des bases de données disponibles. En particulier pour HITRAN, sa conclusion montre une erreur systématique pour les intensités des raies d'absorption (de l'ordre de 5 à 20 %) ainsi qu'un manque de données, pour l'isotopologue principal et les isotopologues mineurs.

Les versions les plus récentes des bases de données spectroscopiques HITRAN2008 [15] et GEISA09 [59] présentent désormais des valeurs d'intensités comparables pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  et ses isotopologues (Table 23). Malgré les problèmes soulevés par plusieurs groupes de recherche [94][95][96][97] pour la région centrée à  $8800\text{ cm}^{-1}$ , la littérature proposant des listes de données expérimentales reste limitée. Ainsi pour la région spectrale centrée à  $8800\text{ cm}^{-1}$  deux études expérimentales sont disponibles et fournissent des nouvelles listes de paramètres spectroscopiques : R.N. Tolchenov et J. Tennyson (2005) [98] et A.W. Liu et al. (2006) [99]. Ces deux études ne proposent pas malgré tout, une révision globale de la région centrée à  $8800\text{ cm}^{-1}$ . En effet, R.N. Tolchenov et J. Tennyson, proposent des paramètres spectroscopiques pour les raies d'intensités de  $1 \times 10^{-25}\text{ cm/molec}$  à  $1 \times 10^{-24}\text{ cm/molec}$  à 296 K, pour l'isotopologue principal et quelques raies des isotopologues mineurs. A.W. Liu et al. ont travaillé sur des spectres enrichis en  $^{17}\text{O}$  et  $^{18}\text{O}$ , et ne présentent pas de résultats pour l'isotopologue principal.

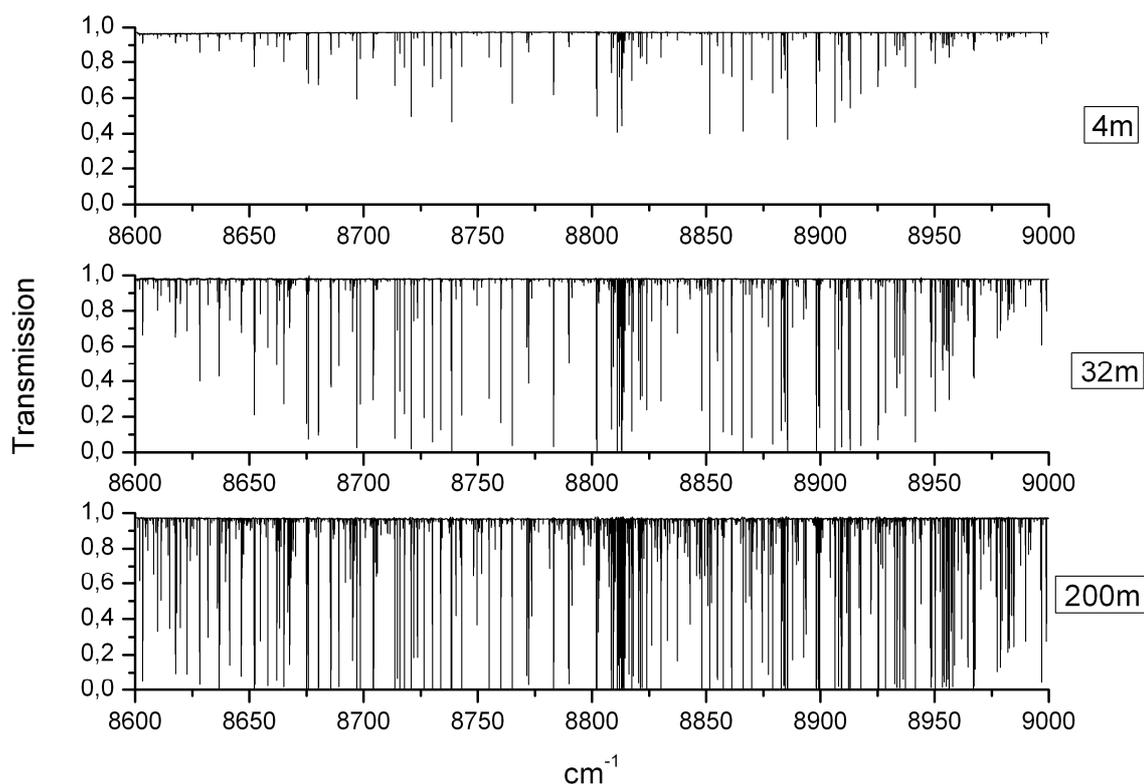
La région de  $6600 - 8000\text{ cm}^{-1}$  quant à elle, a été revue à deux reprises dans les bases de données avec l'intégration des données de R.A. Toth [84][52]. Pour cette région, d'autres sources de mesures expérimentales sont disponibles. On pourra se référer à R.N. Tolchenov et J. Tennyson (2005) [98] ainsi qu'aux travaux de S. Mikhailenko et al. (2007) [100] et (2011) [101] qui présentent les paramètres spectroscopiques pour  $\text{H}_2\text{O}$  obtenus par CRDS.

## **Chapitre 2.**

### **Enregistrement des spectres.**

De nombreux spectres ont été enregistrés avec le STF du laboratoire pour mener la révision complète de la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Les échantillons d'eau utilisés pour cette étude sont des échantillons d'eau naturelle distillés afin d'éviter la présence d'impureté. La région spectrale a été divisée en deux parties pour l'enregistrement des spectres : de 6400 à 8100  $\text{cm}^{-1}$  et de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  afin d'être dans des conditions expérimentales optimales. Dans le cas d'enregistrement sur une trop grande région spectrale, une asymétrie peut apparaître, ce point a été développé dans la thèse de L. Régalia. Néanmoins les enregistrements permettent une inter-comparaison des résultats dans la région spectrale de 8000 à 8150  $\text{cm}^{-1}$ , ce qui est important pour vérifier la cohérence des résultats sur les intensités mais également pour effectuer la calibration en fréquence des spectres sur la région globale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ .

Afin de proposer une révision complète de la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ , cette étude se propose de mesurer les raies d'absorption d'intensités allant de  $1 \times 10^{-19}$   $\text{cm}/\text{molec}$  jusqu'à  $1 \times 10^{-27}$   $\text{cm}/\text{molec}$ . Pour pouvoir mesurer dans de bonnes conditions (absorption de 20 à 60 %) toutes les raies d'intensités très différentes, les spectres ont été enregistrés pour des parcours d'absorption allant de 30 cm à 1200 m, ainsi la cellule simple passage de 30 cm et les cellules à réflexion multiples de 1 m et 50 m ont été utilisées pour cette étude. La Figure 54 présente un détail de trois spectres enregistrés dans la région centrée à 8800  $\text{cm}^{-1}$ , pour cette figure et pour le traitement spectral nous avons dû diviser le spectre expérimental avec un spectre cuve vide. La forme du filtre optique a été éliminée, ainsi que des franges présentes sur le 100 % de transmission dues à des éléments optiques extérieur à l'interféromètre. Ces spectres montrent le gain en sensibilité obtenu avec les très longs parcours d'absorption.



**Figure 54 : Détail de trois spectres dans la région de 8600 à 9000 cm<sup>-1</sup> enregistrés avec une pression de 5 Torr et pour 3 longueurs différentes.**

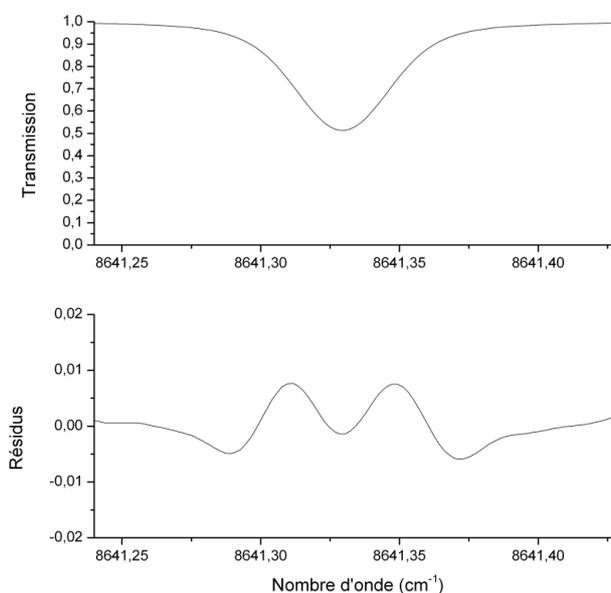
L'enregistrement des spectres s'est effectué en plusieurs temps au laboratoire. A mon arrivée, les spectres de 30 cm pour la région de 6400 à 8000 cm<sup>-1</sup> ainsi que les spectres de 4 m à 36 m pour la région de 8000 à 9400 cm<sup>-1</sup> avaient déjà été enregistrés par l'équipe. L'enregistrement des spectres longs parcours avec la cellule de 50 m de base, a eu lieu au cours de mon doctorat. Pour tous les spectres enregistrés, le STF a été équipé d'une optique en CaF<sub>2</sub>, d'une séparatrice en SiO<sub>2</sub> et deux détecteurs InGaAs. L'ensemble des conditions expérimentales : longueur de parcours d'absorption, température, pression et diamètre du diaphragme d'entrée de l'interféromètre sont regroupés pour chaque spectre dans la Table 24.

| Spectre   | Parcours d'absorption (m) | Pression (mbar) | Température (K) | Diamètre du diaphragme d'entrée (mm) |
|---|---------------------------|-----------------|-----------------|--------------------------------------|
| <b>Région spectrale 1 :<br/>6450 – 8150 cm<sup>-1</sup></b> |                           |                 |                 |                                      |
| 1a  | 0.312                     | 21.43           | 296.5           | 2.50                                 |
| 1b  |                           | 14.56           |                 |                                      |
| 1c  |                           | 10.37           |                 |                                      |
| 1d  |                           | 4.90            |                 |                                      |
| 1e  |                           | 2.30            |                 |                                      |
| 1f  |                           | 1.33            |                 |                                      |
| 2a  | 36.22                     | 13.063          | 292.8           | 5.00                                 |
| 2b  |                           | 6.765           | 293.0           |                                      |
| 2c  |                           | 2.565           | 293.1           |                                      |
| 3a  | 201.84                    | 13.242          | 291.2           | 3.00                                 |
| 3b  |                           | 6.73            | 291.3           |                                      |
| 3c  |                           | 2.69            | 288.6           |                                      |
| 4a  | 602.32                    | 13.41           | 291.4           | 3.00                                 |
| 4b  |                           | 6.72            | 290.6           |                                      |
| 4c  |                           | 2.70            | 291.1           |                                      |
| 5a  | 1203.04                   | 13.90           | 294.4           | 3.00                                 |
| 5b  |                           | 6.84            | 293.9           |                                      |
| 5c  |                           | 2.70            | 294.1           |                                      |
| <b>Région spectrale 2 :<br/>8000 – 9400 cm<sup>-1</sup></b> |                           |                 |                 |                                      |
| 5a  | 4.17                      | 20.10           | 296.7           | 4.40                                 |
| 5b  |                           | 9.90            | 296.8           |                                      |
| 5c  |                           | 4.80            | 296.8           |                                      |
| 5d  |                           | 2.32            | 296.8           |                                      |
| 6a  | 12.18                     | 20.10           | 296.1           | 4.52                                 |
| 6b  |                           | 9.90            | 296.2           |                                      |
| 6c  |                           | 4.81            | 296.2           |                                      |
| 6d  |                           | 2.33            | 296.3           |                                      |
| 7a  | 32.21                     | 20.18           | 295.6           | 4.58                                 |
| 7b  |                           | 9.90            | 295.4           |                                      |
| 7c  |                           | 3.56            | 296.4           |                                      |
| 7d  |                           | 2.32            | 296.7           |                                      |
| 8a  | 201.84                    | 13.47           | 288.8           | 3.00                                 |
| 8b  |                           | 6.90            | 288.1           |                                      |
| 8c  |                           | 2.32            | 288.6           |                                      |
| 9a  | 602.32                    | 13.75           | 289.3           | 3.00                                 |
| 9b  |                           | 6.65            | 289.1           |                                      |
| 9c  |                           | 2.71            | 289.1           |                                      |
| 10a   | 1203.04                   | 13.90           | 294.4           | 3.00                                 |
| 10b   |                           | 6.84            | 293.9           |                                      |
| 10c   |                           | 2.70            | 294.1           |                                      |

Table 24 : Région spectrale 6400 – 9400 cm<sup>-1</sup>. Conditions d'enregistrement des spectres.

## **1 Fonction d'appareil – Diaphragme apparent**

A mon arrivée les spectres de la région n°2 avec des longueurs d'absorption de 4, 12 et 32 m (Table 24) étaient déjà enregistrés et c'est donc sur ces spectres que j'ai commencé à travailler. Les premiers ajustements menés sur ces spectres ont montré des résidus d'ajustement assez importants (Figure 55). Pour l'analyse des spectres, c'est le profil de Voigt qui a été choisis, qui est en accord avec nos conditions expérimentales. Il n'y a donc aucune raison pour penser que ces résidus soient liés au profil physique de la raie. Cependant la simulation d'une raie théorique requiert un profil physique et une fonction d'appareil théorique.



**Figure 55 : Exemple d'ajustement réalisé un profil de Voigt avec les résidus de l'ajustement. Spectre 6a, Table 24. Raie H<sub>2</sub><sup>16</sup>O listée dans HITRAN2008 à 8641.341300 cm<sup>-1</sup>.**

Afin de vérifier l'influence de la fonction d'appareil, il faut regarder un spectre à basse pression (Figure 55). Dans ce cas l'influence de la fonction d'appareil est prépondérante sur l'élargissement par la pression. Ainsi pour tenter d'améliorer la fonction d'appareil, le diaphragme d'entrée de l'interféromètre a été ajusté avec le logiciel « MultiFiT » selon la procédure décrite dans la partie II (page 68). La détermination d'un diaphragme apparent pour ces séries de spectres a permis de mieux définir la fonction d'appareil théorique et d'améliorer nettement les résidus des ajustements, comme le montre la Figure 27 (page 69).

## **2 Traitement des spectres**

Les spectres enregistrés pour cette étude ont été analysés avec le logiciel multi-spectres « MultiFiT » et le logiciel fonctionnant en simple spectre « Bfit » [102]. En particulier le logiciel « Bfit » a été utilisé par Le Wang, post doctorant au laboratoire durant l'année 2008 – 2009. Le Wang était en charge de l'étude dans la région de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  des raies faibles isolées. Une inter-comparaison des résultats obtenus avec « Bfit » [102] et « MultiFiT » pour des raies d'absorption d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  a été effectuée afin de s'assurer de la cohérence globale des résultats. Une inter-comparaison entre ces logiciels a été réalisée lors de l'étude de la région spectrale 4200 – 6600  $\text{cm}^{-1}$  [10]. Les deux logiciels d'ajustement ont alors montré une bonne cohérence (de l'ordre de 1 % pour les mesures d'intensités). Le même travail a été effectué pour notre étude et la conclusion reste identique.

## **3 Contrôle des pressions partielles sur les spectres longs parcours**

Comme dans le cas de l'étude des intensités d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  dans la région spectrale de 1200 à 1400  $\text{cm}^{-1}$ , les pressions partielles des spectres longs parcours ont été vérifiées. Ces spectres (séries 3, 4, 5 et 8, 9 10, Table 24) ont été revus en raison de la pollution de parois de la cuve de 50 m de base suite à une série de mesure d'espèces deutérées. Sur ces spectres les isotopologues  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$  ont pu être observés. On considère que les isotopologues  $\text{HD}^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{18}\text{O}$ , qui n'ont pas pu être mesurés sur les spectres longs parcours, sont proches de l'abondance naturelle. De plus on suppose qu'une légère augmentation de leur abondance n'influera pas sur la proportion d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$ . En effet les rapports naturels pour  $\text{HD}^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{18}\text{O}$  sont très faibles respectivement  $1.16 \times 10^{-7}$  et  $6.23 \times 10^{-7}$ .

Pour l'étude de 6400 – 9400  $\text{cm}^{-1}$ , étant donné que plusieurs travaux [94][95][96][97] montrent une incohérence de la base HITRAN2008 [15], il nous a paru nécessaire d'utiliser d'autres données pour réaliser l'ajustement des pressions partielles des isotopologues de la vapeur d'eau. Pour  $\text{HD}^{16}\text{O}$ , notre choix s'est porté sur les intensités de L. Daumont [103]. Ces données proviennent de travaux menés au laboratoire et les résultats obtenus sont cohérents avec les données de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]. Pour les isotopologues  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ , les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke ont été prises comme intensité de référence. La pression partielle

d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  peut être calculée comme la pression totale du spectre moins la somme des pressions partielles des isotopologues ( $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{17}\text{O}$ ).

Les rapports isotopiques obtenus sur les spectres longs parcours sont rassemblés dans la Table 25. On remarque que la quantité d' $\text{HD}^{16}\text{O}$  sur nos spectres est de trois fois supérieure à celle attendue en abondance naturelle. Ce qui rejoint les conclusions de A. Jenouvrier et al. [10]. Les rapports isotopiques des espèces  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  obtenus par ajustement sont très proches des valeurs du rapport naturel.

| Spectre               | Molécules                |                           |                           |
|-----------------------|--------------------------|---------------------------|---------------------------|
|                       | $\text{HD}^{16}\text{O}$ | $\text{H}_2^{17}\text{O}$ | $\text{H}_2^{18}\text{O}$ |
| 3c                    | N/A                      | $3.66 \times 10^{-4}$     | $1.77 \times 10^{-3}$     |
| 4c                    | $1.20 \times 10^{-3}$    | $3.63 \times 10^{-4}$     | $1.79 \times 10^{-3}$     |
| 5c                    | $9.22 \times 10^{-4}$    | $3.59 \times 10^{-4}$     | $1.83 \times 10^{-3}$     |
| 8c                    | N/A                      | N/A                       | N/A                       |
| 9c                    | $6.70 \times 10^{-4}$    | N/A                       | N/A                       |
| 10c                   | $8.75 \times 10^{-4}$    | $3.68 \times 10^{-4}$     | $2.08 \times 10^{-3}$     |
| Moyenne expérimentale | $9.17 \times 10^{-4}$    | $3.64 \times 10^{-4}$     | $1.86 \times 10^{-3}$     |
| Rapport naturel [64]  | $3.11 \times 10^{-4}$    | $3.72 \times 10^{-4}$     | $1.99 \times 10^{-3}$     |

Table 25 : Région 6400 – 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Rapports isotopiques mesurés pour  $\text{HD}^{16}\text{O}$  sur les spectres longs parcours.

La Table 26 donne les rapports moyens déterminés par ajustement de la pression partielle ainsi que l'écart en pourcent par rapport à la valeur du rapport naturel. L'augmentation du rapport d' $\text{HD}^{16}\text{O}$ , environ 3 fois supérieure par rapport au rapport naturel, n'influe que très peu sur le rapport d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  de l'ordre de 0.05 %.

| Espèce                    | Rapports expérimentaux moyen  | Rapport naturel [64]  |
|---------------------------|-------------------------------|-----------------------|
| $\text{H}_2^{16}\text{O}$ | 0.9968 (0.05%)                | 0.9973                |
| $\text{H}_2^{18}\text{O}$ | $1.86 \times 10^{-3}$ (6.53%) | $1.99 \times 10^{-3}$ |
| $\text{H}_2^{17}\text{O}$ | $3.64 \times 10^{-4}$ (2.15%) | $3.72 \times 10^{-4}$ |
| $\text{HD}^{16}\text{O}$  | $9.17 \times 10^{-4}$ (66%)   | $3.11 \times 10^{-4}$ |

Table 26 : Région spectrale 6400 – 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Moyenne des rapports isotopiques mesurés par ajustement de la pression partielle dans MultiFIT, entre parenthèse le pourcentage d'écart avec la valeur du rapport naturel.

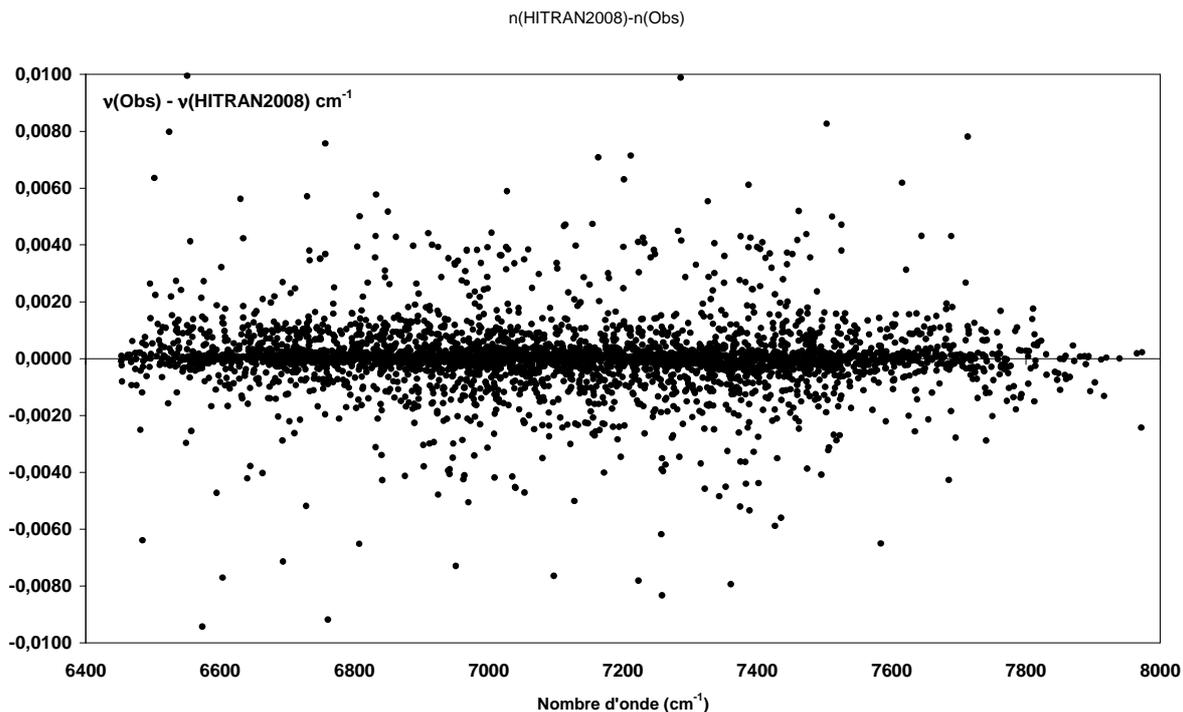
## 4 Calibration en position des spectres

Dans la région de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$ , les bases de données se réfèrent aux positions de R.A. Toth, listées dans la compilation [52], alors que dans la région de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  se sont les positions de J.Y. Mandin [81]. L'étude expérimentale menée par R.N. Tolchenov et J. Tennyson (2005) [88] dans la région de 7400 à 9600  $\text{cm}^{-1}$  propose également une liste de positions expérimentales. Les paramètres spectroscopiques ont été obtenus sur un spectre enregistré par R. Schermaul [104] calibré en position sur des spectres enregistrés au Kitt Peak (Jet Propulsion Laboratory, USA) [105]. Malheureusement la précision de mesure des positions n'est pas indiquée dans la publication de R.N. Tolchenov, et aucune comparaison avec HITRAN n'a été menée. Par ailleurs le but principal du travail de R.N. Tolchenov et J. Tennyson était la mesure des intensités des raies d'absorption et non la détermination précises des fréquences. Enfin l'étude menée par A. Jenouvrier et al. (2007) [10] dans la région spectrale de 4200 à 6600  $\text{cm}^{-1}$ , a une gamme spectrale en commun avec notre travail trop petite pour permettre la calibration de nos spectres. Par ailleurs dans cette région en commun (6400-6600  $\text{cm}^{-1}$ ) ce sont particulièrement des raies faibles qui sont présentes, ainsi la calibration ne seraient pas significative pour l'ensemble des spectres enregistrés.

C'est pourquoi, pour la calibration des spectres enregistrés au laboratoire, nous avons utilisé les données listées dans HITRAN, pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  dans la région spectrale revue par R.A. Toth [52], c'est à dire la région spectrale allant de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$ . La précision annoncée de ces valeurs dans la base HITRAN2008 est entre 0.01 et 0.001  $\text{cm}^{-1}$ . Les spectres de la région spectrale n°1 ont donc été calibrés en considérant des raies isolées et bien définies pour chaque série de spectres, ce qui a conduit une correction constante sur l'ensemble de la gamme spectrale pour chaque série de spectre et qui peut être reliée à l'optique utilisée pour l'enregistrement.

| Série de spectre (Table 24) | Longueur de parcours (m) | Correction en position (mk) |
|-----------------------------|--------------------------|-----------------------------|
| 1                           | 0.30                     | 1.4                         |
| 2                           | 36                       | 4                           |
| 3                           | 200                      | 0.7                         |
| 4                           | 600                      |                             |
| 5                           | 1200                     | 1.7                         |

Table 27 : Corrections en position appliquées sur les spectres enregistrés dans la région spectrale de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$  (Table 24)



**Figure 56 : Ecart avec les positions d'HITRAN2008 après calibration en position de la région spectrale 6400 – 8000 cm<sup>-1</sup>.**

Dans la région spectrale n°1, après calibration l'écart moyen entre nos positions et les données d'HITRAN2008 est de 0.2 mk. Nous avons tenté de considérer également les positions listées dans HITRAN pour la région centrée à 8800 cm<sup>-1</sup>, cependant les écarts obtenus avec nos mesures n'ont pas permis de trouver une tendance générale. Pour fournir un ensemble cohérent sur la région spectrale 6400 – 9400 cm<sup>-1</sup>, nous avons choisi de calibrer en position les spectres de la région n°2 en considérant les raies mesurées à la fois sur les spectres de la région n°1 et sur les spectres de la région n°2.

## Chapitre 5.

### Statistiques des transitions mesurées

L'ensemble des 39 spectres, dont les conditions expérimentales ont été détaillées au paragraphe précédent, a permis de mesurer plus de 11 000 transitions pour l'isotopologue principal et les isotopologues  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$ . La **Erreur ! Source du renvoi introuvable.** présente par isotopologue, le nombre de raies mesurées en comparaison des données listées dans HITRAN2008 [15]. Les mesures d'intensités couvrent la gamme allant de  $1 \times 10^{-19}$  à  $1 \times 10^{-27}$  cm/molec.

|  |                                  | $\text{H}_2^{16}\text{O}$ | $\text{H}_2^{18}\text{O}$ | $\text{H}_2^{17}\text{O}$ | $\text{HD}^{16}\text{O}$ |               |
|--|----------------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------|
| Région 1 :<br>6400 – 8000 $\text{cm}^{-1}$ | Raies mesurées                   | 4421                      | 725                       | 321                       | 552                      |               |
|  | Raies listées dans<br>HITRAN2008 | 4087                      | 1294                      | 918                       | 1117                     |               |
| Région 2 :<br>8000 – 9400 $\text{cm}^{-1}$ | Raies mesurées                   | 3883                      | 616                       | 250                       | 301                      |               |
|  | Raies listées dans<br>HITRAN2008 | 1964                      | 592                       | 319                       | 0                        |               |
| Total des raies<br>mesurées                |                                  | 8304                      | 1341                      | 571                       | 853                      | <b>11 069</b> |

Table 28 : Nombre de raies mesurées par isotopologues dans la région spectrale 6400 – 9400  $\text{cm}^{-1}$ .

Cette étude a été menée avec des enregistrements d'eau naturelle, cependant la mesure des transitions les plus fortes des isotopologues  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$  a été possible avec les spectres de plus long parcours. Pour ces isotopologues, le résultat marquant est la mesure de transitions d' $\text{HD}^{16}\text{O}$  dans la région 2 (8000 – 9400  $\text{cm}^{-1}$ ) alors que les bases de données les plus récentes en sont totalement exemptes. Malgré tout, pour chacun des isotopologues, ce travail a permis l'estimation de nouveaux paramètres spectroscopiques pour des transitions non répertoriées dans les bases de données.

L'attribution des spectres expérimentaux a été menée par S. Mikhailenko de l'IAO, à partir des listes calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke. Au terme de ce processus, moins de 1% des transitions mesurées sont restées non attribuées. Afin de résumer l'ensemble des mesures effectuées dans la région de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ , la totalité des transitions mesurées sont représentées

(figures 77 et 78), par isotopologues en fonction de l'intensité et du nombre d'onde, avec les données listées dans les bases spectroscopiques les plus récentes [15][59].

Enfin les statistiques générales des attributions obtenues dans la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  sont présentées. L'isotopologue principal est présenté à la **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**, et les isotopologues minoritaires à la **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**. Chacune de ces tables donne bande par bande :

- Les positions minimum et maximum mesurées ( $\text{cm}^{-1}$ )
- le nombre de transitions mesurées
- Les nombres quantiques  $J_{\text{Max}}$ ,  $K_{\text{max}}$ . (attribution S. Mikhailenko)
- Les intensités observées  $S(\text{Obs})$  minimum et maximum
- La somme des intensités observées  $\Sigma[S(\text{Obs})]$  et des intensités calculées, des transitions mesurées, de H. Partridge et D.W. Schwenke  $\Sigma[S(\text{PS})]$
- La différence entre la somme des intensités observées et calculées (%)

Le calcul de la somme des intensités mesurées par bande est faussé dans le cas où une transition expérimentale est donnée par la théorie comme la somme de plusieurs composantes appartenant à des bandes différentes ou des isotopologues différents. Expérimentalement pour ces transitions il n'est possible de donner qu'une seule valeur d'intensité. Dans le calcul de la différence entre les sommes des intensités les écarts importants peuvent être reliés à ces transitions et ces écarts ne peuvent pas être considérés comme significatifs. Bien entendu pour les bandes les plus fortes cet effet est masqué et les écarts sont alors significatifs.



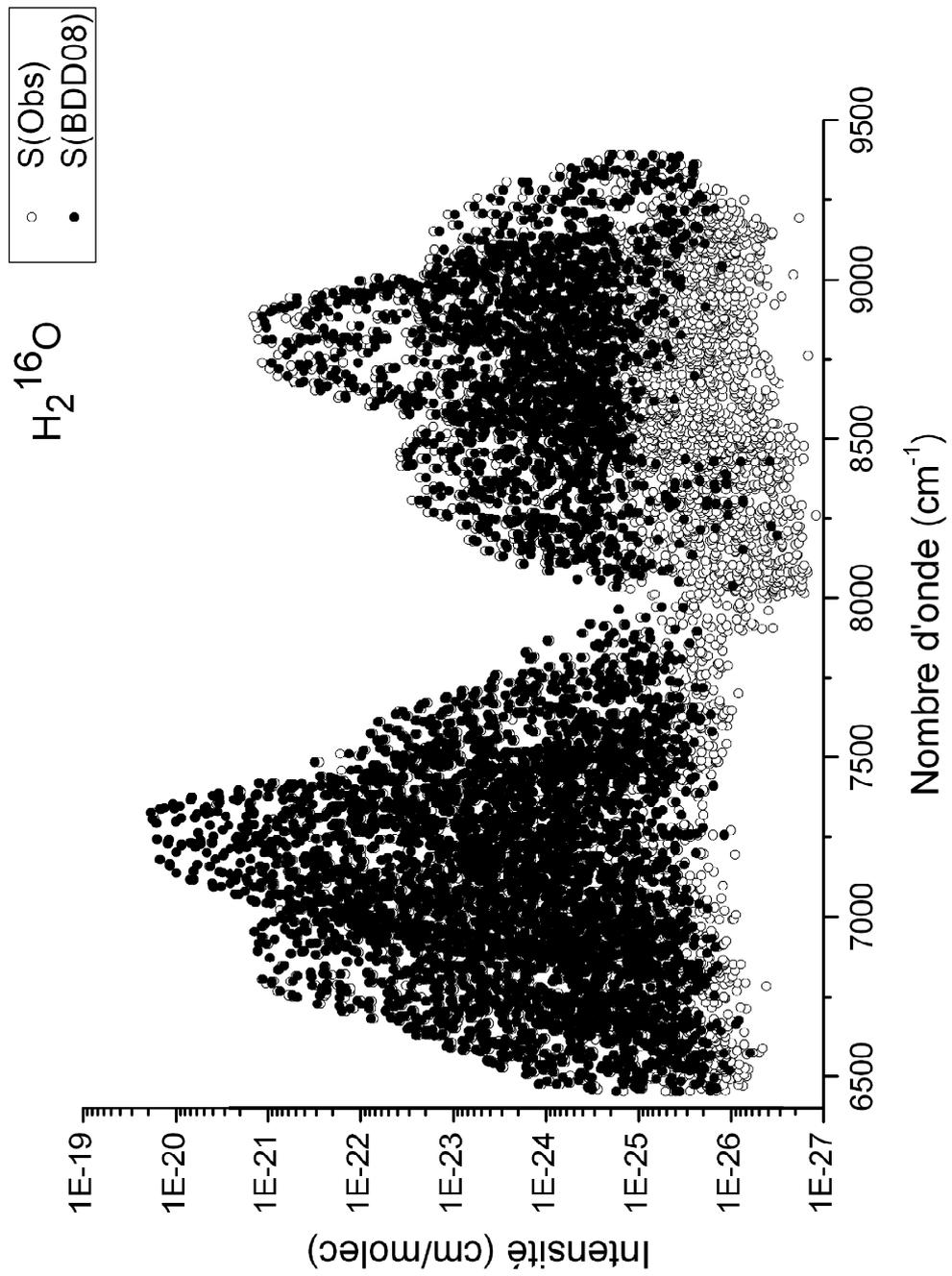


Figure 57 : Ensemble des transitions d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O mesurées dans la région spectrale de 6400 à 9400 cm<sup>-1</sup>. Comparaison avec les données listées dans les BDD08 [15][59]

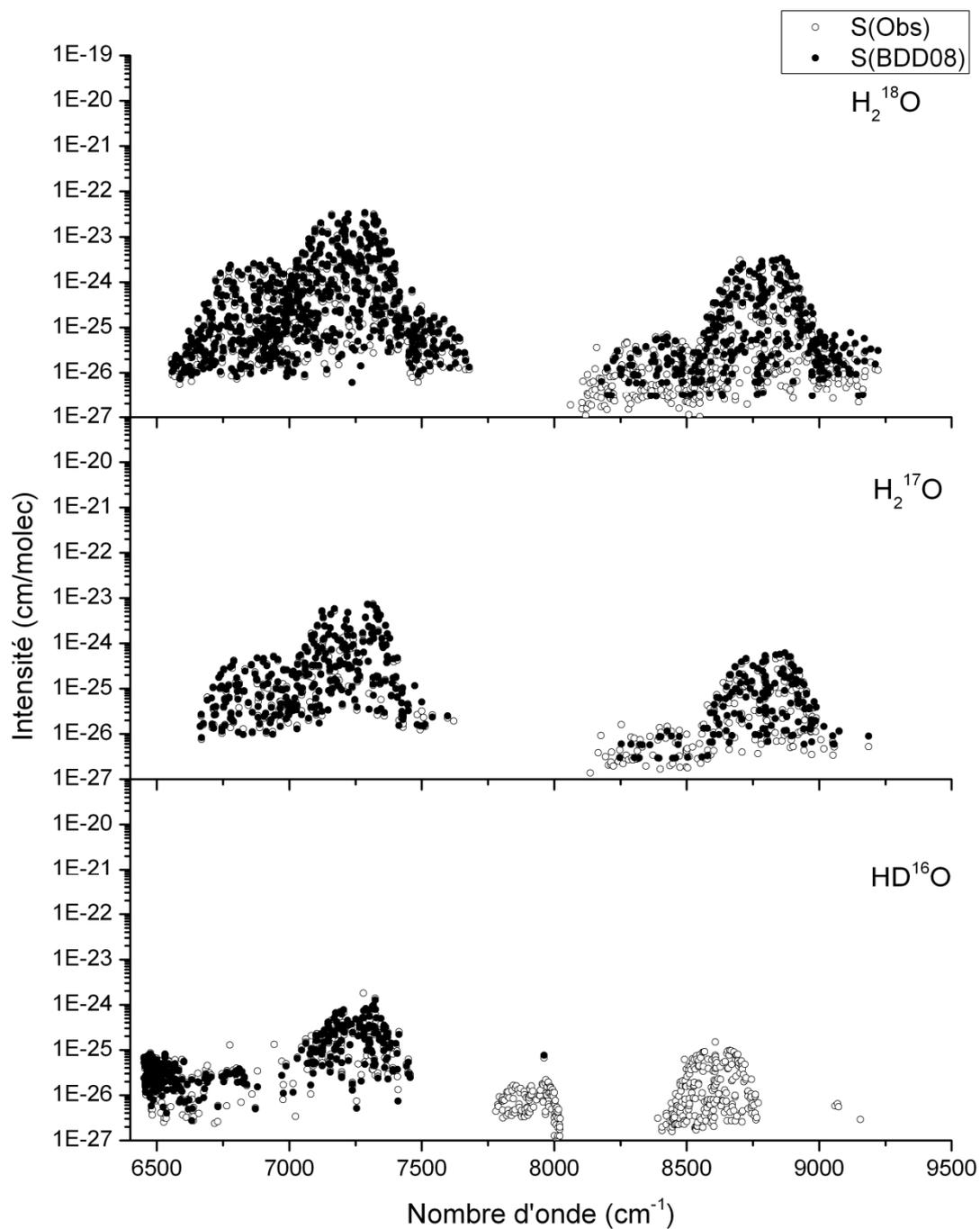


Figure 58 : Ensemble des transitions mesurées pour les isotopologues  $H_2^{18}O$ ,  $H_2^{17}O$  et  $HD^{16}O$  dans la région spectrale de 6400 à 9400  $cm^{-1}$ . Comparaison avec les données listées dans les BDD08 [15][59]

| Bande                                    | v (cm <sup>-1</sup> ) |         | Nb de transitions | J <sub>max</sub> | K <sub>a max</sub> | S(Obs)    |          | Σ[S(Obs)]       | Σ[S(PS)]        | Σ[S(Obs)]/Σ[S(PS)] |
|--|-----------------------|---------|-------------------|------------------|--------------------|-----------|----------|-----------------|-----------------|--------------------|
|  | Min                   | Max     |                   |                  |                    | Min       | Max      |                 |                 |                    |
| 101-000                                  | 6453.14               | 7815.73 | 975               | 18               | 11                 | 1.678E-27 | 1.17E-20 | 5.30E-19        | 5.48E-19        | -3%                |
| 200-000                                  | 6454.16               | 8091.55 | 860               | 16               | 10                 | 1.85E-27  | 2.68E-21 | 7.92E-20        | 8.37E-20        | -5%                |
| 111-000                                  | 7346.02               | 9388.75 | 853               | 17               | 10                 | 1.61E-27  | 1.43E-21 | 4.13E-20        | 4.08E-20        | 1%                 |
| 021-000                                  | 6453.14               | 7815.73 | 766               | 17               | 9                  | 4.58E-27  | 1.39E-21 | 4.38E-20        | 4.40E-20        | -1%                |
| 031-000                                  | 7904.78               | 7815.73 | 710               | 16               | 8                  | 1.70E-27  | 3.72E-23 | 1.39E-21        | 1.36E-21        | 2%                 |
| 002-000                                  | 6646.75               | 7815.73 | 690               | 15               | 10                 | 1.60E-27  | 2.02E-22 | 4.02E-21        | 4.31E-21        | -7%                |
| 012-000                                  | 8391.00               | 9392.00 | 580               | 14               | 8                  | 1.45E-27  | 2.67E-23 | 8.43E-22        | 8.79E-22        | -4%                |
| 210-000                                  | 8066.17               | 9348.71 | 572               | 14               | 8                  | 1.97E-27  | 4.36E-22 | 1.76E-21        | 1.70E-21        | 4%                 |
| 130-000                                  | 7240.94               | 9497.65 | 563               | 14               | 8                  | 1.47E-27  | 1.12E-22 | 4.87E-22        | 4.67E-22        | 4%                 |
| 120-000                                  | 6452.85               | 7761.66 | 547               | 14               | 8                  | 6.82E-27  | 1.53E-22 | 2.57E-21        | 2.63E-21        | -2%                |
| 120-010                                  | 8424.55               | 9088.29 | 183               | 12               | 6                  | 2.79E-27  | 1.21E-24 | 3.01E-23        | 3.15E-23        | -4%                |
| 111-010                                  | 6827.85               | 7598.56 | 166               | 13               | 6                  | 7.86E-27  | 8.28E-24 | 1.67E-22        | 1.77E-22        | -6%                |
| 031-010                                  | 6533.61               | 7360.31 | 156               | 11               | 7                  | 6.84E-27  | 1.63E-24 | 4.21E-23        | 4.40E-23        | -4%                |
| 050-000                                  | 7195.29               | 9033.76 | 121               | 14               | 8                  | 1.19E-27  | 8.23E-24 | 1.60E-23        | 1.51E-23        | 6%                 |
| 041-010                                  | 8059.67               | 8859.49 | 108               | 10               | 5                  | 1.89E-27  | 5.45E-26 | 1.45E-24        | 1.35E-24        | 7%                 |
| 040-000                                  | 6463.06               | 7580.81 | 104               | 14               | 9                  | 4.20E-27  | 2.56E-23 | 8.89E-23        | 8.54E-23        | 4%                 |
| 210-010                                  | 6797.18               | 7493.48 | 90                | 8                | 5                  | 1.45E-26  | 3.45E-24 | 2.25E-23        | 2.36E-23        | -5%                |
| 201-010                                  | 8537.31               | 9146.82 | 54                | 6                | 9                  | 3.40E-27  | 4.69E-26 | 7.49E-25        | 6.88E-25        | -5%                |
| 140-010                                  | 7999.06               | 8602.39 | 53                | 6                | 4                  | 1.52E-27  | 1.25E-26 | 2.25E-25        | 2.23E-25        | 1%                 |
| 130-010                                  | 6489.77               | 7009.64 | 44                | 8                | 5                  | 4.58E-27  | 1.39E-21 | 4.38E-20        | 4.40E-20        | -1%                |
| 060-000                                  | 8184.45               | 9117.37 | 36                | 9                | 1                  | 4.84E-27  | 9.63E-23 | 1.28E-22        | 8.44E-23        | 52%                |
| 022-010                                  | 8762.73               | 9177.60 | 24                | 5                | 4                  | 6.31E-27  | 1.78E-26 | 2.37E-25        | 2.13E-25        | 12%                |
| 220-010                                  | 8531.47               | 8919.85 | 22                | 7                | 3                  | 2.43E-27  | 8.84E-26 | 3.15E-25        | 2.91E-25        | 8%                 |
| 012-010                                  | 7044.47               | 7625.81 | 8                 | 6                | 5                  | 1.07E-26  | 1.29E-25 | 2.89E-25        | 2.75E-25        | 5%                 |
| 201-000                                  | 6700-31               | 6754.41 | 6                 | 8                | 7                  | 1.71E-26  | 3.05E-26 | 7.52E-26        | 1.87E-25        | -60%               |
| 070-010                                  | 8526.91               | 8858.55 | 4                 | 8                | 7                  | 7.84E-27  | 2.60E-26 | 3.38E-26        | 4.65E-26        | -27%               |
| 300-010                                  | 9080.01               | 9140.77 | 3                 | 8                | 4                  | 3.69E-27  | 4.94E-27 | 8.63E-27        | 9.82E-27        | -12%               |
| 060-010                                  | 6937.95               | 8930.57 | 3                 | 8                | 6                  | 2.64E-26  | 1.44E-25 | 1.70E-25        | 7.60E-26        | 124%               |
| 050-010                                  | 6968.30               | 6968.30 | 1                 | 10               | 5                  | N/A       | N/A      |                 | 7.42E-27        |                    |
| 300-000                                  | 8002.56               | 8002.56 | 1                 | 8                | 1                  | N/A       | N/A      |                 | 3.57E-27        |                    |
| <b>H<sub>2</sub><sup>16</sup>O</b>       |                       |         |                   |                  |                    |           |          |                 |                 |                    |
| <b>Total H<sub>2</sub><sup>16</sup>O</b> |                       |         |                   |                  |                    |           |          |                 |                 |                    |
|  |                       |         |                   |                  |                    |           |          | <b>7.50E-19</b> | <b>7.73E-19</b> | <b>-3%</b>         |

Table 29 : Statistique des attributions des transitions obtenues pour H<sub>2</sub><sup>16</sup>O

| Bande   | v (cm <sup>-1</sup> ) |         | Nb de transitions | J <sub>max</sub> | K <sub>a max</sub> | S(Obs)                                   |          |                 | Σ[S(Obs)]       | Σ[S(PS)]   | Σ[S(Obs)]/Σ[S(PS)] |
|---------|-----------------------|---------|-------------------|------------------|--------------------|--|----------|-----------------|-----------------|------------|--------------------|
|         | Min                   | Max     |                   |                  |                    | Min                                      | Max      | Max             |                 |            |                    |
| 111-000 | 8428.82               | 9165.02 | 272               | 15               | 6                  | 1,14E-27                                 | 3,08E-24 | 7,75E-23        | 7,75E-23        | 1%         |                    |
| 101-000 | 6739.69               | 7627.49 | 250               | 13               | 6                  | 9,42E-27                                 | 3,21E-23 | 8,26E-22        | 8,55E-22        | -5%        |                    |
| 021-000 | 6556.67               | 7410.96 | 171               | 11               | 8                  | 8,14E-27                                 | 2,57E-24 | 6,41E-23        | 6,54E-23        | -2%        |                    |
| 200-000 | 6788.68               | 7494.51 | 162               | 12               | 7                  | 8,46E-27                                 | 6,12E-24 | 1,04E-22        | 1,10E-22        | -6%        |                    |
| 031-000 | 8131.48               | 9028.25 | 134               | 11               | 7                  | 1,48E-27                                 | 6,93E-26 | 1,91E-24        | 1,97E-24        | -3%        |                    |
| 002-000 | 7022.98               | 7678.94 | 77                | 9                | 7                  | 6,18E-27                                 | 3,77E-25 | 4,63E-24        | 5,00E-24        | -7%        |                    |
| 012-000 | 8497.12               | 9222.42 | 74                | 9                | 5                  | 1,01E-27                                 | 2,26E-25 | 1,43E-24        | 1,43E-24        | 0%         |                    |
| 130-000 | 8061.47               | 8549.51 | 69                | 9                | 5                  | 1,09E-27                                 | 3,58E-26 | 3,33E-25        | 3,18E-25        | 5%         |                    |
| 210-000 | 8441.89               | 9017.91 | 66                | 12               | 7                  | 1,01E-27                                 | 2,26E-25 | 1,920E-24       | 1,64E-24        | 16%        |                    |
| 120-000 | 6558.69               | 7015.00 | 62                | 8                | 5                  | 5,50E-27                                 | 3,54E-25 | 2,35E-24        | 2,36E-24        | 0%         |                    |
| 031-010 | 6819.65               | 6819.65 | 1                 | 3                | 1                  | N/A                                      | N/A      |                 | 3,19E-27        |            |                    |
| 040-000 | 6630.68               | 6630.68 | 1                 | 9                | 4                  | 6,41E-27                                 | 6,41E-27 | 6,41E-27        | 7,38E-27        | -13%       |                    |
| 041-010 | 8524.17               | 8524.17 | 1                 | 7                | 3                  | N/A                                      | N/A      |                 | 6,61E-27        |            |                    |
| 050-000 | 8219.29               | 8219.29 | 1                 | 8                | 5                  | N/A                                      | N/A      |                 | 7,55E-27        |            |                    |
| 111-010 | 7269.24               | 7269.24 | 1                 | 4                | 0                  | 1,40E-26                                 | 1,40E-26 | 1,40E-26        | 1,54E-26        | -9%        |                    |
|         |                       |         |                   |                  |                    | <b>Total H<sub>2</sub><sup>18</sup>O</b> |          | <b>1,08E-21</b> | <b>1,12E-21</b> | <b>-3%</b> |                    |
| 111-000 | 8509.80               | 9051.73 | 162               | 11               | 6                  | 2,79E-27                                 | 5,38E-25 | 1,41E-23        | 1,34E-23        | 5%         |                    |
| 101-000 | 6933.49               | 7540.12 | 144               | 12               | 6                  | 1,13E-26                                 | 7,42E-24 | 1,35E-22        | 1,38E-22        | -2%        |                    |
| 021-000 | 6668.30               | 7371.56 | 89                | 10               | 6                  | 7,55E-27                                 | 5,25E-25 | 1,04E-23        | 1,07E-23        | -3%        |                    |
| 200-000 | 6826.45               | 7430.66 | 69                | 9                | 5                  | 1,29E-26                                 | 1,16E-24 | 1,20E-23        | 1,29E-23        | -7%        |                    |
| 031-000 | 8193.71               | 8920.61 | 50                | 12               | 5                  | 1,78E-27                                 | 1,75E-26 | 2,74E-25        | 2,47E-25        | 11%        |                    |
| 012-000 | 8781.65               | 9187.31 | 14                | 8                | 4                  | 3,37E-27                                 | 1,16E-26 | 6,90E-26        | 6,69E-26        | 3%         |                    |
| 210-000 | 8681.89               | 8953.86 | 13                | 6                | 4                  | 3,69E-27                                 | 1,15E-25 | 3,43E-25        | 3,24E-25        | 6%         |                    |
| 120-000 | 6664.83               | 6919.35 | 12                | 5                | 3                  | 1,05E-26                                 | 1,01E-25 | 2,63E-25        | 2,83E-25        | -7%        |                    |
| 130-000 | 8136.65               | 8400.26 | 11                | 5                | 2                  | 1,38E-27                                 | 9,24E-27 | 3,45E-26        | 2,13E-26        | 62%        |                    |
| 002-000 | 7392.84               | 7620.84 | 6                 | 7                | 4                  | 1,24E-26                                 | 1,39E-25 | 2,19E-25        | 2,44E-25        | -10%       |                    |
|         |                       |         |                   |                  |                    | <b>Total H<sub>2</sub><sup>17</sup>O</b> |          | <b>1,73E-22</b> | <b>1,76E-22</b> | <b>-2%</b> |                    |

H<sub>2</sub><sup>18</sup>O

H<sub>2</sub><sup>17</sup>O

| Bande   | v (cm <sup>-1</sup> ) |         | Nb de transitions | J <sub>max</sub> | Ka <sub>max</sub> | S(Obs)                   |           | Σ[S(Obs)] | Σ[S(PS)] | Σ[S(Obs)]/Σ[S(PS)] |
|---------|-----------------------|---------|-------------------|------------------|-------------------|--------------------------|-----------|-----------|----------|--------------------|
|         | Min                   | Max     |                   |                  |                   | Min                      | Max       |           |          |                    |
| 012-000 | 8391.16               | 8770.19 | 252               | 13               | 7                 | 2.25E-27                 | 2.17E-25  | 7.23E-24  | 5.03E-24 | 44%                |
| 002-000 | 6880.31               | 7456.70 | 217               | 13               | 7                 | 3.39E-27                 | 1.79E-24  | 3.54E-23  | 4.24E-23 | -17%               |
| 300-000 | 7779.86               | 8022.54 | 115               | 11               | 5                 | 7.08E-28                 | 6.64E-26  | 9.66E-25  | 8.72E-25 | 11%                |
| 101-000 | 6452.18               | 6637.45 | 106               | 11               | 6                 | 2.73E-27                 | 8.66E-26  | 3.08E-24  | 3.20E-24 | -4%                |
| 021-000 | 6451.55               | 8565.49 | 80                | 10               | 6                 | 2.52E-27                 | 1.38E-24  | 3.05E-24  | 3.16E-24 | -3%                |
| 210-000 | 6592.94               | 6859.34 | 49                | 9                | 4                 | 2.36E-27                 | 1.28E-25  | 7.23E-24  | 5.03E-24 | 44%                |
| 111-000 | 7838.91               | 8478.25 | 11                | 10               | 4                 | 3.19E-27                 | 7.78E-27  | 4.56E-26  | 4.03E-26 | 13%                |
| 031-000 | 7820.21               | 8588.17 | 6                 | 15               | 3                 | 3.52E-27                 | 2.31E-26  | 4.43E-26  | 3.59E-26 | 23%                |
| 050-000 | 6597.98               | 8495.50 | 5                 | 11               | 4                 | 3.66E-27                 | 2.28E-26  | 3.87E-26  | 3.01E-26 | 29%                |
| 201-000 | 9060.46               | 9155.52 | 4                 | 5                | 3                 | 4.16E-27                 | 9.24E-27  | 2.98E-26  | 4.96E-27 | 500%               |
| 130-000 | 8497.12               | 8521.85 | 2                 | 9                | 3                 | 1.10E-27                 | 8.13E-27  | 9.23E-27  | 5.61E-27 | 65%                |
| 200-000 | 8002.58               | 8002.58 | 2                 | 12               | 4                 | 6.00E-27                 | 6.00 E-27 | 6.00E-27  | 1.66E-27 | 262%               |
| 040-000 | 6542.85               | 6542.85 | 1                 | 7                | 4                 | 2.73E-26                 | 2.73E-26  | 2.73E-26  | 2.78E-26 | -2%                |
| 041-010 | 8478.58               | 8478.58 | 1                 | 5                | 3                 |                          |           |           |          |                    |
| 060-000 | 7869.26               | 7869.26 | 1                 | 2                | 0                 | 5.38E-27                 | 5.38E27   | 5.38E-27  | 3.01E-26 | -82%               |
| 121-010 | 8570.56               | 8570.56 | 1                 | 6                | 4                 |                          |           |           |          |                    |
|         |                       |         |                   |                  |                   | Total HD <sup>16</sup> O |           | 5.72E-23  | 5.99E-23 | -5%                |

Table 30 : Statistique des attributions obtenues pour les isotopologues mineurs : H<sub>2</sub><sup>18</sup>O, H<sub>2</sub><sup>17</sup>O et HD<sup>16</sup>O

## **Chapitre 3.**

# **Comparaisons et discussions des intensités mesurées.**

Afin d'organiser la discussion autour des résultats obtenus dans ce travail, la première partie de ce chapitre sera consacrée à l'isotopologue principal. Les références des bases de données, détaillées à la Table 23, et les conclusions de plusieurs travaux ont été développés au chapitre 1. Cette étude bibliographique fait apparaître pour la région de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  [95][96] une importante incohérence au niveau des intensités des raies d'absorption en comparaison avec les bases de données spectroscopiques récentes HITRAN2008 [15] et GEISA09 [59]. Pour cette même région, J. Bailey [97] et L.P. Giver et al. [93] mentionnent dans leurs travaux, un manque important de transitions listées dans les bases de données. C'est pourquoi les résultats obtenus pour cette région spectrale seront développés en premiers. En revanche, la région de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$  a été revue par R.A. Toth [52], et présente maintenant une série de données cohérentes [95][96]. Les résultats pour cette région seront présentés dans un second paragraphe en s'attachant particulièrement à regarder la cohérence des mesures sur l'ensemble de la gamme spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ .

La seconde partie de ce chapitre présentera les résultats obtenus pour les isotopologues mineurs ( $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ). Pour commencer une brève introduction permettra de donner les références des bases de données pour ces isotopologues ainsi que les travaux expérimentaux déjà publiés pour cette région spectrale. Suivant le même principe que pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , la région de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  sera présentée en premier, suivi d'une vue globale de la région spectrale de ce travail.

**Notice préliminaire :**

Le lecteur pourra se référer à la table ci-dessous afin de retrouver pour chaque Figure de comparaison du chapitre n°3 : le nombre de transitions comparées par isotopologue et par source de données.

|  |                                | HITRAN2008 [15] | R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98] <sup>a</sup> | A.W. Liu et al.[99] <sup>b</sup> | S. Mikhailenko et al. [101] <sup>c</sup> | S. Mikhailenko et al. [100] <sup>d</sup> | PS [38][39] |
|--|--------------------------------|-----------------|---|----------------------------------|--|--|-------------|
| <b>Région 1</b><br><b>6400-8000</b><br><b>cm<sup>-1</sup></b>  | H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O | 3763            | 403   | N/A                              | 515                                      | 638                                      | 4421        |
|  | H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O | 695             | 16  | N/A                              | N/A                                      | N/A                                      | 725         |
|  | H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O | 324             | 0   | N/A                              | N/A                                      | N/A                                      | 321         |
|  | HD <sup>16</sup> O             | 395             | 0   | N/A                              | N/A                                      | N/A                                      | 552         |
| <b>Région 2</b><br><b>8000-9400</b><br><b>cm<sup>-1</sup></b>  | H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O | 1875            | 1371  | N/A                              | N/A                                      | N/A                                      | 3883        |
|  | H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O | 336             | 109   | 541                              | N/A                                      | N/A                                      | 616         |
|  | H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O | 165             | 18  | 155                              | N/A                                      | N/A                                      | 250         |
|  | HD <sup>16</sup> O             | 0               | 0   | N/A                              | N/A                                      | N/A                                      | 301         |
| <sup>a</sup> données à partir de 7400 cm <sup>-1</sup><br><sup>b</sup> étude enrichie des isotopologues H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O et H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O dans la région spectrale 8000-9300 cm <sup>-1</sup><br><sup>c</sup> données de 7400 à 7900 cm <sup>-1</sup><br><sup>d</sup> données de 6750 à 7000 cm <sup>-1</sup> |                                |                 |   |                                  |  |  |             |

**Table 31 : Nombre de raies comparées dans la région spectrale 6400-9400 cm<sup>-1</sup>, détaillées par isotopologue pour chaque source de la littérature.**

**Notation :**

Pour simplifier l'écriture, je ferai correspondre à BDD08 les versions des bases de données HITRAN2008 [15] et GEISA09 [59]

# **1 Isotopologue principal $H_2^{16}O$**

## **1.a Région spectrale 8000 – 9400 $cm^{-1}$**

### **.1.a.1 Bases de données : HITRAN2008 et GEISA09**

La comparaison avec les intensités des bases de données récentes (BDD08) [15][59], Figure 59, montre un profond désaccord pour les intensités de l'ordre de 10 à 15 %. De plus, le rapport d'intensité entre nos mesures ( $S(Obs)$ ) et les intensités des BDD08 est globalement supérieur à 1, ce qui revient à dire que les intensités proposées par ces bases de données sont inférieures à nos mesures. La même comparaison représentée en fonction de l'intensité des raies d'absorption apporte des éléments supplémentaires. En effet, la Figure 60, permet de constater que l'écart entre nos mesures et les intensités listées dans les BDD08 dépend de la gamme d'intensité des raies. L'écart a tendance à augmenter en même temps que l'intensité des raies augmente : si à partir de  $5 \times 10^{-25}$  cm/molec l'écart constaté est de 10 %, cet écart atteint 20 % pour les raies en  $1 \times 10^{-21}$  cm/molec. L'écart moyen de 15 % est représenté avec une ligne rouge sur la Figure 60.

Cette première comparaison menée avec les BDD08 rejoint les conclusions de R.N. Tolchenov et al. (2005) [98] qui ont avancé un écart de 9 %. Ensuite, S.E. Casanova et K.P. Shine (2006) [96], ont constaté que les intensités d'HITRAN2008 [15] étaient sous-estimées d'environ 18 %. Ces deux travaux présentent néanmoins des conclusions allant du simple au double. Pour comprendre ces différences il faut regarder quelle gamme d'intensité ces auteurs ont pu analyser. Dans le cas de l'étude de S.E. Casanova et K.P. Shine, c'est essentiellement les raies de plus fortes intensités qui sont prises en compte. Ces raies présentent des écarts entre 15 et 20 % à la Figure 60, ce qui est cohérent avec la conclusion de S.E. Casanova et K.P. Shine. En revanche, R.N. Tolchenov et J. Tennyson, comme cela a été annoncé au chapitre 1 de cette partie, ont pu atteindre des raies d'intensité allant de  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec à  $1 \times 10^{-24}$  cm/molec, limites liées aux conditions expérimentales choisies [98], et pour cette gamme d'intensité, la Figure 60 indique un écart de l'ordre de 10 %. Ce qui est donc cohérent avec les conclusions du travail de R. N. Tolchenov et J. Tennyson.

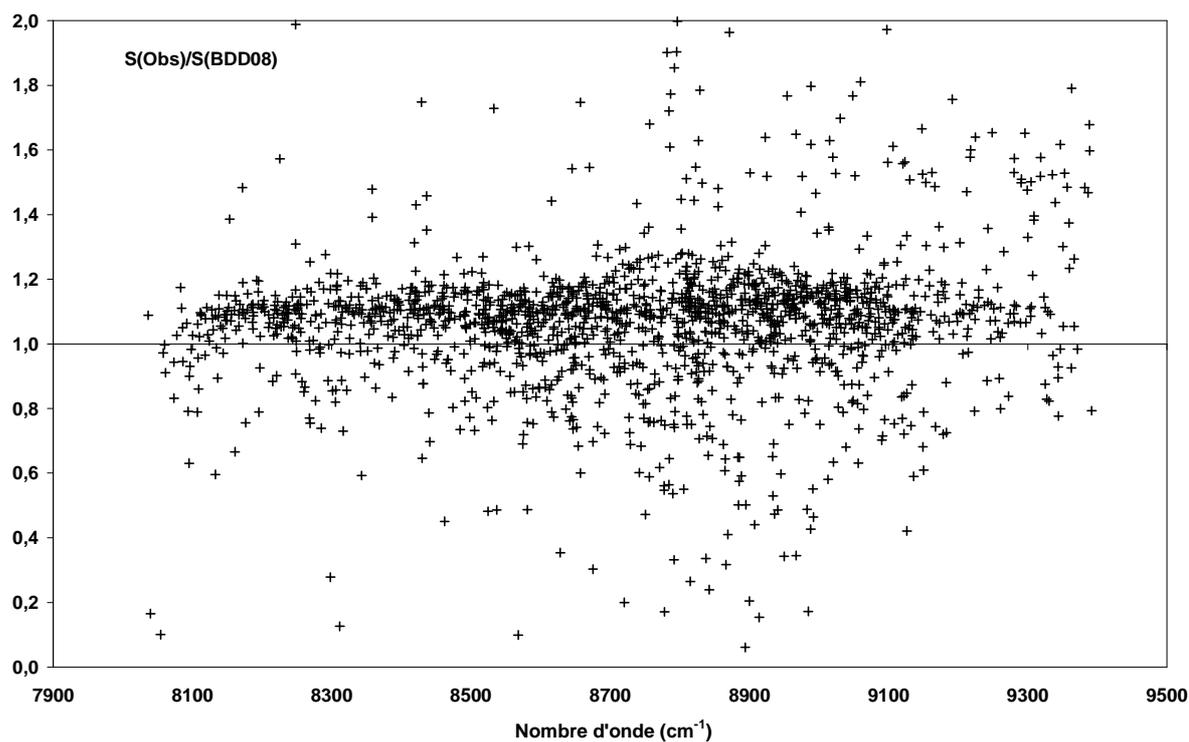


Figure 59 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale 8000-9400  $\text{cm}^{-1}$ . Comparaison des intensités obtenues  $S(\text{Obs})$  par rapport aux bases de données BDD08 [15][59]

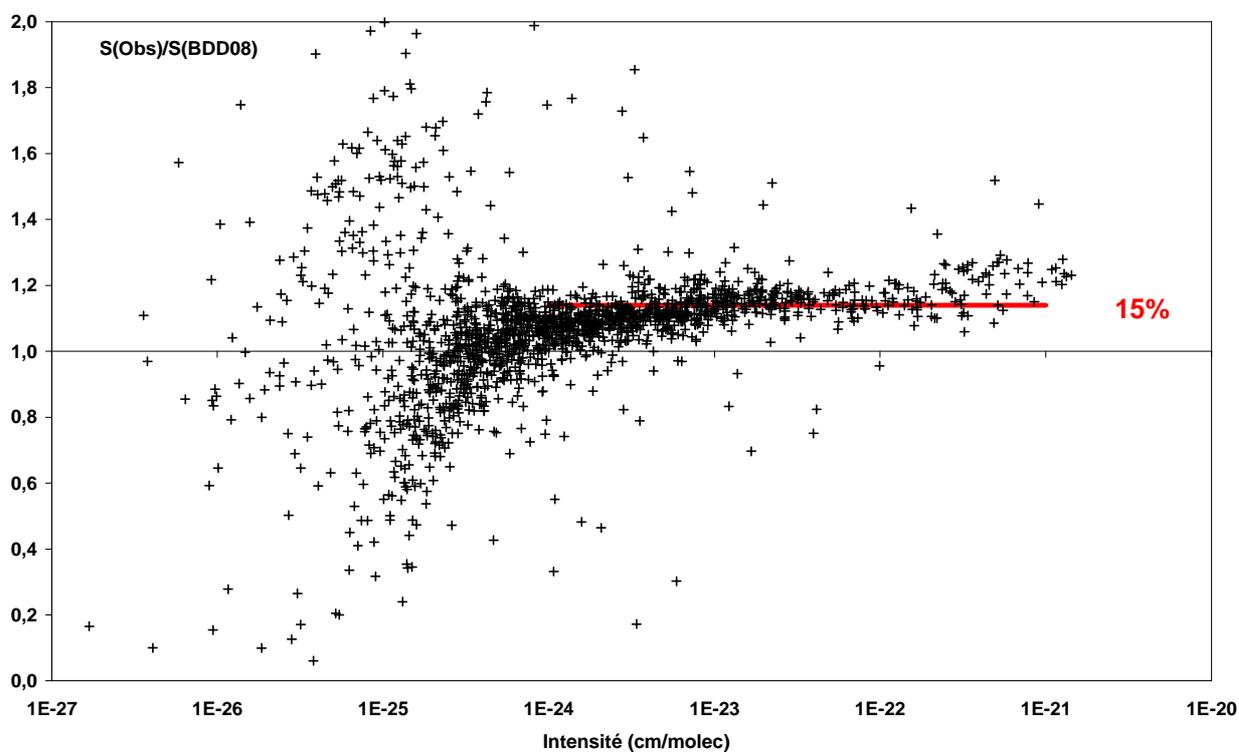


Figure 60 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale 8000-9400  $\text{cm}^{-1}$ . Rapport d'intensité entre les intensités mesurées  $S(\text{Obs})$  et les intensités listées dans les bases de données BDD08 [15][59], représenté en fonction de l'intensité.

### **.1.a.2 R.N. Tolchenov et J. Tennyson : Etude des raies d'intensités moyennes**

Cette étude [98] a été réalisée dans la région spectrale de 7400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ , à partir d'un spectre enregistré par R. Schermaul et al. [104] en abondance naturelle avec pour conditions expérimentales : température de 294.4 K, pression de 20 hPa et enfin une longueur de parcours d'absorption de 480.8 m. Avec cette longueur de parcours, les auteurs indiquent une limite de mesure des intensités à  $1 \times 10^{-24}$  cm/molec, les raies d'intensité plus élevée présentant des effets de saturation. Des problèmes d'ajustement peuvent également intervenir pour les raies de très faibles absorptions, comme on va le voir dans la Figure 61 qui présente une comparaison entre nos mesures et les données listées par R.N. Tolchenov en fonction de l'intensité des raies.

Plus de 3100 raies sont comparées à la Figure 61. Une partie de ces raies est listée dans les bases de données et les autres sont de nouvelles raies. En comparaison les figures 55 et 56 regroupent environ 1900 raies. La Figure 61 montre une très bonne cohérence pour les raies d'intensité entre  $1 \times 10^{-25}$  et  $5 \times 10^{-24}$  cm/molec. Cette gamme d'intensité sera ensuite prise comme la gamme d'intensité correcte de mesure pour R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98]. J'ai choisi de prendre en compte les raies d'intensités entre  $1 \times 10^{-24}$  et  $5 \times 10^{-24}$  cm/molec, même si les auteurs indiquent des problèmes de saturation pour ces raies, ces dernières apparaissent avec un bon accord avec nos mesures. Pour l'ensemble de la gamme d'intensité correcte, l'écart entre les données de R.N. Tolchenov et J. Tennyson et nos mesures est en moyenne de 5 %. Pour les raies les plus faibles la dispersion augmente. D'après les conditions expérimentales annoncées, le spectre de R. Schermaul et al. [104] n'est pas idéal pour en réaliser des mesures précises. Enfin dans la liste proposée par R.N. Tolchenov, les raies de plus forte intensité n'ont pas pu être mesurées et ainsi ces raies ont été prises égales à HITRAN par les auteurs. Ces raies sont représentées par des symboles noirs sur la Figure 61 et elles n'apportent aucune information supplémentaire en comparaison à nos mesures. Dans la suite de ce travail ces raies seront éliminées des graphiques afin de ne comparer que les raies effectivement mesurées par R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98].

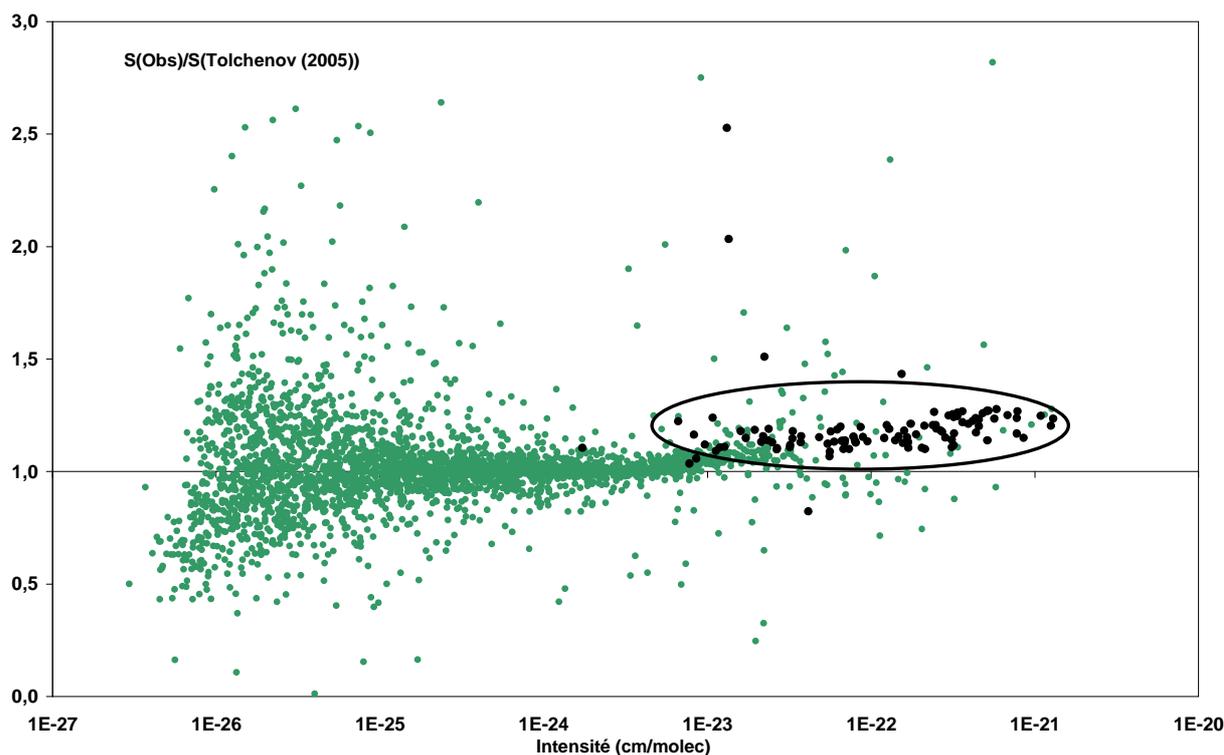


Figure 61 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectral 8000-9400  $\text{cm}^{-1}$ . Comparaison entre nos mesures et les données de R.N. Tolchenov et J. Tennyson. En noir, les raies prises égales à HITRAN2004 dans la liste de R.N. Tolchenov.

### .1.a.3 Comparaison avec les listes d'intensités calculées : PS et BT2

La comparaison avec les listes d'intensités calculées est importante car elle permet de comparer l'entière gamme d'intensité de cette étude ( $1 \times 10^{-27}$  à  $1 \times 10^{-21}$   $\text{cm}/\text{molec}$ ). En effet ceci n'est pas possible avec le travail de R.N. Tolchenov et J. Tennyson (conditions expérimentales) ou avec les BDD08, qui présentent un manque de données. La comparaison entre nos mesures et les données de H. Partridge et D.W. Schwenke est présentée à la Figure 62. Cette figure présente l'ensemble des raies d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  mesurées pour cette étude et montre un bon accord. En particulier pour les raies d'intensité les plus fortes de la région spectrale de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ , l'écart entre nos mesures et les intensités calculées n'excède pas 2 %. Sur la globalité de la gamme d'intensité mesurée l'écart moyen est inférieur à 10 %. En outre les rapports d'intensités déterminés sont centrés autour de 1, on ne peut donc pas dégager de tendances particulières (surestimation ou sous-estimation) de nos mesures qui pourraient traduire des erreurs de restitution des paramètres notamment sur les raies fortes ou sur les raies les plus faibles.

La liste calculée BT2 pour cette région spectrale présente des données qui sont très comparables à la liste proposée par H. Partridge et D.W. Schwenke. Dans cette région j'ai observé des écarts entre les deux listes allant jusqu'à 3 %. Une vérification bande par bande a été menée afin de savoir si ces écarts pouvaient être reliés à une ou plusieurs bandes en particulier. Ce travail n'a pas permis de faire apparaître des écarts systématiques. Il n'est ainsi pas intéressant de présenter une figure de comparaison entre nos données et la liste BT2.

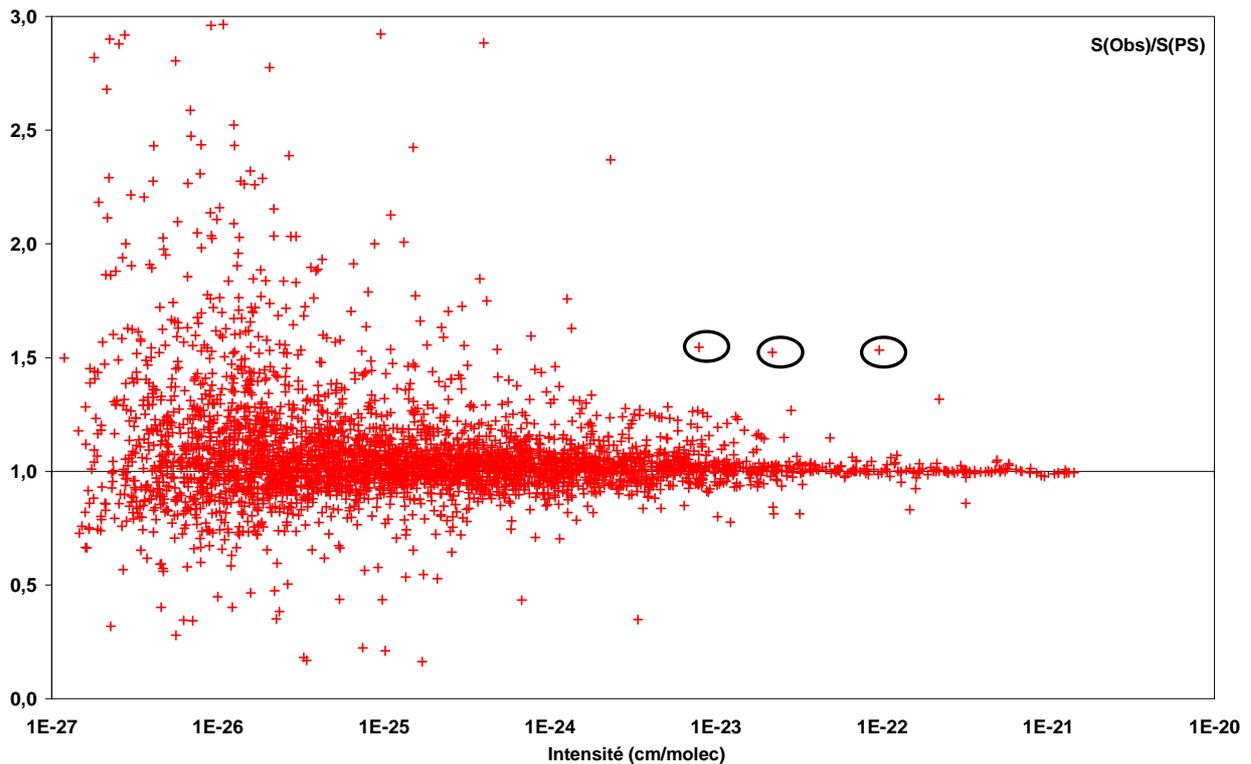


Figure 62 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale  $8000\text{-}9400\text{ cm}^{-1}$ . Comparaison de nos mesures avec les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]

Les trois transitions entourées sur la Figure 62 appartiennent à la bande 060-000. En tout, 36 transitions pour cette bande ont été mesurées, et la moyenne des écarts constatés entre nos mesures et les données PS est de 1.37. Ces raies ont été vérifiées sur nos spectres, et les résultats ont été confirmés. Ceci conduit à penser, bien que l'on ait peu de transitions comparables, que le calcul de H. Partridge et D.W. Schwenke peut être amélioré pour cette bande.

### **1.b Région spectrale globale : 6400 – 9400 $\text{cm}^{-1}$**

Dans ce paragraphe seront présentés les résultats obtenus pour les intensités dans la région de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$ . Cette région spectrale (région n°1), apparaît dans la littérature en assez bonne cohérence, notamment à partir de la version d'HITRAN2004 [16] qui a intégré les données listées par R.A. Toth [52]. Les bases de données récentes BDD08 [15][59], présente des listes de raies identiques pour cette région spectrale.

Dans cette partie, il est important de vérifier la cohérence globale de notre étude, en particulier en considérant les comparaisons pouvant être menées sur les deux régions (de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$  et de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ ) pour une seule source de données. Ceci est possible par exemple avec les données expérimentales de R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98] ou les listées d'intensités calculées (PS [38][39] et BT2 [66]). Comme pour la région n°2, je commencerai par présenter les résultats pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , puis ensuite les isotopologues mineurs.

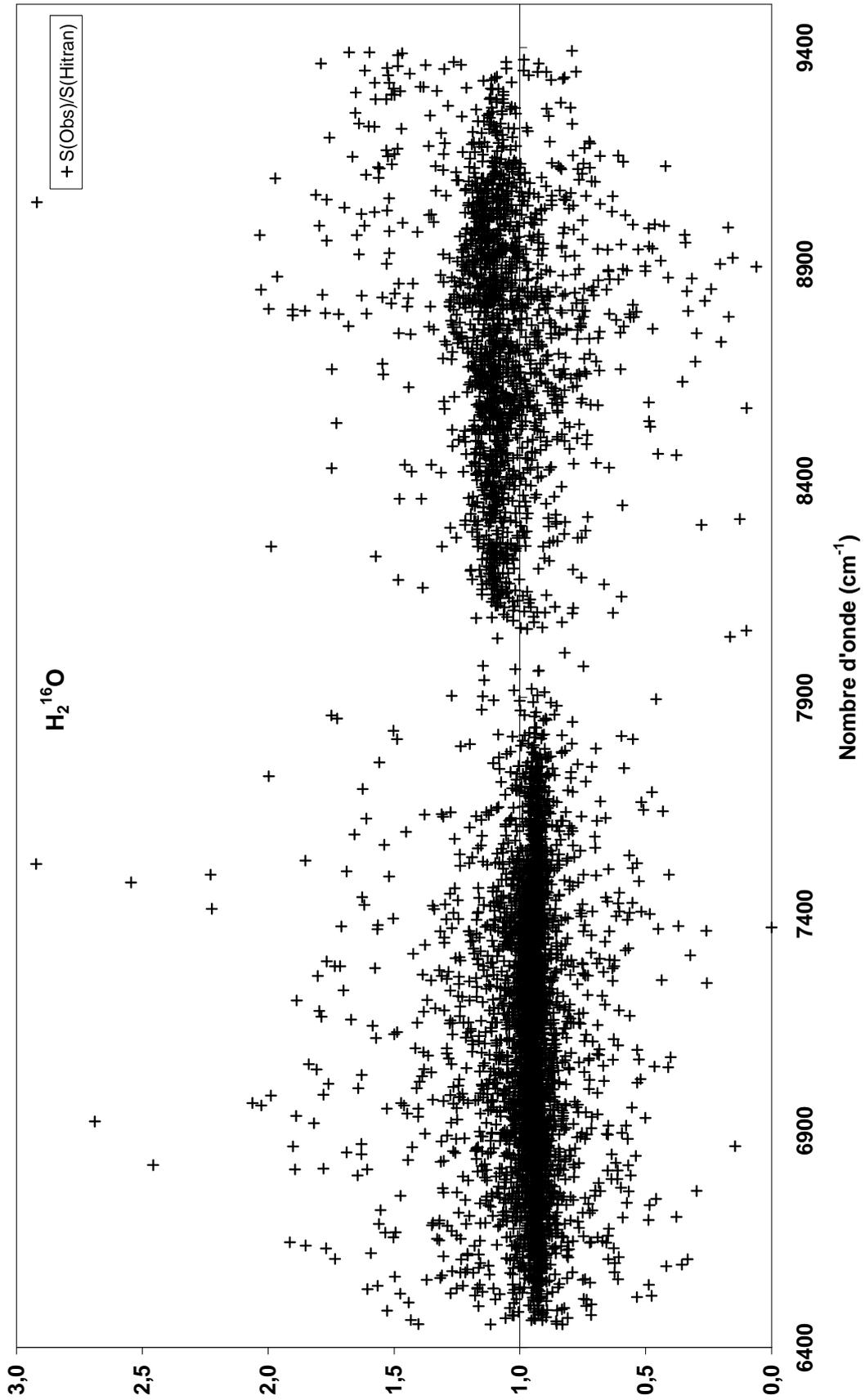


Figure 63 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ . Région 6400-9400  $\text{cm}^{-1}$ . Comparaison globale de nos mesures par rapport aux intensités listées dans les BDD08 [15][59]

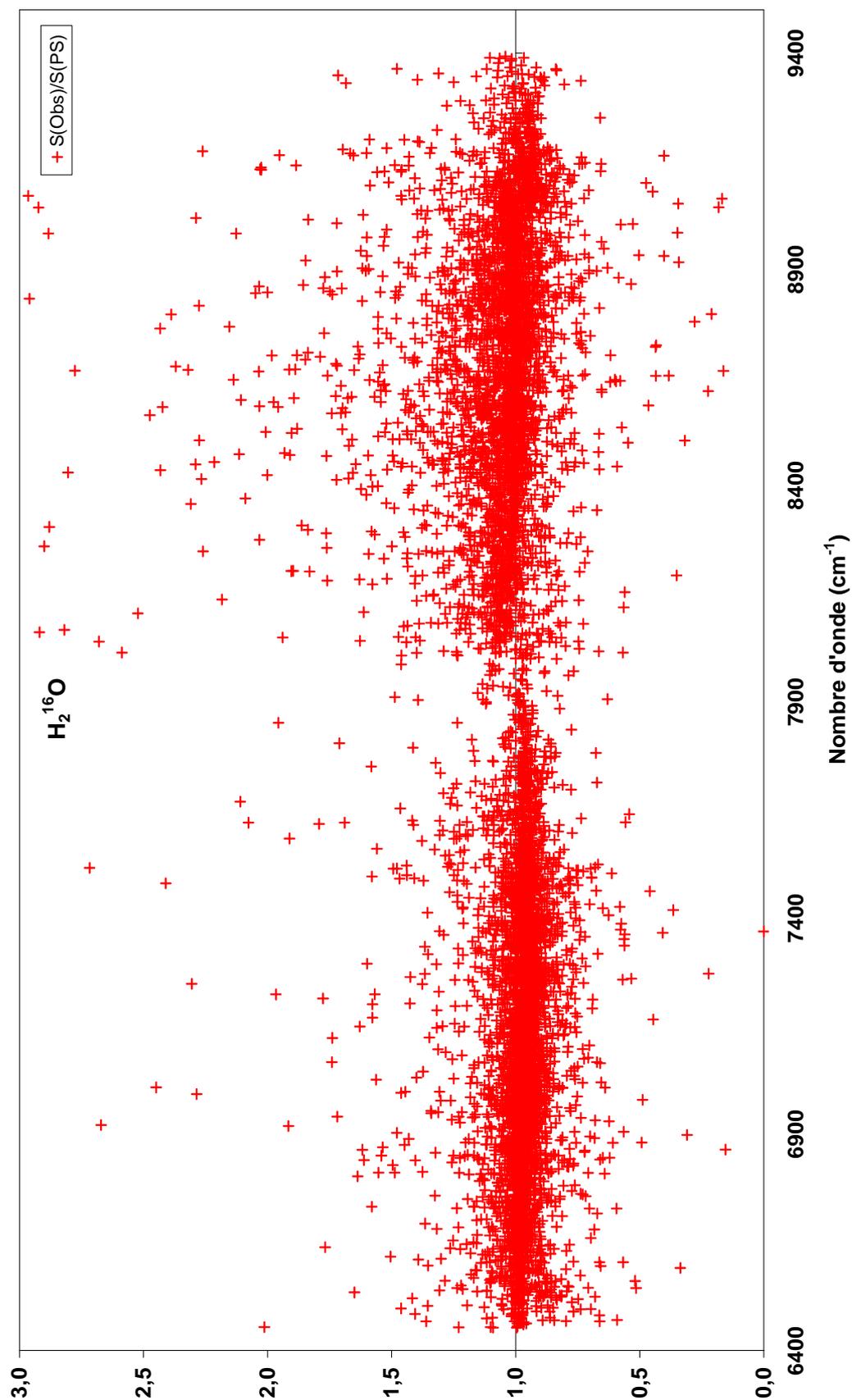


Figure 64 :  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  Région spectrale 6400-9400  $\text{cm}^{-1}$ . Comparaison globale entre nos mesures et les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]

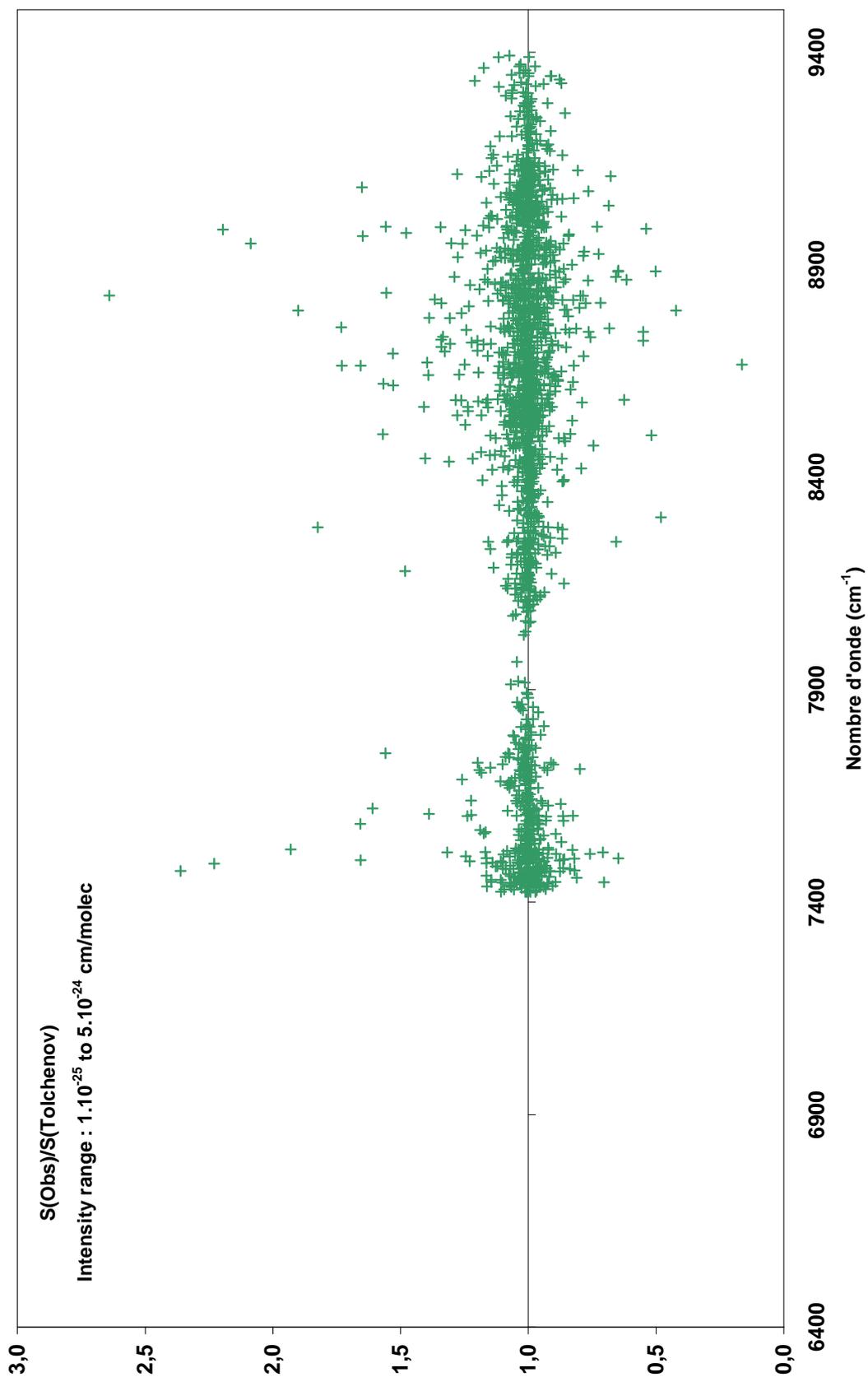


Figure 65 : Comparaison des raies d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O d'intensité allant de  $1 \times 10^{-25}$  et  $5 \times 10^{-24}$  cm/molec entre R.N. Tolchenov et J. Tennyson (2005) [98] et nos mesures.

Les figures 59 et 60 présentent les comparaisons pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  entre nos mesures S(Obs) et les données des BDD08 [15][59], ou avec les listes d'intensités calculées (PS [38][39] ou BT2 [66]). Pour la Figure 64 l'ensemble des transitions d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  mesurées dans la région de 6400 à 9400 sont représentées par rapport aux données théoriques, cette figure comporte plus de 8700 transitions. En comparaison, la Figure 63, qui présente le rapport d'intensité entre nos mesures et les BDD08, montre environ 5600 transitions. La part des transitions nouvelles, non listées dans les bases de données, est principalement des raies faibles. Ce sont ces raies, en particulier pour la région n°2, qui amènent de la dispersion sur la Figure 63. Cette dispersion est bien visible à la Figure 62, qui a été présentée précédemment (page 166) dans le paragraphe réservé à la région spectrale centrée à  $8800\text{ cm}^{-1}$ .

On s'intéresse ici plus particulièrement à la cohérence globale des deux régions spectrales enregistrées. Pour ce point il est important de considérer en premier les résultats expérimentaux de R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98]. Les rapports d'intensité entre nos mesures et les données de R.N. Tolchenov sont présentés à la Figure 65.

#### **.1.b.1 R.N. Tolchenov et J. Tennyson**

On rappelle que le travail de ces auteurs propose des paramètres spectroscopiques pour la région spectrale de  $7400$  à  $9600\text{ cm}^{-1}$ . Ainsi ce travail couvre une partie de la région n°1 de notre étude ( $6400 - 8000\text{ cm}^{-1}$ ) et l'ensemble de la région n°2 ( $8000 - 9400\text{ cm}^{-1}$ ). La Figure 64, présente le rapport des intensités entre ce travail et les intensités mesurées par R.N. Tolchenov, pour les raies appartenant à la gamme d'intensité correcte ( $1 \times 10^{-25}$  et  $5 \times 10^{-24}\text{ cm/molec}$ ) définie dans l'étude de la région n°2. Les raies prises égales à HITRAN ont été supprimées de cette représentation pour ne comparer que des données effectivement mesurées.

Cette figure montre une bonne cohérence sur l'ensemble du domaine spectral. L'écart moyen est de 2 %. J'ai choisi ici de donner une représentation en fonction de la fréquence des transitions, ceci permet de voir que sur la région spectrale en commun à notre étude et à celle de R.N. Tolchenov, l'accord est très bon. Les raies qui présentent des fortes dispersions sont majoritairement des raies faibles (proche de  $1 \times 10^{-25}\text{ cm/molec}$ ) ou encore des raies voisines d'une autre raie d'intensité beaucoup plus forte pour lesquelles l'ajustement est plus délicat.

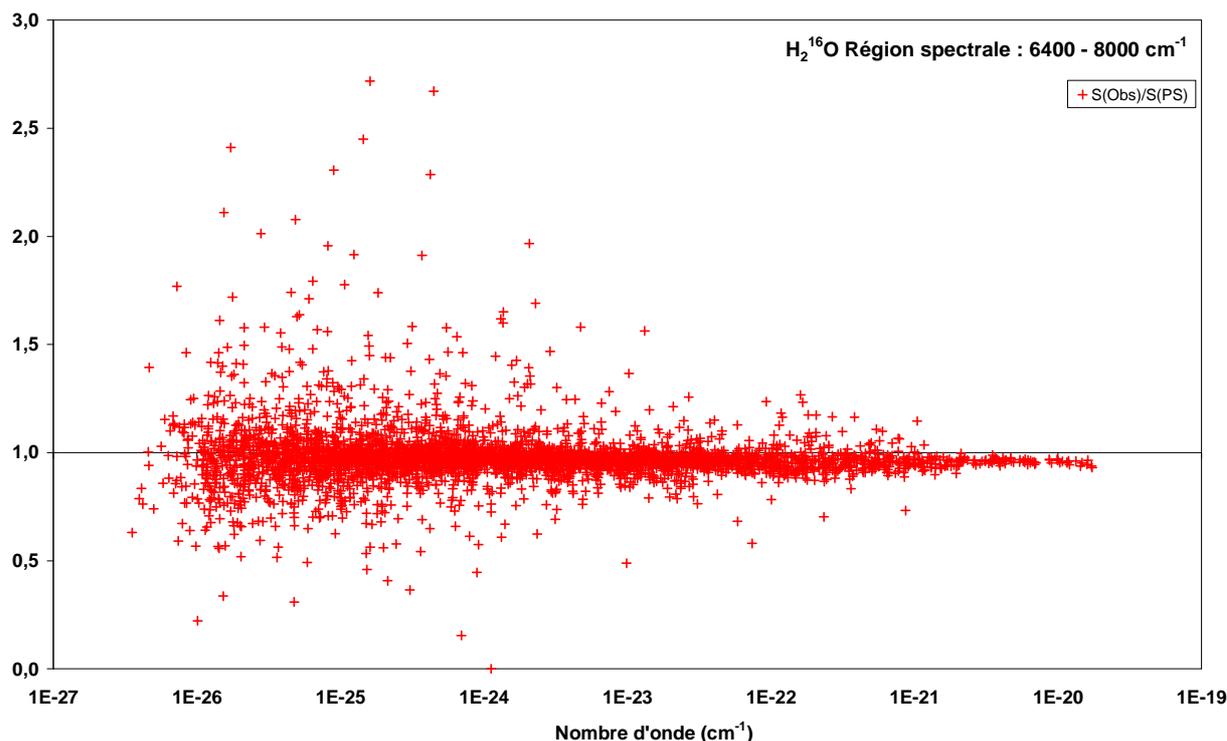
### **.1.b.2 Bases de données spectroscopiques**

La comparaison sur l'ensemble de la région spectrale pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  avec les BDD08 [15][59], présentée Figure 63, fait apparaître pour la région spectrale n°1, un écart global de l'ordre de 5 %. Les rapports d'intensité semblent indiquer que les valeurs d'intensités listées par R.A. Toth [52], et intégrées au BDD08 sont surestimées dans la région de  $6400$  à  $8000\text{ cm}^{-1}$ . Cette figure, permet également de se rendre compte des différences entre les régions spectrales n°1 et n°2. Ainsi la région n°2, centrée à  $8800\text{ cm}^{-1}$ , concentre les écarts au niveau des intensités, mais apparaît également plus clairsemée. Ce qui donne un constat visuel du manque de données des bases spectroscopiques déjà évoqué par J. Bailey [97]. Si on considère HITRAN2008 [15], pour la molécule d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , plus de 4000 raies sont listées pour la région n°1 alors que seulement 1964 raies sont listées pour la région n°2.

### **.1.b.3 Intensités calculées**

Les comparaisons menées entre nos mesures d'intensités et les listes théoriques (H. Partridge et D.W. Schwenke (PS) [38][39] et la liste BT2 [66]) sont présentées Figure 64. Comme cela a été évoqué précédemment, les listes calculées sont équivalentes, c'est pourquoi il n'est pas utile de présenter une comparaison pour chaque liste.

La comparaison avec les données calculées, Figure 64, montre un bon accord sur l'ensemble du domaine spectral de cette étude. On remarque cependant une dichotomie entre la région n°1 et n°2. En effet, deux paquets de raies distincts se forment. Pour la région n°1, les intensités théoriques apparaissent supérieures aux nôtres alors que c'est la tendance inverse qui se dessine dans la région n°2.



**Figure 66 : Région spectrale n°1. Comparaison des intensités d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , mesurées dans cette étude et des intensités calculées (PS).**

La Figure 66, présente, uniquement pour la région n°1, les rapports d'intensité entre nos mesures et les données calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]. La même représentation pour la région spectrale n°2 a été discutée précédemment et peut être retrouvée page 166 (Figure 62). La Figure 66 permet de montrer que les intensités mesurées sont globalement inférieures aux intensités calculées. Pour les raies les plus fortes, l'écart est de l'ordre de 3 %.

Néanmoins si on considère les données de R.N. Tolchenov et J. Tennyson, l'ensemble de la région spectrale est cohérent, et on n'observe pas un effet de dichotomie similaire entre la région n°1 et n°2. Cependant il faut prendre en compte que l'étude de R.N. Tolchenov ne propose pas de paramètres assez précis pour l'ensemble de la gamme d'intensité mesurée par notre étude. Pour tenter d'expliquer les rapports d'intensités de la Figure 66, nous avons cherché à vérifier l'accord entre les séries de longueur des spectres enregistrés pour cette région spectrale. D'un point de vue expérimental, les enregistrements ont été réalisés en plusieurs temps au laboratoire et avec des cellules d'absorption différentes. Finalement entre chaque série de spectres, l'accord pour les intensités est inférieur à 1 %. Ainsi nous pouvons être relativement confiants concernant nos mesures, cependant l'écart constaté avec les intensités calculées reste inexpliqué.

## **2 Isotopologues mineurs : $H_2^{18}O$ , $H_2^{17}O$ et $HD^{16}O$**

Concernant les isotopologues mineurs dans la région spectrale de notre étude il faut également distinguer les données listées dans les BDD08 [15][59] pour les régions n°1 et n°2 de notre étude. Dans la région spectrale n°1, de 6400 à 8000  $cm^{-1}$ , les données listées dans les BDD08 sont reprises de la compilation de R.A. Toth [52]. En revanche, dans la région spectrale n°2 de 8000 à 9400  $cm^{-1}$ , les données listées dans les BDD08 proviennent de la base HITRAN86 [106]. Ces données, depuis leur introduction dans HITRAN86, n'ont pas été réévaluées. Jusqu'ici notre présentation s'est particulièrement focalisée sur l'isotopologue principal. En effet il est apparu dans plusieurs articles avec une forte incohérence au niveau des intensités dans cette région. Mais on se rend compte maintenant que pour la vapeur d'eau l'ensemble des données listées dans les bases spectroscopiques récentes dans cette région proviennent de données datant de plus de 20 ans. Notre travail sur  $H_2^{16}O$ , développé au paragraphe précédent, a permis de montrer d'importants écarts au niveau des intensités des raies d'absorption. On s'attache maintenant à regarder les isotopologues mineurs, dans un premier temps seront présentés les résultats pour les isotopologues  $H_2^{18}O$  et  $H_2^{17}O$ , car ils ont montré des comportements semblables, puis pour terminer seront présentés les résultats obtenus pour  $HD^{16}O$ . Il faut noter pour la région de 8000 à 9400  $cm^{-1}$ , le travail expérimental de A.W. Liu et al. [99] mené sur des spectres enrichis en  $^{18}O$  et  $^{17}O$ , qui fournit une comparaison supplémentaire.

## **2.a $H_2^{18}O$ et $H_2^{17}O$**

### **.2.a.1 Région spectrale 8000 – 9400 $cm^{-1}$**

Ces deux isotopologues,  $H_2^{18}O$  et  $H_2^{17}O$ , ont été regroupés car ils présentent des comportements similaires. Les figures 63 et 64, présentent pour chaque isotopologue séparément les comparaisons entre nos mesures et les données listées dans les BDD08 [15][59] ou les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke (PS) [38][39].

Au contraire de l'isotopologue principal, pour lequel les intensités listées dans les BDD08 apparaissent sous-estimées comparées à nos mesures, pour les isotopologues  $H_2^{18}O$  et  $H_2^{17}O$ , les intensités des BDD08 apparaissent surestimées par rapport à nos mesures. On pourra pour cela regarder et comparer les figures 59, 63 et 64 qui présentent chacune le rapport d'intensité  $S(Obs)/S(BDD08)$  pour respectivement  $H_2^{16}O$ ,  $H_2^{18}O$  et  $H_2^{17}O$ . Pour l'isotopologue  $H_2^{18}O$ , l'écart moyen avec les BDD08 est de 20 %, cet écart est systématique quelle que soit l'intensité des raies. Pour l'isotopologue  $H_2^{17}O$ , la dispersion des rapports d'intensité est beaucoup plus grande, cependant une tendance générale se dégage et l'on estime l'écart moyen entre les intensités mesurées et les BDD08 à 10 %.

En comparaison avec la liste d'intensités calculées de PS, nos mesures présentent un bon accord, en particulier pour  $H_2^{18}O$  (Figure 67). L'écart moyen, pour cet isotopologue, entre nos mesures et les intensités calculées est inférieur à 5 % pour les raies d'intensités les plus fortes de  $5 \times 10^{-24}$  cm/molec à  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec. Ce sont des raies, malgré la faible abondance de l'isotopologue, qui présentent une absorption suffisante pour pouvoir déterminer avec précision leurs paramètres spectroscopiques. Pour les raies d'intensités plus faibles, la dispersion augmente et l'écart moyen arrive à 10 %. Cependant une majeure partie de ces raies restent avec des écarts inférieurs à 10 % ; seules quelques raies présentent des rapports d'intensité qui ne peuvent pas être considérés comme cohérents. Pour  $H_2^{17}O$ , la dispersion des rapports d'intensité est plus marquée. Cependant, pour les raies d'intensité les plus fortes jusqu'à  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec, l'écart moyen est inférieur à 10 %. Pour les raies les plus faibles, la dispersion est très importante. On se trouve ici dans le cas où l'absorption des raies est vraiment très faible, même sur les spectres enregistrés avec des parcours de 1200 m.

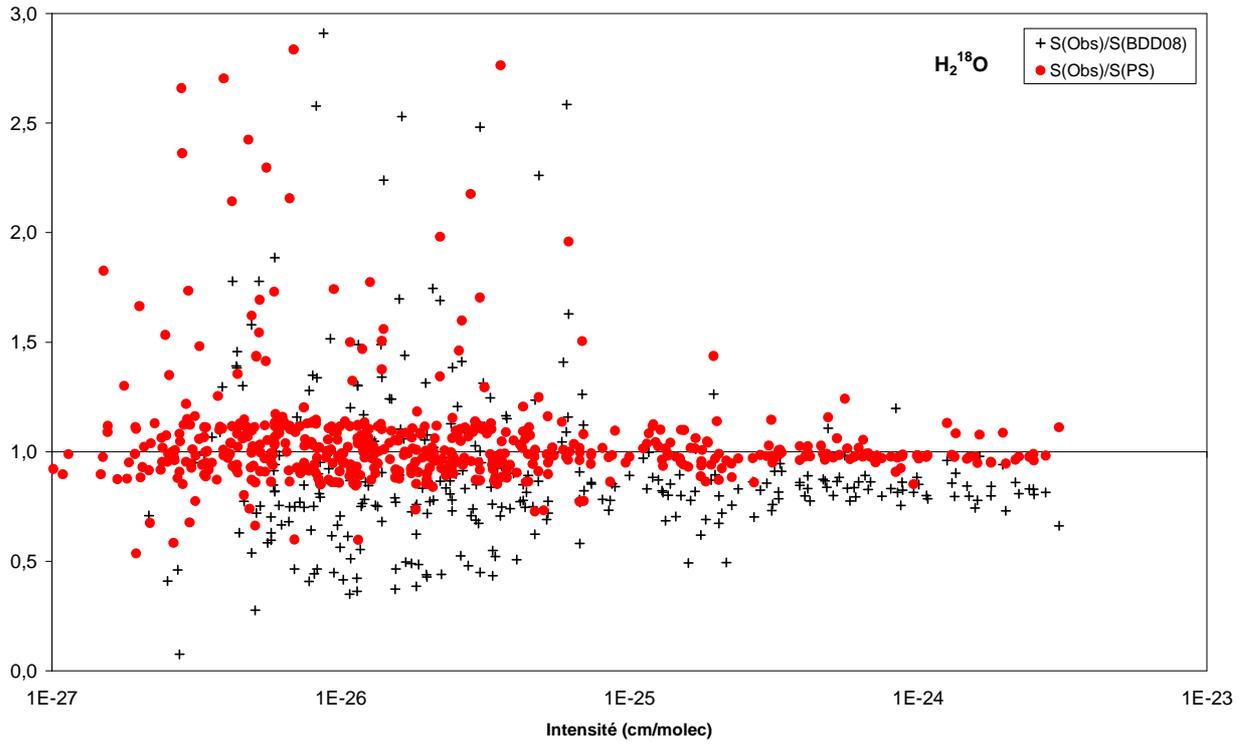


Figure 67 :  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . Région spectrale  $8000\text{-}9400\text{ cm}^{-1}$ . Comparaison entre les intensités observées et les BDD08 [15][59] et avec les intensités de PS [38][39]

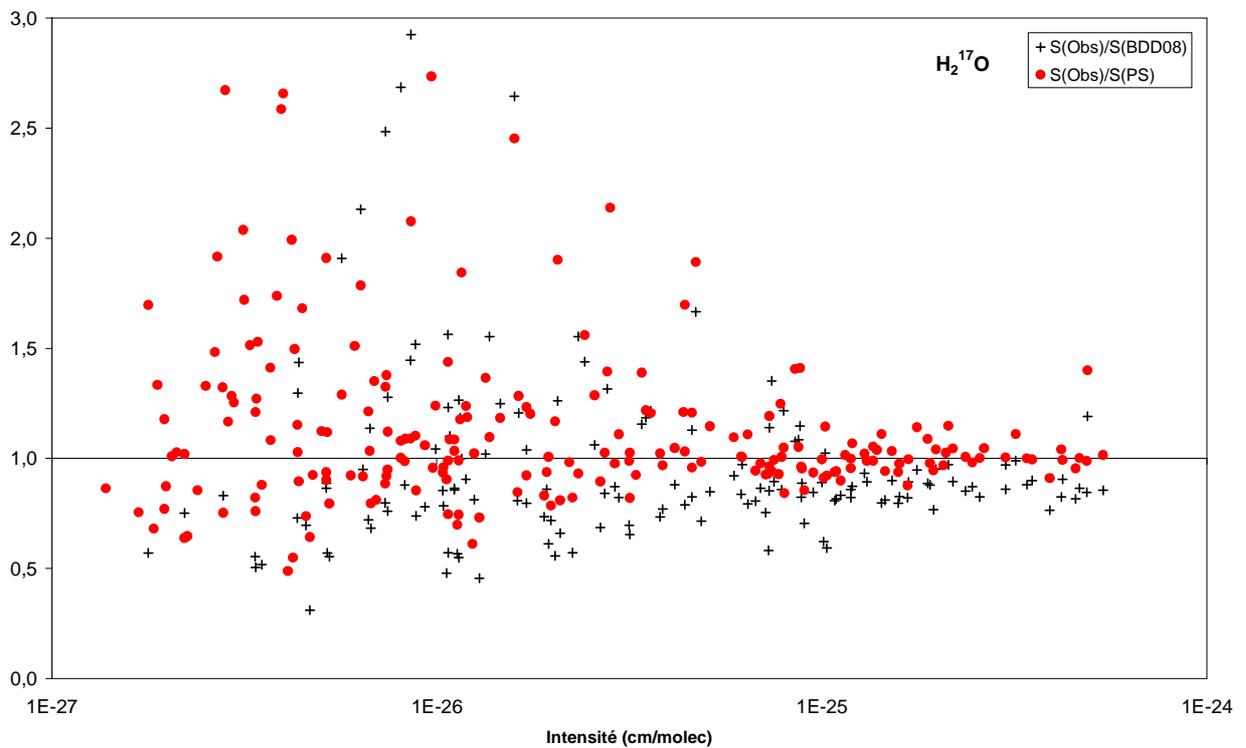


Figure 68 :  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  Région spectrale  $8000\text{-}9400\text{ cm}^{-1}$ . Comparaison entre les intensités observées et les BDD08 [15][59] et les intensités de PS [38][39]

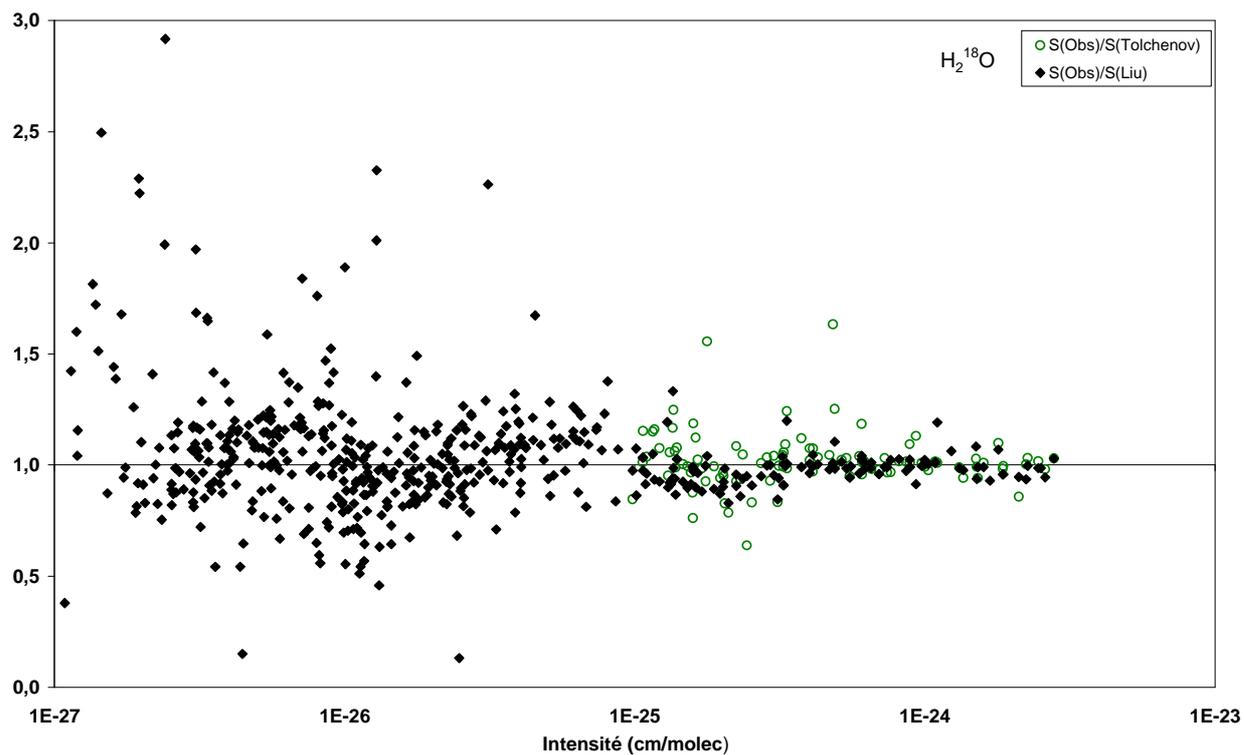


Figure 69 :  $H_2^{18}O$ . Région spectrale 8000 – 9400  $cm^{-1}$ . Comparaison entre les intensités mesurées et les intensités proposées par A. W. Liu et al. [99] et par R. N. Tolchenov et J. Tennyson [98].

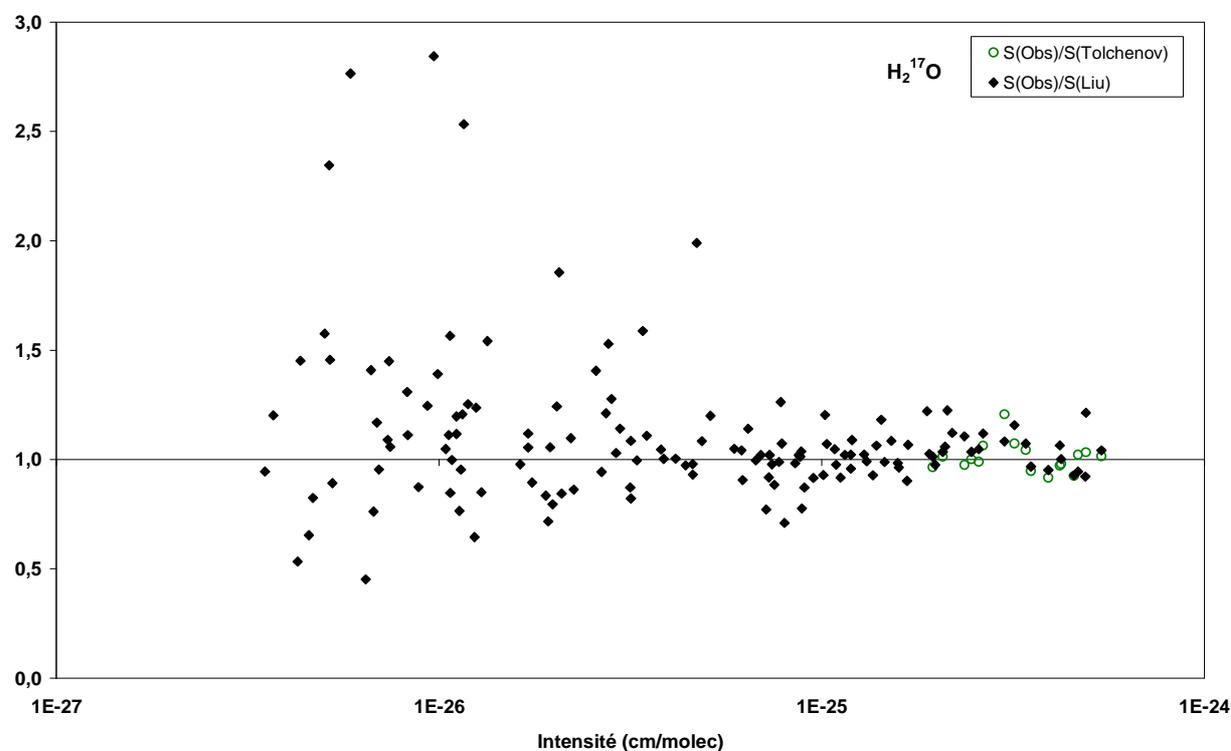


Figure 70 :  $H_2^{17}O$  Région spectrale 8000-9400  $cm^{-1}$ . Comparaison entre les intensités mesurées et les données proposées par A. W. Liu et al. [99] et par R. N. Tolchenov et J. Tennyson [98].

Les figures 65 et 66, présentent, pour les isotopologues  $H_2^{18}O$  et  $H_2^{17}O$ , les comparaisons entre nos mesures d'intensité et les intensités proposées par A.W. Liu et al. [99] ou avec R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98] :

- L'étude expérimentale menée par A.W. Liu et al. fournit une comparaison supplémentaire. Elle fait apparaître pour ces isotopologues un écart important de l'ordre de 17 % avec la base de données HITRAN2004 [16]. Les intensités de la base de données apparaissent pour les auteurs sur-estimées. Ceci rejoint les conclusions apportées par les figures 59 et 60. Pour mener les comparaisons entre les données de A.W. Liu et al. et nos mesures, deux raies confondues (de même isotopologue ou d'isotopologues différents) ont été supprimées de la liste. Ainsi le nombre de raies comparées a été réduit, mais cette précaution évite des écarts qui ne pourraient pas être reliés à la détermination de l'intensité.
- Pour les données proposées par R.N. Tolchenov et J. Tennyson, il est plus difficile d'être catégorique sur les intensités à prendre en compte pour la comparaison. La gamme d'intensité correcte, définie pour  $H_2^{16}O$ , n'est pas cohérente pour les isotopologues minoritaires. En raison des abondances de ces espèces dans le cas d'un échantillon d'eau naturelle, les transitions apparaissent avec des absorptions très faibles. Pour tenter d'apporter une réponse et de déterminer les raies d'intensités mesurées par R.N. Tolchenov qui pouvaient être prises en compte, une simulation d'un spectre d'eau naturelle selon les conditions du spectre de ces auteurs [104] a été réalisée avec « MultiFIT ». Ce spectre simulé a permis de contrôler les absorptions des raies des isotopologues mineurs et de définir les gammes d'intensité qui pouvaient être comparées. Ainsi, pour  $H_2^{18}O$ , l'intensité minimale pouvant être correctement mesurée par R.N. Tolchenov a été prise à  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec, pour  $H_2^{17}O$  elle était de  $3 \times 10^{-25}$  cm/molec. Seules les raies d'intensité supérieure à ces limites ont été comparées et sont présentées sur les figures.

Les comparaisons entre les données de A.W. Liu et al. [99] et nos mesures, pour les isotopologues mineurs montrent une bonne cohérence pour les raies les plus fortes que ce soit pour  $H_2^{18}O$  ou  $H_2^{17}O$  (de  $5 \times 10^{-24}$  cm/molec jusqu'à  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec). Pour les raies d'intensité inférieures à  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec de l'isotopologue  $H_2^{18}O$ , on remarque que la dispersion entre nos données et celles de A.W. Liu augmente, jusqu'à atteindre 25 %. En comparaison, les rapports d'intensité entre nos données et les intensités calculées (Figure 67), présente une meilleure cohérence sur les raies de faible intensité. En revanche pour les raies fortes on retrouve un écart moyen entre nos données et

celles de A.W. Liu égal à celui constaté avec les données calculées. Ceci nous amène à conclure que l'étude menée par A.W. Liu est très cohérente pour les raies les plus fortes, mais que des écarts inexplicables sont observés pour les raies les plus faibles. Pour  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ , la comparaison avec les données de A.W. Liu reste cohérente pour les raies jusqu'à  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec. Pour cet isotopologue il n'est pas possible d'apporter plus d'éléments. Les rapports d'intensités entre nos mesures et A.W. Liu (Figure 70) ou PS (Figure 68) sont assez similaires.

Enfin la comparaison avec R.N. Tolchenov, réduite aux raies assez absorbantes, montre une bonne cohérence. En ce qui concerne  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ , il y a trop peu de raies qui sont comparables pour pouvoir apporter une réponse catégorique, néanmoins celles-ci présentent des écarts de l'ordre de 5 % avec nos données. Idem pour  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , mais pour cet isotopologue plus de raies peuvent être comparées, la comparaison est donc plus significative.

### **.2.a.2 Région spectrale globale 6400 – 9400 $\text{cm}^{-1}$**

Pour chacun des isotopologue sont représentés sur la même figure les rapports d'intensité entre les mesures obtenues dans cette étude et les données de la littérature : les BDD08 [15][59] ; les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39] et la liste de R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98] (uniquement les raies des gammes comparables).

Pour la région n°1 de cette étude de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$  Les isotopologues  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  (Figure 71 et Figure 72) présentent des écarts qui sont similaires à celui reporté pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  entre les données listées dans les BDD08 et nos mesures d'intensité. Pour ces isotopologues les intensités apparaissent dans les bases spectroscopiques surestimées. L'écart moyen est de 10 %.

Pour l'isotopologue  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , la Figure 71, montre que l'écart moyen entre nos mesures et les données calculées de PS est inférieur à celui obtenu avec les BDD08, respectivement de 5 % et de 10 %. Ceci tend à montrer que nos mesures d'intensité améliorent les données listées dans les BDD08. Pour l'isotopologue  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ , il est plus difficile de conclure (Figure 72). Nos intensités présentent des écarts qui sont similaires que l'on considère les données théoriques (PS) ou les données des BDD08.

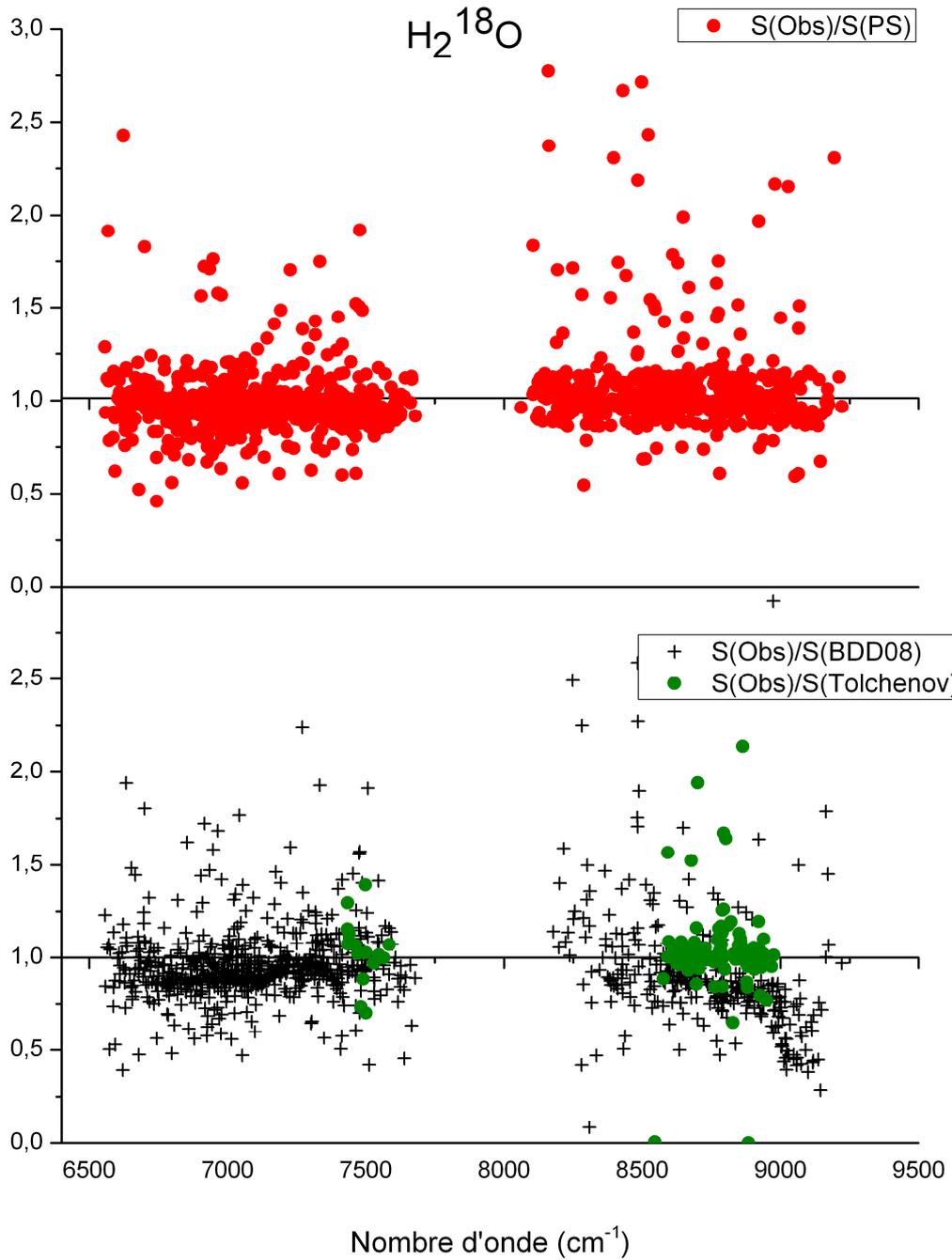


Figure 71 :  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  Région spectrale 6400-9400  $\text{cm}^{-1}$ . Rapport d'intensité entre nos données et les BDD08, les calculs variationnels de PS, et les données de R.N. Tolchenov et J. Tennyson.

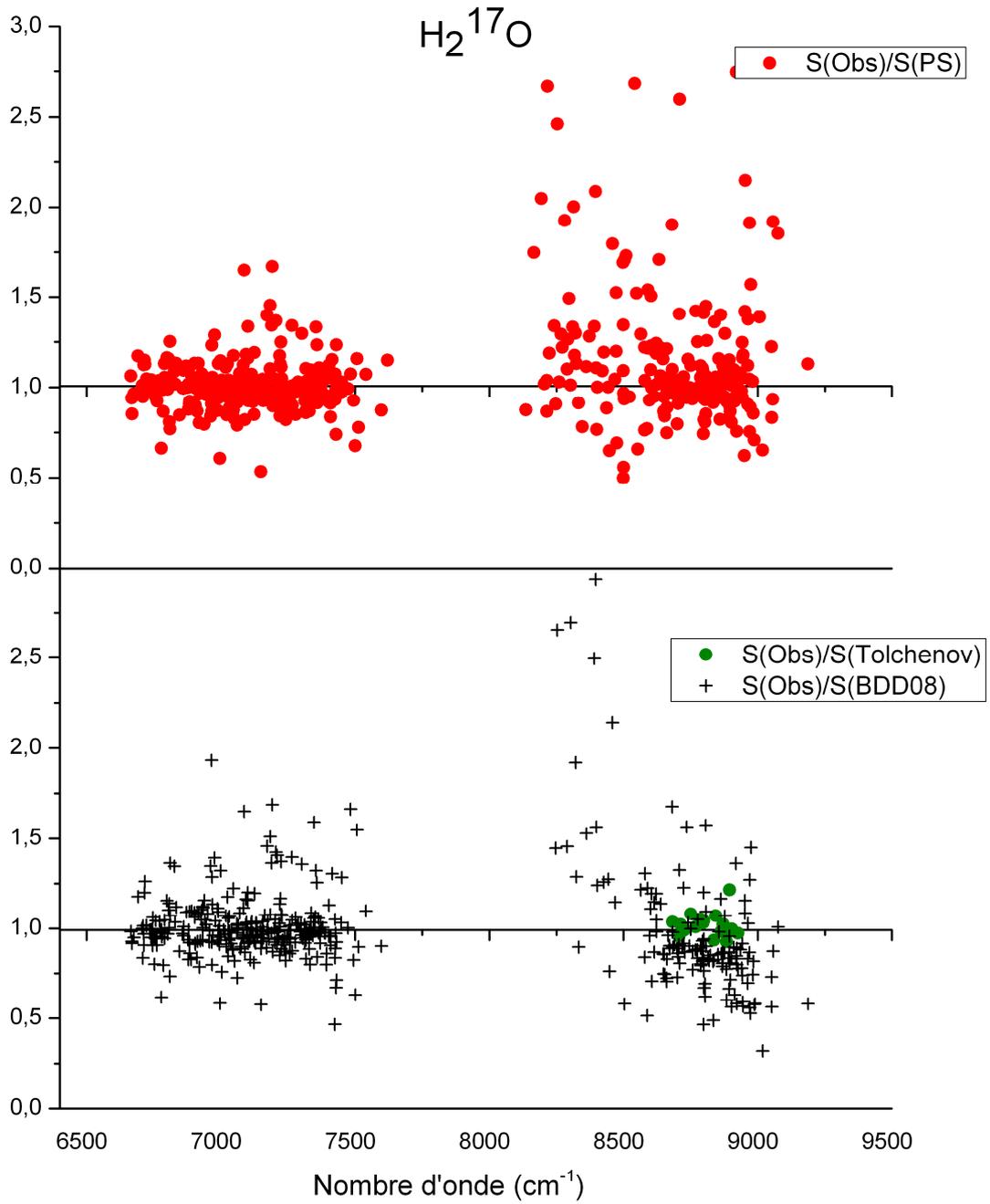


Figure 72 :  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  Région spectrale 6400-9400  $\text{cm}^{-1}$ . Rapport d'intensité entre nos données et les BDD08, les calculs variationnels de PS, et les données de R.N. Tolchenov et J. Tennyson.

## 2.b HD<sup>16</sup>O

Dans la région spectrale de notre étude, les bases de données récentes listent des transitions d'HD<sup>16</sup>O jusqu'à 8000 cm<sup>-1</sup>. Ces données comme cela été dit précédemment proviennent de la compilation de R.A. Toth [52]. Ainsi, dans la région spectrale de 8000 à 9400 cm<sup>-1</sup>, aucune transition d'HD<sup>16</sup>O n'est listée dans les BDD08 [15][59]. Notre étude a permis de mesurer environ 300 transitions pour cet isotopologue qui appartiennent à la bande  $\nu_2+3\nu_3$  située entre 8400 et 8800 cm<sup>-1</sup>.

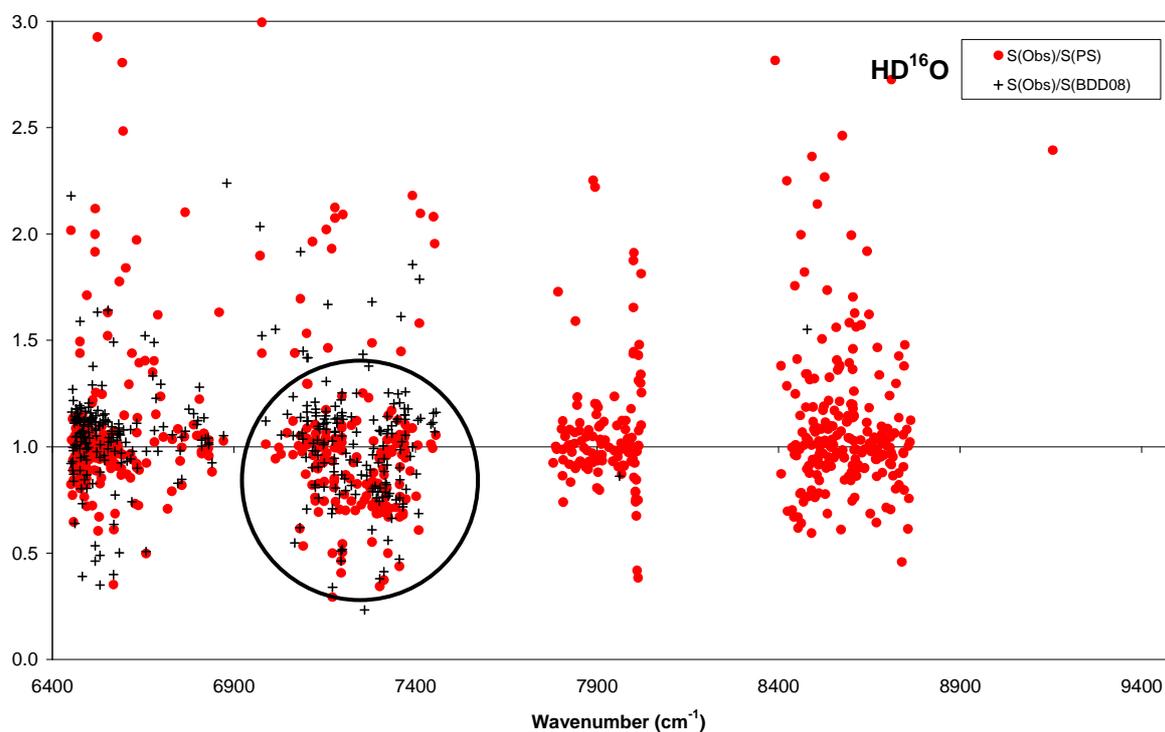


Figure 73 : HD<sup>16</sup>O. Région spectrale 6400-9400 cm<sup>-1</sup>. Rapport d'intensité entre nos données et les BDD08 et les calculs variationnels de PS.

La Figure 73 présente les rapports d'intensités obtenus pour HD<sup>16</sup>O dans la région spectrale de 6400 à 9400 cm<sup>-1</sup>, entre nos mesures et les données des BDD08 ou les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]. Pour cet isotopologue, il n'est pas possible en raison des conditions expérimentales de R.N. Tolchenov et J. Tennyson [104] de proposer une comparaison pertinente entre ces données et nos mesures.

Pour cet isotopologue, les données listées dans les BDD08 apparaissent sous estimées, à l'inverse des isotopologues mineurs H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et H<sub>2</sub><sup>17</sup>O. La cohérence globale de ces mesures est assez bonne avec les intensités calculées, malgré des dispersions importantes dues à l'absorption faibles des transitions mesurées qui affectent la restitution des paramètres spectroscopiques. On remarque cependant pour la bande 2ν<sub>3</sub>, de 6900 à 7400 cm<sup>-1</sup>, des écarts importants qui restent pour le moment inexpliqués.

### ***3 Comparaison avec des mesures CRDS***

L'un des enjeux des mesures engagées durant ce doctorat a été la mesure des raies faibles. La technique de spectroscopie par CRDS, permet d'atteindre des très long parcours d'absorption, pouvant aller jusqu'à 10 km. Bien sur ces parcours beaucoup plus long que ceux pouvant être atteints au GSMA offrent la possibilité de mesurer des transitions extrêmement faibles. La Figure 74, parue dans l'article de S. Mikhailenko et al. (2011) [101] permet d'illustrer la gamme d'intensité atteinte en CRDS, ici chaque isotopologue est représenté séparément.

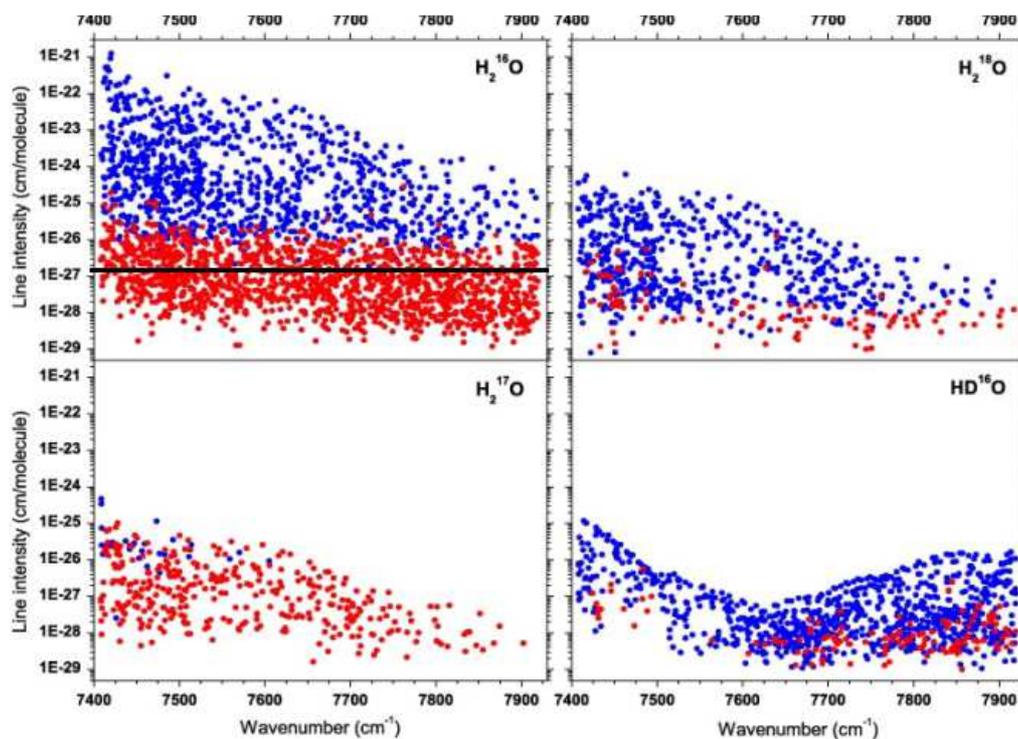


Figure 74 : Vue générale de l'étude de S. Mikhailenko et al (2011). En bleu les raies déjà listées, et obtenues par STF. En rouge les raies obtenues par CRDS. (Figure de S. Mikhailenko et al. [101])

Dans la suite de ce paragraphe je vais m'intéresser uniquement à l'isotopologue majeur. La ligne noire tracée sur la Figure 74, placée à  $1 \times 10^{-27}$  cm/molec, symbolise la limite de mesure sur les spectres longs parcours enregistrés avec le STF du laboratoire pour la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Il faut remarquer que la technique CRDS permet d'atteindre des transitions d'intensité jusqu'à  $1 \times 10^{-29}$  cm/molec. Ces intensités sont 100 plus faibles que celles pouvant être obtenues au GSMA.

Néanmoins, comme le montre la Figure 74, des comparaisons d'intensité entre les mesures CRDS et nos mesures d'intensités sont possibles. Ces comparaisons, même si elles ne sont menées que pour un nombre faibles de raies, sont intéressantes car elles permettent de vérifier la cohérence des intensités mesurées pour les raies les plus faibles. Nos mesures seront appelées dans la suite de ce paragraphe « mesures TF ». Dans la littérature, deux articles présentent les résultats obtenus en technique CRDS pour la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Ces deux travaux sont présentés par S. Mikhailenko et al. En (2007) [100] et (2011) [101]. L'article récent de S. Mikhailenko et al. (2011) [101] propose des paramètres spectroscopiques pour la vapeur d'eau dans la région spectrale de 7400 à 7900  $\text{cm}^{-1}$ .

### **3.a Comparaison des intensités pour $\text{H}_2^{16}\text{O}$**

#### **.3.a.1 S. N. Mikhailenko et al. (2011)**

La Figure 75 présente la comparaison entre les données obtenues par CRDS et les mesures TF. Cette figure regroupe environ 500 raies mesurées sur nos spectres longs parcours enregistrés pour la région n°1. Cette comparaison montre un bon accord, l'écart moyen avec les données CRDS est de 4 %. Pour les mêmes raies, l'écart moyen avec les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39] est de 5 %. La Figure 75 permet également de comparer les deux séries de données expérimentales avec les données théoriques de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39].

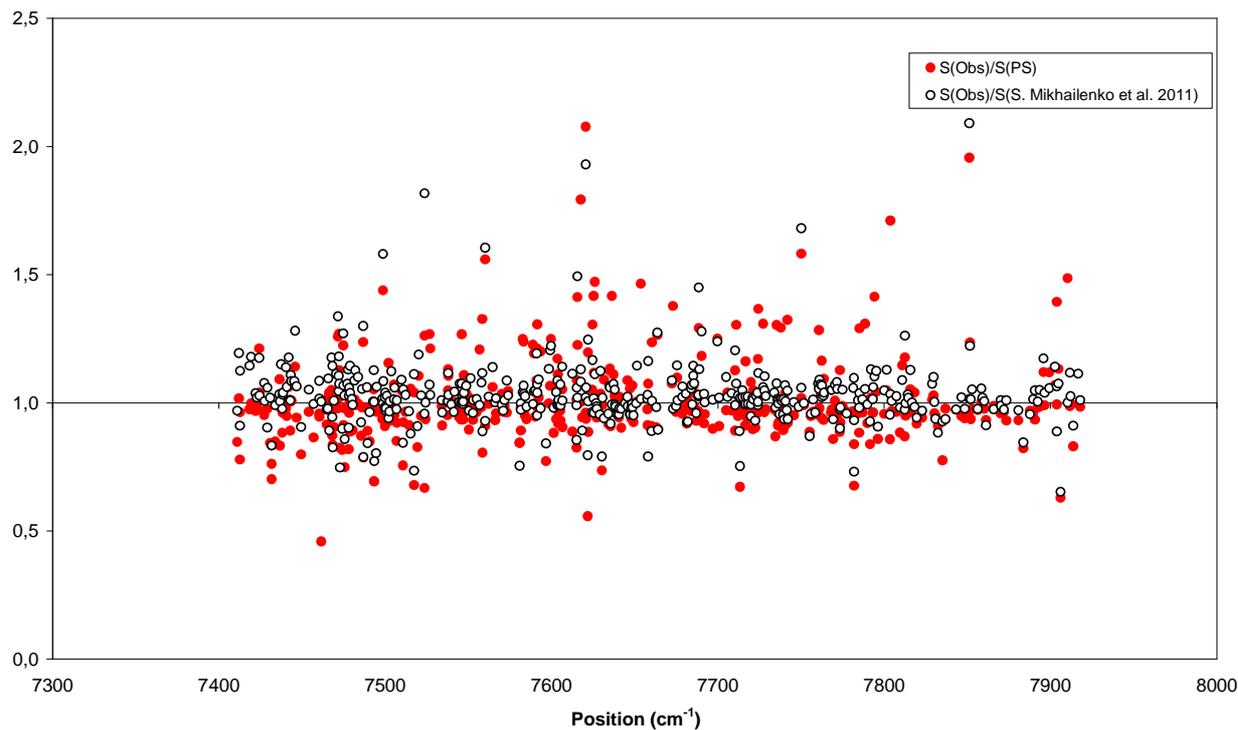


Figure 75 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O. Comparaison entre les données CRDS de S. Mikhailenko et al. (2011) [101] et nos mesures. En rouge le rapport d'intensité entre les intensités calculées de PS [38][39] et nos mesures.

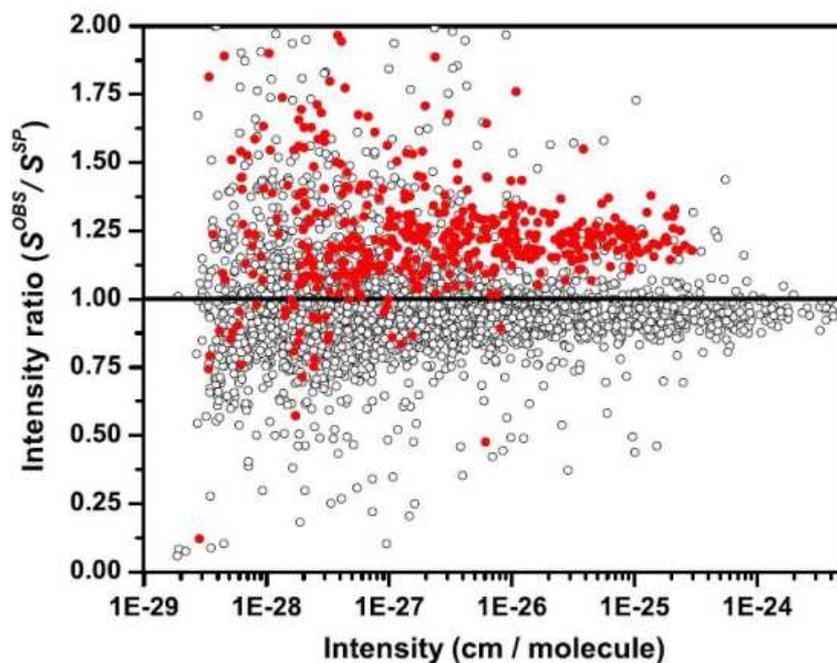


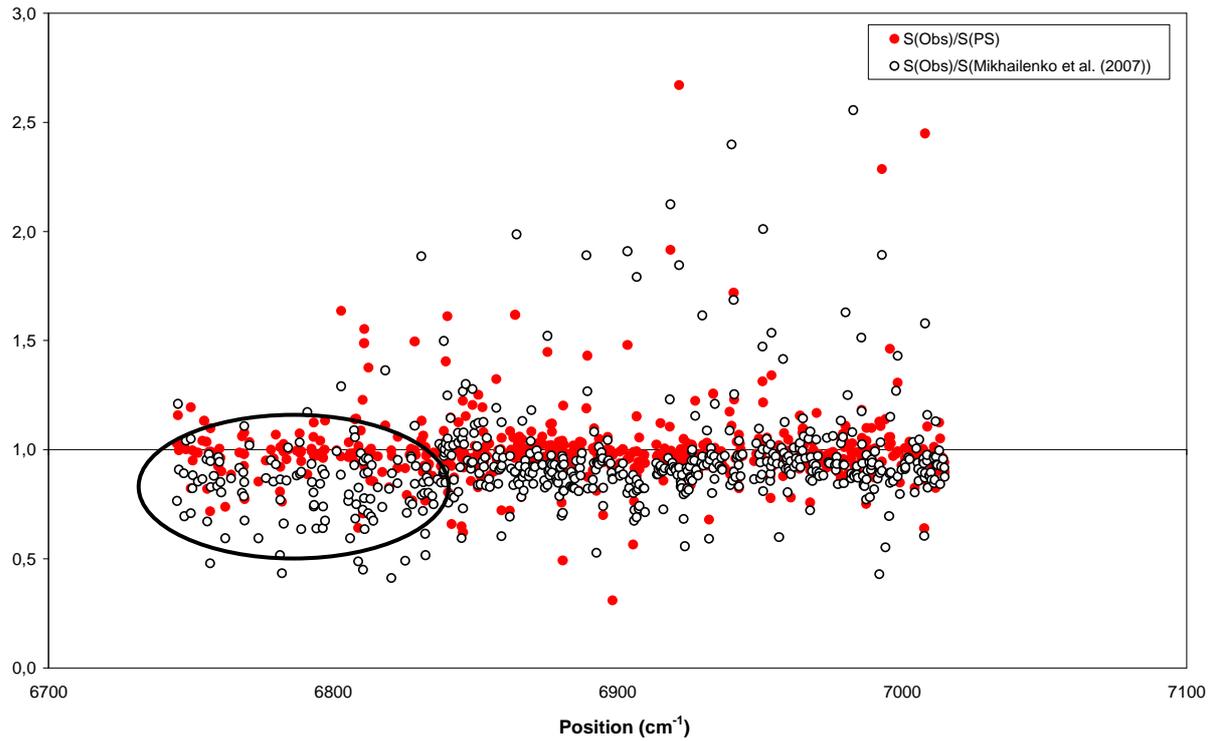
Figure 76 : Rapport d'intensité entre les mesures de S. Mikhailenko et al [101] et PS pour l'ensemble des transitions mesurées par ces auteurs. Les symboles pleins distinguent les transitions d'H<sub>2</sub><sup>18</sup>O, qui montrent un enrichissement de 25 %. (figure de S. Mikhailenko et al. (2011) [101])

Dans cet article [101], une comparaison avec les intensités calculées a été menée et est présentée à la Figure 76. Cette figure montre que les données CRDS dans la région de 7400 à 7900  $\text{cm}^{-1}$  présentent des intensités inférieures à celles calculées par H. Partridge et D.W. Schwenke. Ceci rejoint ma conclusion concernant la région spectrale de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$ . Pour cette région mes données apparaissent également sous estimées par rapport aux données PS. Pour tenter d'expliquer cette tendance, S. Mikhailenko et al. (2011) ont avancé un problème lié à la mesure de la pression de vapeur d'eau introduite dans la cuve. De mon côté, j'ai montré (page 173) la très bonne cohérence globale des spectres enregistrés au laboratoire, ce qui permet d'être confiant sur les paramètres spectroscopiques obtenus. De plus la comparaison présentée dans ce paragraphe a permis de montrer que les résultats de S. Mikhailenko et al. (2011) et les nôtres sont identiques, alors que les techniques de mesures sont différentes de même que les logiciels d'ajustement utilisés. Au final, on peut conclure que pour cette région spectrale les intensités listées de H. Partridge et D.W. Schwenke présentent avec deux séries de mesures expérimentales différentes des valeurs d'intensités sur estimées.

### **.3.a.2 S. N. Mikhailenko et al. (2007)**

L'étude menée en 2007 a fourni des paramètres spectroscopiques pour la région de 5900 à 7000  $\text{cm}^{-1}$  permettant une comparaison avec les mesures TF de 6750 jusqu'à 7000  $\text{cm}^{-1}$ , présentée sur la Figure 77.

Pour cette région spectrale, les mesures TF comparées aux intensités calculées (PS) présentent un meilleur accord avec un écart moyen de 5 % alors que la comparaison avec les données CRDS l'écart moyen est de 10 %. La dispersion moyenne entre nos données et les mesures CRDS augmente de manière importante pour les transitions de 6750 à 6850  $\text{cm}^{-1}$  (encadré sur la Figure 77). Les mêmes comparaisons tracées en fonction de l'intensité des transitions montrent que les écarts obtenus peuvent être reliés aux intensités des transitions, les plus faibles (autour de  $1 \times 10^{26}$   $\text{cm}/\text{molec}$ ) présentant les plus fortes dispersions.



**Figure 77 : Comparaison entre les données CRDS de S. Mikhailenko et al. (2007) [100] et nos mesures. En rouge le rapport d'intensité entre les intensités calculées de PS [38][39] et nos mesures.**

## 4 Conclusion

L'étude de la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  a été engagée au laboratoire à la suite de la publication depuis les années 2000 d'une série d'articles ([94][95][96][97]) pointant la nécessité de réévaluer complètement cette région spectrale. Ces articles montrent une forte incohérence des bases de données HITRAN et GEISA en particulier pour la région spectrale de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Cette région spectrale dans les bases de données les plus récentes [15][59] fait référence pour les intensités aux travaux de J-Y. Mandin de 1985 [81] pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , et à HITRAN86 [106] pour les intensités des isotopologues mineurs. Le but de notre étude est de proposer une liste complète des transitions de la vapeur d'eau dans la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  pour la gamme d'intensité allant de  $1 \times 10^{-19}$  à  $1 \times 10^{-27}$   $\text{cm}/\text{molec}$ . Notre étude a permis de mesurer plus de 11 000 transitions pour l'isotopologue principal et les isotopologues mineurs ( $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  et  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ).

Dans la région de notre étude, c'est la zone centrée à 8800  $\text{cm}^{-1}$ , qui présente les écarts les plus importants avec les données listées dans les bases spectroscopiques récentes [15][59]. Si on prend l'exemple de l'isotopologue majeur, l'écart moyen est de 15 % entre nos mesures et les bases de données avec des écarts qui augmentent avec l'intensité des raies (Figure 60). On peut conclure de cette étude que les bases de données spectroscopiques listent à ce jour des intensités sous estimées et qu'elles nécessitent une révision complète dans cette région spectrale. En revanche, dans la région de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$ , notre travail a montré que les intensités listées dans les bases spectroscopiques récentes sont globalement surestimées de l'ordre de 5 %. Les comparaisons présentées dans ce chapitre pour cette région spectrale ont permis en outre de montrer qu'écart comparable était obtenu avec les intensités calculées de S. Partridge et D.W. Schwenke comparées avec nos données ou avec les mesures de S. Mikhailenko et al. (2011) [101]. Alors que ces deux séries de mesures expérimentales ont été menées suivant deux techniques très différentes mais également avec des logiciels de traitement eux aussi différents.

## **Chapitre 4.**

# **Exploitation des données – Application atmosphérique.**

La modélisation et la mesure du continuum de la vapeur d'eau sont des enjeux majeurs de ces dernières années. Ce phénomène a été découvert par G. Hettner [107] en 1918, mais est resté inexplicé durant 20 ans, jusqu'à ce que W. M. Elsasser [108] (1938) propose que ce phénomène soit relié à l'absorption cumulée des ailes de raies. La définition actuelle du continuum de la vapeur d'eau est plus complexe, mais ce propos n'entre pas dans le cadre du travail présenté dans ce manuscrit. De manière simple, le continuum de la vapeur peut être défini comme une absorption de fond, qui serait reliée à l'absorption des ailes des raies. Le coefficient d'absorption classique défini dans la partie II de ce manuscrit pourrait alors s'écrire comme la somme d'un coefficient de transition (centré sur la position de la raie) et un coefficient d'absorption des ailes de raies. Le groupe de recherche CAVIAR<sup>11</sup>, auquel plusieurs laboratoires anglais sont associés, est particulièrement engagé dans cette thématique.

Actuellement les mécanismes du continuum restent largement méconnus et les modèles de transfert radiatif LBL (Raie par Raie) utilisent par exemple un modèle de continuum semi-empirique. On peut citer en exemple le modèle MTCKD [109]. A ce jour, ce modèle n'est pas parfait et plusieurs travaux menés en laboratoire ont montré qu'il nécessitait plusieurs révisions pour l'infrarouge [110][111][112]. Hormis ces considérations la détermination du continuum nécessite une bonne connaissance des paramètres spectroscopiques des raies d'absorption. I.V. Ptashnik, de l'Université de Reading (UK) recommande dans un article paru en 2007 [113], une série d'intervalles spectraux qui semblent intéressants pour l'étude du continuum de la vapeur d'eau et pour lesquels une étude

---

<sup>11</sup> CAVIAR : Continuum Absorption at Visible and Infrared Wavelengths and its Atmospheric Relevance

complète et précise des paramètres spectroscopiques est primordiale. Parmi ces intervalles, deux font partie de la région spectrale que j'ai étudiée : de 8650 à 9000  $\text{cm}^{-1}$  et de 6700 à 7800  $\text{cm}^{-1}$ .

Le but du travail engagé par L. Tallis [114] et de l'équipe de l'université de Reading (UK) à laquelle il appartient, est de vérifier la cohérence des données des bases spectroscopiques pour la gamme spectrale allant de 800 à 12 000  $\text{cm}^{-1}$ . Pour cela ces auteurs ont utilisé les données de la base HITRAN2008 [15], la liste UCL08 [115] et une partie des mesures d'intensités de la région 6400 – 9400  $\text{cm}^{-1}$  publiées en 2010 [116]. Ces dernières regroupent uniquement les raies d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  listées et attribuées dans HITRAN2008 dans la gamme spectrale de 8000 à 9200  $\text{cm}^{-1}$ .

La liste UCL08, publiée en matériel supplémentaire à l'article de A. Shillings et al. (2010) [115], couvre la gamme spectrale de 750 à 20 000  $\text{cm}^{-1}$ . Cette liste a été construite par le groupe de recherche CAVIAR et mélange des données expérimentales (1), des données listées dans HITRAN2008 (2) et enfin des données théoriques de la liste BT2 (3). Finalement pour construire la liste UCL08, les auteurs ont choisi les données énumérées ci dessous, selon l'ordre :

1. Données expérimentales : A. Jenouvrier et al. (2007) [10] ; S. Mikhailenko et al. (2007) [100] (2008) [117] ; L.H. Coudert et al. (2008) [58] ; R.N. Tolchenov and J. Tennyson (2008) [88]
2. HITRAN2008 [15]
3. Liste BT2 [66]

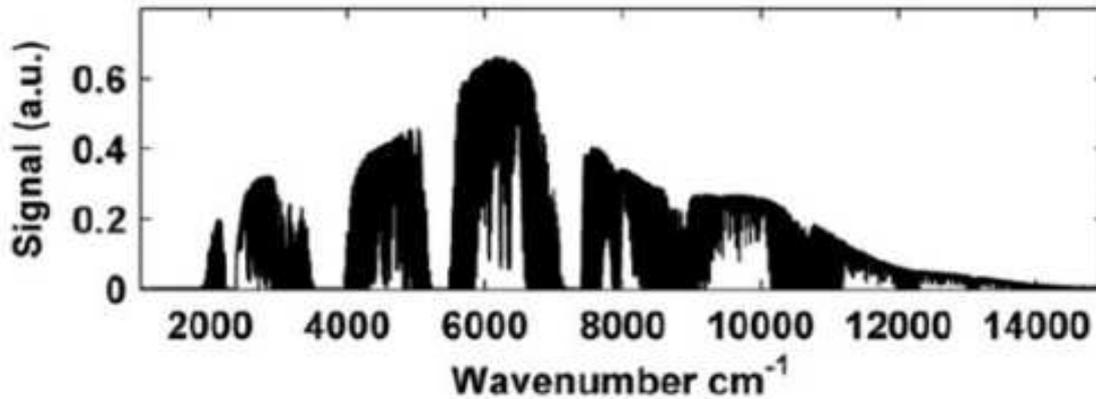
La liste UCL08 se réfère ainsi en priorité aux mesures expérimentales, puis aux données d'HITRAN2008 et enfin à la liste BT2, qui permet d'ajouter un grand nombre de raies faibles, absentes de la base de donnée. Ce choix a été respecté pour l'ensemble de la gamme spectrale hormis pour la région de 8000 à 9200  $\text{cm}^{-1}$ , qui a été prise de BT2. Ainsi pour les régions spectrales étudiées dans ce manuscrit la liste UCL08 fait référence à :

- 1000-2300  $\text{cm}^{-1}$  : les données d'intensités sont reprises de L.H. Coudert et al. (2008) pour l'isotopologue principal et d'HITRAN2008 pour les isotopologues mineurs.
- 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$  : HITRAN2008
- 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  : liste théorique BT2.

Toutes ces références ont déjà été discutées dans ce manuscrit, c'est pourquoi je n'ai pas présenté de comparaison directe avec la liste UCL08.

L. Tallis a procédé à la mesure de l'absorption atmosphérique par temps clair avec des spectres enregistrés avec un STF au sol pointant vers le soleil. Cette étude reprend le précédent travail mené par S. Casanova et al. (2006) [96] à partir de la base HITRAN2004 [16]. La Figure 78 donne un exemple d'un spectre enregistré par l'équipe de L. Tallis, parmi deux séries de mesures

réalisées l'une à C Camborne, (UK Met Office altitude de 88 m) et l'autre à Jungfraujoch (Suisse altitude de 3450 m).



**Figure 78 : Exemple d'un spectre enregistré à la station de Camborne le 22/08/2008.**  
(figure provenant de L. Tallis et al (2011) [114])

La méthode d'analyse des spectres enregistrés est identique pour les travaux de L. Tallis (2011) ou S. Casanova (2006). Le signal reçu par l'instrument est fonction des absorptions de toutes les espèces qui absorbent à chaque niveau de l'atmosphère depuis le sol jusqu'au soleil. Un modèle LBL (raie par raie) est utilisé pour simuler le spectre expérimental. Pour effectuer cette simulation, le modèle LBL nécessite des données spectroscopiques d'entrée que l'on peut trouver par exemple dans les bases de données. Ainsi L. Tallis a effectué une simulation à partir des données d'HITRAN2008 [15], de la liste UCL08 [115] et enfin avec nos mesures d'intensités [116]. Le profil physique des raies utilisé dans le modèle LBL est un profil de Voigt. L'ajustement de la simulation avec le spectre expérimental, permet de ressortir un paramètre de corrélation nommé « parameter a » dans les figures de L. Tallis et al. Quant ce paramètre est égal à 1, cela signifie que la simulation rend compte exactement du spectre expérimental. La Figure 79 présente pour l'ensemble de la gamme spectrale de l'étude de L. Tallis et al. (2011), le paramètre a, obtenu avec la base HITRAN2008 [15]. Sur l'ensemble de la gamme spectrale, l'ajustement entre le spectre expérimental et la simulation est réalisé tous les  $10 \text{ cm}^{-1}$ , ce sont les points de mesures qui apparaissent sur la Figure 79. Cette représentation montre que la région de  $8000 \text{ à } 9200 \text{ cm}^{-1}$ , entourée sur la figure, apparaît avec une forte incohérence, de l'ordre de 20 %. Pour cette étude se sont principalement les raies les plus fortes qui sont prises en compte, ainsi la conclusion de L. Tallis, rejoint notre propre conclusion. La Figure 80 présente un détail de l'étude de L. Tallis pour la région spectrale de  $8000 \text{ à } 9200 \text{ cm}^{-1}$ , le paramètre de corrélation est obtenu avec HITRAN2008 [15], la liste UCL08 [115] et enfin avec nos mesures d'intensités (notées C. Oudot) [116].

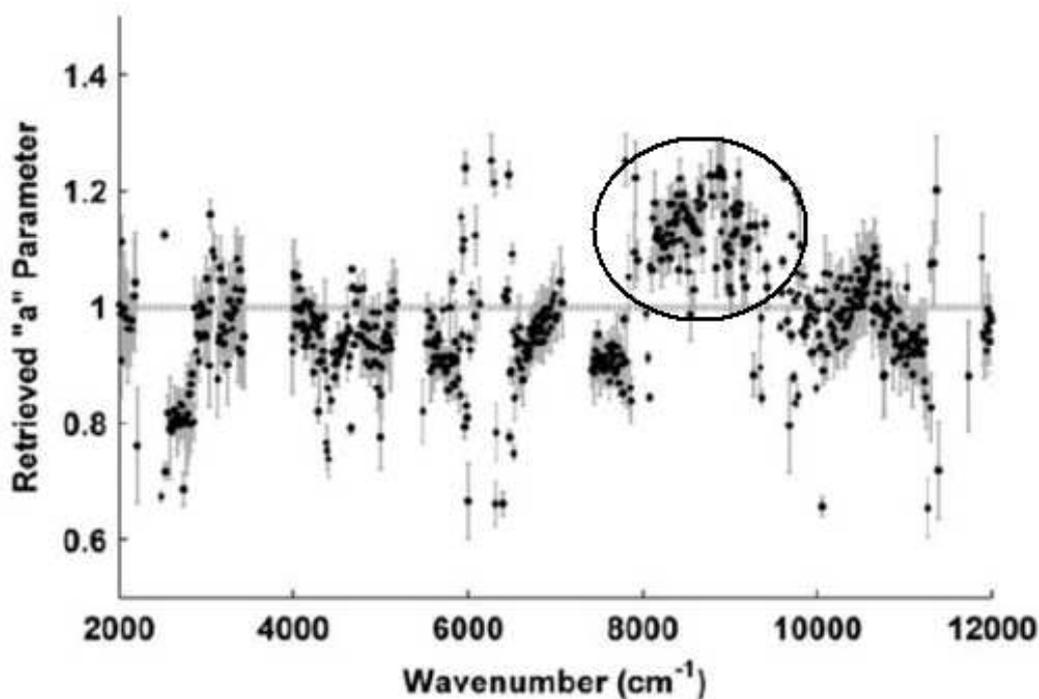


Figure 79 : Paramètre de corrélation “a” obtenu avec HITRAN2008 [15] pour l’ensemble de la gamme spectrale étudiée par L. Tallis et al. (2011) [114]

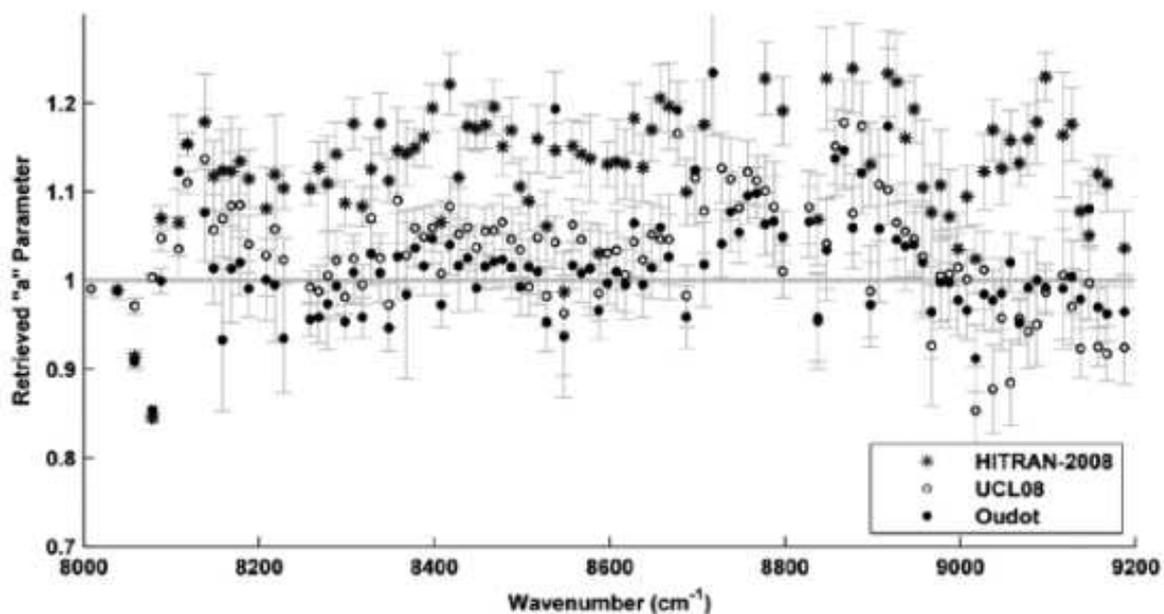


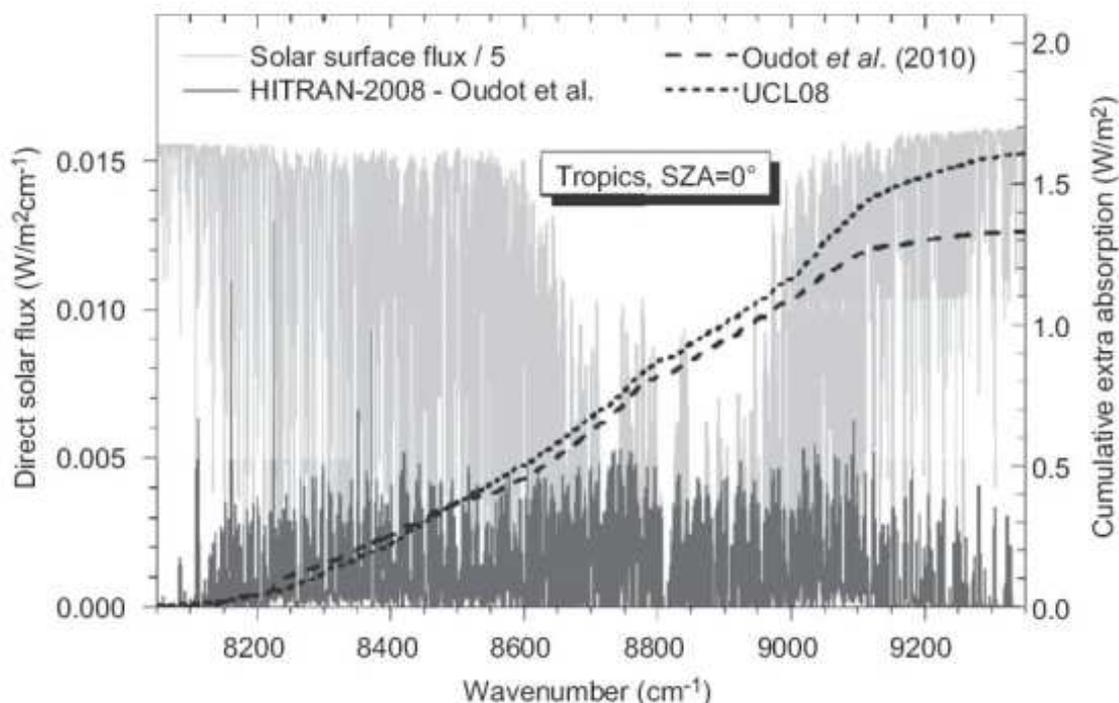
Figure 80 : Détail de la région spectrale de 8000 à 9200  $\text{cm}^{-1}$ . Le paramètre de corrélation entre la simulation et l’expérience est donné pour HITRAN2008 [15], la liste UCL08 [115] et mes données parues en 2010 [116]. (L. Tallis et al. (2011).

L'utilisation de nos données à permis d'améliorer la simulation du spectre atmosphérique dans la région de 8000 à 9200  $\text{cm}^{-1}$ . Les résultats obtenus avec la liste UCL08 ou nos mesures d'intensité sont quasiment équivalents pour cette région spectrale. La Figure 80 a été construite à partir d'un spectre enregistré à Camborne, mais il est intéressant de regarder la valeur moyenne du paramètre de corrélation sur l'ensemble des spectres et pour les deux sites de mesures. C'est ce que propose la Table 32.

| Site de mesure | HITRAN2008 | UCL08 | Oudot et al |
|----------------|------------|-------|-------------|
| Camborne       | 1.19       | 1.06  | 1.07        |
| Jungfraujoch   | 1.15       | 1.01  | 1.02        |

**Table 32 : Moyenne du paramètre de corrélation, pour les deux sites de mesures Camborne et Jungfraujoch (données de L. Tallis et al. (2011) [114])**

Ceci confirme qu'en moyenne nos mesures d'intensités sont plus cohérentes avec les observations de L. Tallis que les données listées dans la base de données HITRAN2008 [15]. Cependant on remarque qu'avec la liste UCL08, ce paramètre peut être encore un peu amélioré. Il faut indiquer que nos données utilisées par L. Tallis, provenant de l'article [116] ne regroupent que les raies d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  listées et attribuées dans HITRAN2008 pour la région de 8000 à 9200  $\text{cm}^{-1}$ . La comparaison devrait être refaite avec l'ensemble des transitions mesurées afin que la comparaison avec la liste UCL08 soit représentative.



**Figure 81 : Spectre calculé du flux solaire arrivant à la surface, en noir, l'absorption supplémentaire due à l'utilisation de mes données par rapport aux données HITRAN2008. Le calcul présenté est réalisé pour une atmosphère tropicale (L. Tallis et al. (2011) [114])**

La Figure 81, présente le calcul de l'absorption solaire en fonction de nombre d'onde pour la région de 8000 à 9200 cm<sup>-1</sup>. Sur cette figure, la différence d'absorption entre HITRAN2008 et nos données (HITRAN2008 - Oudot et al) est tracée en noir. Ceci montre que nos données introduites dans le modèle atmosphérique utilisé par L. Tallis, introduit une absorption supplémentaire. Les lignes en pointillées représentent les absorptions supplémentaires cumulatives sur l'ensemble de la région spectrale, dues à la liste UCL08 ou à nos mesures [116].

De même, à la Figure 81 on remarque encore qu'il y a une différence entre la liste UCL08 et nos données qu'il faut certainement relier au manque de transitions dans la liste publiée en 2010 [116]. Il paraît évident qu'il n'est pas possible de négliger l'effet des nouvelles transitions, non encore listées dans les bases de données. Cependant, il est difficile de déterminer dans cette absorption supplémentaire de la liste UCL08 qu'elle est la part des raies faibles et des raies fortes non encore listées dans les bases de données.

L. Tallis dans ce travail montre une fois de plus que la base HITRAN2008 apparaît en fort désaccord pour la région de 8000 à 9200  $\text{cm}^{-1}$  par rapport aux autres régions spectrales. Cet écart est presque totalement réduit si les mesures obtenues à Reims [116] sont utilisées pour réaliser la simulation du spectre atmosphérique. Ce travail préliminaire, doit permettre à terme de définir une liste de données de référence pour l'étude du continuum de la vapeur d'eau.

## **Chapitre 5.**

# **Mesure des coefficients d'auto- élargissement pour H<sub>2</sub><sup>16</sup>O – Comparaisons et discussions.**

Le logiciel d'ajustement « MultiFiT » permet d'obtenir, en multi-spectres, simultanément les différents paramètres spectroscopiques (position, intensité et coefficient d'élargissement). Pour cela, il faut avoir enregistré des spectres à basse pression et à plus haute pression qui contiennent respectivement l'information sur l'intensité et les élargissements de la raie. Dans la région spectrale de 6400 à 9400 cm<sup>-1</sup>, les spectres ont été enregistrés avec des échantillons d'eau naturelle dans les conditions ci dessus et nous avons pu obtenir des valeurs de coefficients d'auto-élargissement.

Nous avons cherché à exploiter ces coefficients d'auto-élargissement.. Comme l'intensité et le coefficient d'élargissement sont deux paramètres corrélés dans leur détermination, il est intéressant de vérifier leur cohérence. Dans cet esprit nous avons débuté une comparaison théorie – expérience avec le concours de Robert Gamache de l'Université de Lowell (Massachusetts, USA), et de Julien Lamouroux, post doctorant dans cette université. R.R. Gamache dispose d'un modèle théorique construit selon le formalisme de Robert – Bonamy [118] qui permet de calculer les valeurs des coefficients d'élargissement. Ce chapitre, après une brève revue des valeurs listées dans les bases de données, présente les comparaisons préliminaires menées pour les coefficients d'auto-élargissement de l'isotopologue principal pour deux bandes en particulier.

## **1 Etat des lieux**

Les bases de données spectroscopiques récentes BDD08 (HITRAN2008 [15] et GEISA09 [59]) listent des valeurs pour les coefficients d'élargissement provenant de plusieurs références dans la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  :

- 6400 – 8000  $\text{cm}^{-1}$  : Dans cette région spectrale, de 6400 à 6600  $\text{cm}^{-1}$ , on trouve principalement les coefficients d'élargissement publiés par A. Jenouvrier et al (2007) [10] provenant de l'étude réalisée au GSMA sur la région spectrale de 4200 à 6600  $\text{cm}^{-1}$ . Sur le reste de la gamme spectrale se sont majoritairement les coefficients de la compilation de R.A. Toth [52] qui sont listés dans les BDD08. On trouve ponctuellement des coefficients de R.R. Gamache [120] (coefficients obtenus à partir de mesures moyennées en fonction de J) et des valeurs par défaut à 0.444  $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$  proposées par L. Brown [120] pour les transitions non attribuées.
- 8000- 9400  $\text{cm}^{-1}$  : Pour cette région, les coefficients d'élargissements sont presque exclusivement repris des valeurs moyennées de R.R. Gamache [120] et également des valeurs par défaut pour les transitions non attribuées [120].

Dans ces deux régions l'incertitude attribuée à ces coefficients est de l'ordre de 10 à 20 %. Finalement, seule l'étude menée par R.N. Tolchenov et J. Tennyson (2005) [98] fourni une nouvelle liste de transitions expérimentales regroupant l'intensité et le coefficient d'élargissement associés à chaque transition mesurée mais uniquement dans la région allant de 7400 à 9600  $\text{cm}^{-1}$ .

## **2 Résultats préliminaires**

Ce paragraphe présente les premiers résultats obtenus concernant la comparaison des coefficients d'élargissement mesurés expérimentalement avec les données de la littérature et les données calculées par R.R. Gamache. Les coefficients mesurés sont donnés au format HITRAN à la température de 296 K, en utilisant la formule de conversion en température (page 54) :

$$\gamma_0^{self}(T_{Réf}) = \gamma_0^{self}(T_{Exp}) \left( \frac{T_{Exp}}{T_{Réf}} \right)^n$$

Avec :

- n l'indice de dépendance en température, que l'on peut prendre égal par défaut à 0.68 pour la vapeur d'eau. Les valeurs de l'exposant n sont listées dans la base HITRAN2008 [15] (on pourra également se référer à la table n°7, HITRAN2004 [16]).

- $T_{Exp}$  la température de l'expérience
- $T_{Réf}$  la température de référence égale à 296 K dans les bases de données.

Pour cette étude les spectres de la Table 24 ont été utilisés. Ces spectres ont été enregistrés au laboratoire avec des longueurs de parcours de 3 cm jusqu'à 1200 m et pour des pressions variant de 2 à 20 mbar à température ambiante. Les comparaisons présentées listent des transitions parfaitement isolées sur nos spectres expérimentaux. Les raies confondues, pour lesquelles expérimentalement nous ne pouvons donner qu'une seule valeur d'intensité et de coefficient d'élargissement alors qu'il existe plusieurs composantes listées à la même position, ont été exclues des comparaisons présentées dans ce chapitre. En effet, si on peut considérer que l'intensité expérimentale est la somme des intensités des composantes, le parallèle n'est pas possible avec les coefficients d'élargissement.

Comme ce travail vient d'être engagé je dispose pour le moment de peu de données théoriques, c'est pourquoi seront présentées comme résultats préliminaires uniquement deux bandes d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O :

- la bande  $\nu_1+\nu_3$  mesurée dans la région spectrale de 6000 à 8000 cm<sup>-1</sup>. Pour cette bande, je dispose du calcul théorique de R.R. Gamache [119], des données HITRAN2008 [15] et pour quelques transitions, des valeurs expérimentales de R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98].
- la bande  $\nu_1+3\nu_2$  mesurée dans la région spectrale de 8000 à 9400 cm<sup>-1</sup>. Pour celle-ci, je dispose des valeurs expérimentales de R.N. Tolchenov et des données listées dans HITRAN2008.

Pour la bande  $\nu_1+\nu_3$ , présentée Figure 82, en considérant des raies isolées et bien définies l'écart avec le calcul théorique de R. Gamache n'excède pas 10 %. On remarque dans les panneaux inférieurs de cette figure, qui présentent un détail de la comparaison menée, que les écarts avec nos mesures et R. Gamache ou HITRAN2008 sont similaires.

Pour cette bande, R.N. Tolchenov et J. Tennyson listent également des valeurs de coefficients d'élargissement. Comme cela a été expliqué au chapitre 3, les conditions expérimentales de mesure des auteurs obligent à restreindre les comparaisons aux raies d'intensité entre  $1 \times 10^{-25}$  cm/molec et  $5 \times 10^{-24}$  cm/molec. D'où le nombre faible de transitions finalement comparables pour la bande  $\nu_1+\nu_3$  avec les données publiées par R.N. Tolchenov. Néanmoins, cette comparaison montre un très bon accord avec nos mesures dans la Table 33.

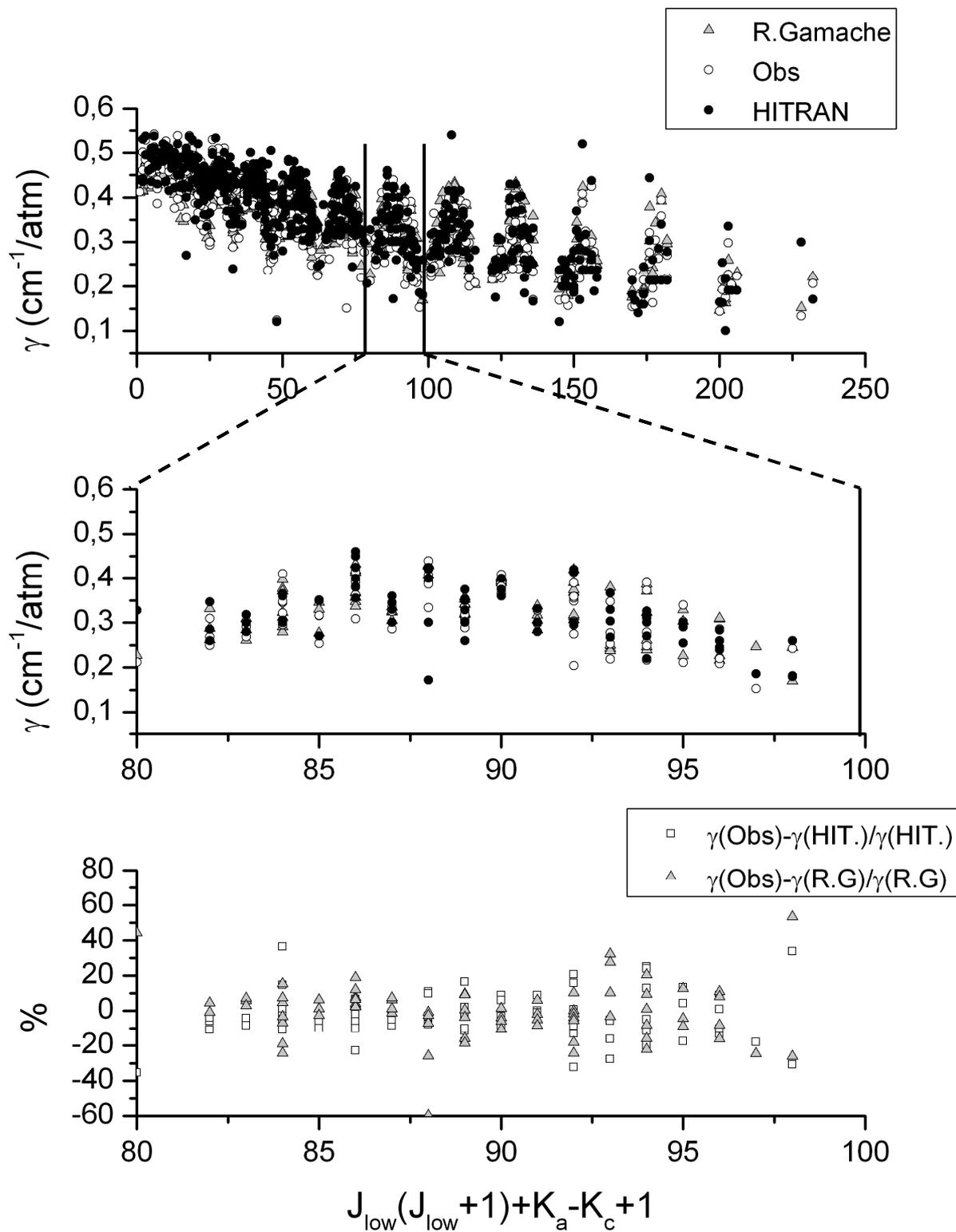


Figure 82 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O, bande  $\nu_1+\nu_3$ . Panneau supérieur : coefficients d'élargissements listés dans HITRAN2008 [15], calculés par R. Gamache [121] et mesurés (Obs) ordonnés en

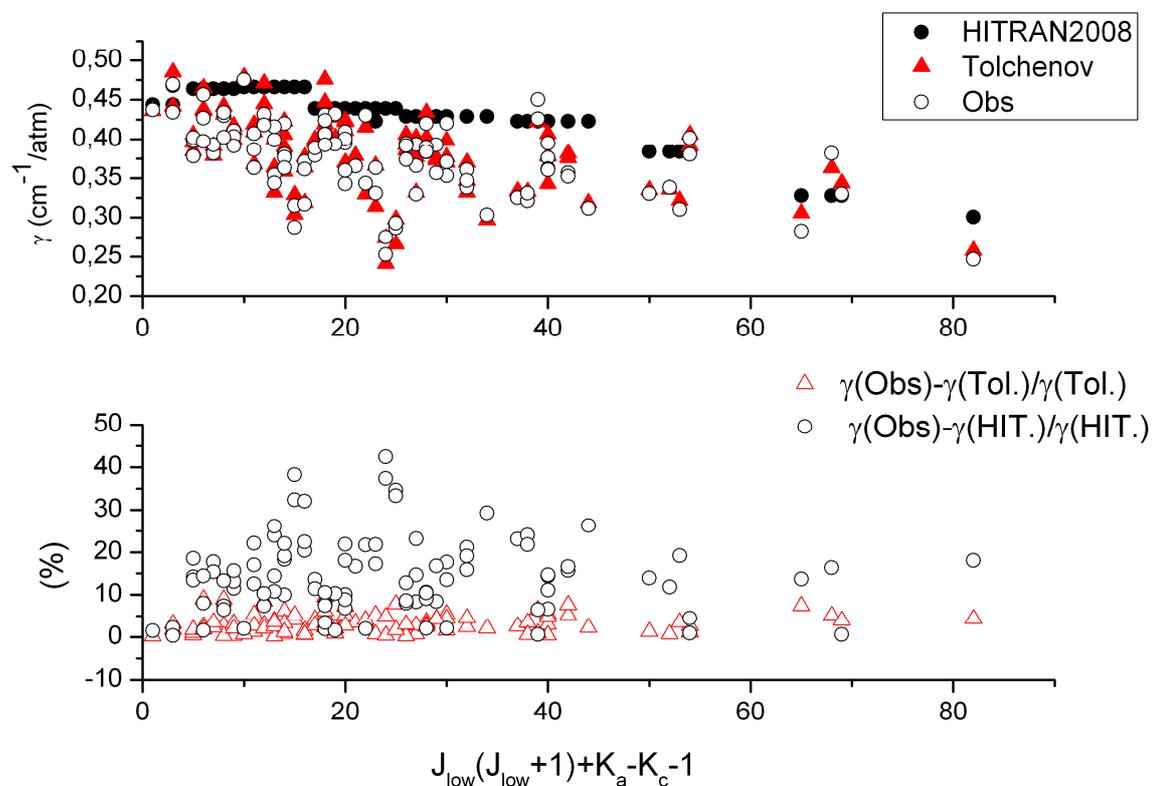
énergie. Panneaux inférieurs : détails de la comparaison, valeurs des coefficients d'élargissement et écarts en % sur la zone sélectionnée.

| Position (cm <sup>-1</sup> ) | $\gamma$ (R.N. Tolchenov) | $\gamma$ (Obs)         | Différence (%) |
|------------------------------|---------------------------|------------------------|----------------|
| 7437,29                      | 0,4450                    | 0,4323                 | -2,9           |
| 7439,23                      | 0,2950                    | 0,2873                 | -2,6           |
| 7445,54                      | 0,3850                    | 0,3501                 | -9,1           |
| 7449,78                      | 0,2350                    | 0,2396                 | 2,0            |
| 7452,29                      | 0,2610                    | 0,2466                 | -5,5           |
| 7452,62                      | 0,2550                    | 0,2592                 | 1,6            |
| 7456,10                      | 0,1820                    | 0,1877                 | 3,1            |
| 7459,46                      | 0,1590                    | 0,1442                 | -9,3           |
| 7462,36                      | 0,2160                    | 0,2187                 | 1,3            |
| 7465,61                      | 0,3810                    | 0,3765                 | -1,2           |
| 7470,00                      | 0,3880                    | 0,3562                 | -8,2           |
| 7472,53                      | 0,2870                    | 0,2854                 | -0,6           |
| 7500,47                      | 0,3520                    | 0,3786                 | 7,6            |
| 7505,09                      | 0,3700                    | 0,3808                 | 2,9            |
| 7549,16                      | 0,3590                    | 0,3721                 | 3,6            |
| 7562,13                      | 0,3270                    | 0,3255                 | -0,5           |
| 7583,99                      | 0,3550                    | 0,3562                 | 0,3            |
| 7610,22                      | 0,3860                    | 0,3935                 | 1,9            |
| 7620,84                      | 0,3770                    | 0,3807                 | 1,0            |
| 7627,36                      | 0,3450                    | 0,3190                 | -7,5           |
| 7632,09                      | 0,3760                    | 0,3983                 | 5,9            |
| 7639,22                      | 0,2780                    | 0,2901                 | 4,4            |
| 7648,48                      | 0,3430                    | 0,3530                 | 2,9            |
| 7651,38                      | 0,3770                    | 0,3952                 | 4,8            |
| 7654,16                      | 0,3240                    | 0,3370                 | 4,0            |
| 7657,67                      | 0,2810                    | 0,2918                 | 3,8            |
| 7666,83                      | 0,3540                    | 0,3343                 | -5,6           |
| 7675,93                      | 0,2820                    | 0,2947                 | 4,5            |
| 7688,45                      | 0,3080                    | 0,3162                 | 2,7            |
| 7708,32                      | 0,2780                    | 0,2894                 | 4,1            |
| 7714,81                      | 0,2990                    | 0,3094                 | 3,5            |
| 7715,02                      | 0,2580                    | 0,2595                 | 0,6            |
| 7718,95                      | 0,3150                    | 0,3094                 | -1,8           |
| 7722,14                      | 0,2790                    | 0,2911                 | 4,3            |
| 7728,86                      | 0,2820                    | 0,2892                 | 2,6            |
| 7768,49                      | 0,2330                    | 0,2456                 | 5,4            |
|                              |                           | <b>Moyenne absolue</b> | <b>4%</b>      |

Table 33: Bande  $\nu_1+\nu_3$ , comparaison des coefficients d'élargissement de R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98] et mesurés (Obs)

Si l'on s'intéresse maintenant à la bande  $\nu_1+3\nu_2$ , mesurée dans la région spectrale de 8000 à 9400 cm<sup>-1</sup>, un nombre plus important de transitions appartenant à la liste de R.N. Tolchenov ont pu être comparées (environ 110). Dans cette région spectrale, les données listées dans HITRAN2008 sont des valeurs mesurées moyennées en fonction du nombre quantique J [119], ou mise par défaut à 0.444 cm<sup>-1</sup>/atm [120]. Les valeurs de coefficient d'élargissement apparaissent ainsi sous la forme de paliers de valeurs au panneau supérieur de la Figure 83. Pour cette bande, nos mesures sont en bon accord avec les valeurs de coefficients d'élargissement de R.N. Tolchenov (écarts inférieurs à 10 % en

moyenne). Alors que, comme l'on peut s'y attendre, la même comparaison menée avec HITRAN2008 présente d'importants écarts allant jusqu'à 45 %.



**Figure 83 : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O bande  $\nu_1+3\nu_2$ . Panneau supérieur : Coefficients d'élargissements d'HITRAN2008 [15], de R.N. Tolchenov [98], et valeurs mesurées (Obs) ordonnés en énergie. Panneau inférieur : Ecart absolu en % entre les valeurs mesurées et les données de R.N. Tolchenov ou HITRAN2008.**

Les premiers résultats présentés dans ce chapitre sont très encourageants et nous invitent à poursuivre la comparaison bande par bande des coefficients d'élargissement. Et ceci d'autant plus que les bases de données listent des valeurs de coefficient d'élargissement moyennées et donc peu précis. Bien que nos spectres aient été enregistrés dans le but d'obtenir des mesures d'intensités très précises, nous avons pu en méthode multi-spectres et avec des pressions maximales de 20 mbar obtenir également les coefficients d'auto-élargissement. Une liste de coefficients d'élargissements obtenus de 8000 à 9400 cm<sup>-1</sup> est disponible dans les annexes de ce manuscrit. Cette liste fait partie de la publication C. Oudot et al. (2010) [112] et regroupe, toutes bandes confondues, les coefficients d'élargissement d'HITRAN2008, de R.N. Tolchenov et J. Tennyson ainsi que mes mesures pour les transitions d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O listées et attribuées dans HITRAN2008.



## ***Conclusion générale***



Les travaux présentés dans ce manuscrit concernent la détermination des paramètres spectroscopiques (position, intensité et coefficient d'élargissement) de la vapeur d'eau. Bien que la molécule d'eau soit l'une des molécules les plus étudiées en laboratoire on s'aperçoit dans la littérature que certaines régions restent mal connues. Ces régions, particulièrement si elles correspondent à des fenêtres de mesures atmosphériques demande une révision de paramètres spectroscopiques dans les bases de données. C'est pourquoi mon travail s'est dirigé vers des domaines spectraux répondant à ces critères : 10  $\mu\text{m}$  et 1.5  $\mu\text{m}$ . Pour ces régions spectrales, des spectres enregistrés au laboratoire avec un Spectromètre par Transformation de Fourier ont permis d'accéder à la position, l'intensité et au coefficient d'auto-élargissement des transitions.

Dans la région spectrale de 10  $\mu\text{m}$ , deux études séparées ont été menées : pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  dans la gamme de 1200 à 1400  $\text{cm}^{-1}$ , et pour  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et  $\text{HD}^{18}\text{O}$  dans la gamme de 1000 à 2300  $\text{cm}^{-1}$ . Ces gammes spectrales restent mal connues dans les bases de données et également correspondent au domaine de mesure de l'instrument IASI. Les objectifs attendus pour ces deux études n'étaient pas les mêmes. Pour  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , notre travail était de montrer, à l'aide de nouvelles mesures de laboratoire, quelle base de données était la mieux adaptée à l'inversion des spectres de IASI. Cela nous a amené à mesurer un ensemble de plus de 300 transitions et particulièrement des raies de faibles intensités. Avec ces mesures et les travaux récents de L.H. Coudert [58] et R.A. Toth [65], nous avons montré que les données listées dans HITRAN2008 [15] nécessitaient une révision partielle, principalement pour la bande 2v<sub>2</sub>-v<sub>2</sub>. Cette étude a fait l'objet d'une publication en 2010 au JQSRT (L. Régalia et al. [7]), et la liste complète des transitions est donnée en annexe de ce manuscrit. Nous nous sommes ensuite intéressés à l'isotopologue mineur  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . Avec l'enrichissement en  $^{18}\text{O}$  de nos spectres, nous avons pu mesurer un nombre important de transitions de l'isotopologue  $\text{HD}^{18}\text{O}$ , qui a été inclut dans cette étude. L'objectif majeur de ce second travail était la mesure des intensités des raies d' $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , qui reste un isotopologue mal connu dans les bases de données. Ce travail a été réalisé en collaboration avec S. Mikhailenko (IAO, Tomsk), qui a effectué l'attribution de nos spectres et a mené à un ensemble de 1800 transitions mesurées pour  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et environ 1000 transitions pour  $\text{HD}^{18}\text{O}$ . Ce travail a permis de montrer que les intensités des bases de données HITRAN2008 [15] et GEISA09 [50] apparaissent sous estimées par rapport à nos mesures.

Le travail dans la région de 1.5  $\mu\text{m}$  fait suite aux travaux engagés au laboratoire depuis de nombreuses années sur la vapeur d'eau en abondance naturelle [10][78][79]. Hormis l'intérêt de poursuivre la connaissance globale du spectre d'absorption de la vapeur d'eau, la région spectrale de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  présente également d'importants problèmes au niveau des intensités des raies

dans les bases de données. Pour mener à bien cette étude, un ensemble de spectres a été enregistré au laboratoire qui ont permis d'atteindre une gamme d'intensité allant de  $1 \times 10^{-19}$  à  $1 \times 10^{-27}$  cm/molec. Plus de 11 000 transitions ont pu être mesurées, le traitement des spectres a été conjointement avec Le Wang, post doctorant au laboratoire durant l'année 2008/2009 et l'attribution des spectres a été effectuée par S. Mikhailenko (IAO, Tomsk). Les mesures d'intensités ont montré pour la région spectrale de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ , d'importants écarts avec les bases de données récentes (jusqu'à 20 %), ce qui confirme les conclusions amenées par différents groupes de recherche, dont j'ai listé les résultats dans ce manuscrit. Cette région spectrale accuse également un manque important de transitions listées dans les bases de données. La région spectrale de 6400 à 8000  $\text{cm}^{-1}$ , revue par R.A. Toth [52] et dont les données sont intégrées aux bases spectroscopiques, montre une bonne cohérence globale mais néanmoins, nous avons pu montrer que les intensités listées dans les bases spectroscopiques apparaissent sur estimées. Ce travail a fait l'objet d'une première publication concernant les transitions d' $\text{H}_2^{16}\text{O}$  listées et attribuées dans HITRAN2008 dans la gamme spectrale de 8000 à 9400  $\text{cm}^{-1}$  [116]. La liste de ces transitions est reproduite dans les annexes de ce manuscrit. Nous prévoyons dans la suite de publier l'ensemble des résultats obtenus pour la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ .

Il faut remarquer que la région centrée à 8800  $\text{cm}^{-1}$  est également utilisée pour l'étude de la basse atmosphère de Vénus (J. Bailey [97]) et pourrait être également une région d'intérêt pour l'étude du continuum de vapeur d'eau [113]. Concernant cette dernière application, les résultats de L. Tallis [114] (Université de Reading, UK) sur un travail préliminaire de comparaison des bases de données pour l'étude du continuum, ont été une source importante d'informations quant à l'utilisation des données spectroscopiques dans l'analyse de spectres atmosphériques. L. Tallis a ainsi montré que nos mesures en comparaison par rapport à HITRAN2008, permettent de mieux simuler leurs spectres atmosphériques et que l'introduction de notre travail dans leur modèle entraîne une absorption supplémentaire de la vapeur d'eau. Dernièrement nous avons débuté un travail de comparaison des coefficients d'auto-élargissement obtenus simultanément aux intensités dans la région spectrale de 6400 à 9400  $\text{cm}^{-1}$ . Les premières comparaisons, présentées à la fin de ce manuscrit, sont prometteuses, mais demande d'être poursuivies pour l'ensemble des mesures afin de pouvoir en tirer des conclusions significatives.

Comme cela a été montré dans ce manuscrit il est nécessaire que les paramètres spectroscopiques obtenus en laboratoire soient très précis pour les exploitations atmosphériques : suivi du climat, détermination d'abondance, étude du continuum ou encore l'étude de l'atmosphère des autres planètes. Les travaux menés durant ce doctorat ont permis d'obtenir de nouveaux paramètres spectroscopiques expérimentaux principalement pour les positions et les intensités.

Cependant, dans les conditions atmosphériques, l'analyse des transitions demande, en plus de l'intensité, de bien connaître les effets d'élargissement, et en particulier les élargissements par l'air. Ces études sortent du cadre de mon travail, ciblé principalement sur les intensités des transitions. Cependant ce pourrait être l'un des points qui permettrait de poursuivre le travail engagé durant ce doctorat.



# Liste des Figures

|  |    |
|--|----|
| Figure 1 : Principe de l'interféromètre de Michelson. ....   | 9  |
| Figure 2 : Fonction « porte » à gauche et sa transformée de Fourier à droite. ....   | 12 |
| Figure 3 : Spectromètre par Transformation de Fourier, montage général ....  | 17 |
| Figure 4 : Schéma de principe de l'interféromètre de Michelson construit au laboratoire ....   | 18 |
| Figure 5 : Gamme de fonctionnement des détecteurs et séparatrices dont dispose le laboratoire ....   | 19 |
| Figure 6 : Principe du système à réflexion multiples ....  | 20 |
| Figure 7: Vues de la cellule de 50m, installée au sous-sol du bâtiment 7, UFR Sciences Exactes et Naturelles, Reims.....   | 21 |
| Figure 8 : Interféromètre de Michelson couplé à la cellule de 50 m de base.....  | 22 |
| Figure 9 : Photo du parcours optique externe, dispositif expérimental couplé à la cellule de 50 m.....   | 23 |
| Figure 10 : Principe de la modulation de la différence de marche ....  | 26 |
| Figure 11 : Schéma de principe de l'amélioration de la modulation de différence de marche.....   | 28 |
| Figure 12 : Effet de l'augmentation de la fréquence de modulation sur le rapport signal sur bruit d'un enregistrement. ....  | 29 |
| Figure 13: Exemple de spectre CO <sub>2</sub> , enregistré à une longueur de 4 m avec la double détection. Raie CO <sub>2</sub> : position : 6678.638 ; intensité : 1.039×10 <sup>-25</sup> cm/molec.....  | 31 |
| Figure 14 : Fenêtre d'accueil du logiciel d'acquisition ....   | 34 |
| Figure 15 : Fenêtre de détermination des paramètres expérimentaux : 1) signal et source ; 2) paramètres d'enregistrement ; 3) choix des éléments optiques ....   | 35 |
| Figure 16 : Fenêtre interférométrique, détermination des paramètres interférométriques pour la région spectrale 1400 – 2300 cm <sup>-1</sup> .....   | 36 |
| Figure 17 : Interférogramme autour de la différence de marche nulle et sa transformée de Fourier en sinus. ....  | 38 |
| Figure 18 : Visualisateur, fenêtre avec plusieurs spectres enregistrés dans la région à 1.25 μm. ....  | 40 |
| Figure 19 : Exemple d'une division d'un spectre par un spectre cuve vide. Spectre 2d, Table 17 (page 116) et spectre cuve vide associé. ....   | 41 |
| Figure 20 : Loi de Beer-Lambert.....   | 45 |
| Figure 21 : Système à deux niveaux d'énergie soumis à un flux incident.....  | 47 |
| Figure 22 : Elargissement Doppler. Déplacement de la position de la transition $\sigma_i$ . ....   | 52 |
| Figure 23 : Fenêtre d'ajustement sous « MultiFiT ». Exemple de l'ajustement d'une raie d'H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O listée dans HITRAN2008 à 7427.954 cm <sup>-1</sup> , d'intensité 3.5 10 <sup>-23</sup> cm/molec. L'ajustement est réalisé sur des spectres de longueurs de parcours de 36 m (voir Table 24, page 145). Résidus de l'ajustement multipliés par 10. .... | 62 |
| Figure 24 : Organigramme du logiciel MFT ....  | 63 |
| Figure 25 : Réalisation d'un "peak list" sous « MultiFiT ». Chaque raie prise en compte dans le peak list apparaît avec un marqueur jaune. ....  | 65 |
| Figure 26 : Comparaison synthétique de l'ajustement simple spectre et multi-spectres. Exemple pour les paramètres intensité et coefficient d'élargissement.....  | 67 |
| Figure 27 : Ajustement multi-spectres réalisé avec deux valeurs différentes du diaphragme d'entrée : diaphragme spectre et diaphragme apparent. Détail des ajustements : Table 1 .....   | 69 |
| Figure 28 : Molécule d'eau.....  | 73 |

|   |     |
|---|-----|
| Figure 29 : Modes de vibration normaux de la molécule d'eau.....  | 74  |
| Figure 30 : Diagramme de corrélation entre les cas limites des toupies allongées (prolates) et aplaties (oblates) (figure de E. Biéumont (2006) [30]). .....  | 80  |
| Figure 31 : Schématisation des niveaux vibrationnels et rotationnels .....  | 81  |
| Figure 32 : Spectre de vapeur d'eau enregistré en abondance naturelle : parcours d'absorption 36 m, pression totale 5 Torr. La forme de l'enveloppe est due aux filtres optiques. ....  | 82  |
| Figure 33 : Schématisation d'un groupe de combinaison .....   | 83  |
| Figure 34 : Spectromètre IASI, embarqué sur le satellite METOP-A .....  | 90  |
| Figure 35 : Spectre IASI, en noir, enregistré en 2006 au dessus de l'Australie [47]. Les panneaux suivant présentent les absorptions, calculées à partir des bases de données, des molécules pouvant être détectées sur un spectre IASI. (figure de C. Clerbaux (2009)).....  | 91  |
| Figure 36 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison des intensités calculées du LISA [60][61][62] et HITRAN2004 [16] (figure de L. Régalia [63]).....  | 96  |
| Figure 37 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> : Comparaison des intensités des BDD04 (HITRAN2004 [16], GEISA03 [50]) avec les données LISA de 2005 [60][61][62] et les données L.H. Coudert et al. (2008) [58]. .....  | 104 |
| Figure 38 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> : Comparaison des données LISA (2005) [60][61][62] et L.H Coudert et al.(2008) [58] avec nos mesures S(Obs). .....   | 104 |
| Figure 39 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> : Rapports d'intensité pour la bande $\nu_2$ entre nos mesures S(Obs) et les bases spectroscopiques BDD04 ([16][50]) ou L.H. Coudert et al. (2008) [58] .....  | 106 |
| Figure 40 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> . Rapports d'intensité pour la bande $2\nu_2 - \nu_2$ entre nos mesures S(Obs) et les bases spectroscopiques BDD04 ([16][50]) ou L.H. Coudert et al. (2008) [58] .....   | 106 |
| Figure 41 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> . Bande $2\nu_2 - \nu_2$ . Rapports d'intensité entre nos mesures et R.A. Toth et al. (2011), en noir, ou entre L.H. Coudert et al. (2008) et R.A. Toth (2011), en gris.....   | 108 |
| Figure 42 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> . Rapports d'intensités entre nos mesures et GEISA 03 [50] et la liste alternative proposée par Stewart (2003) [51]. .....   | 110 |
| Figure 43 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> . Rapport d'intensité entre nos mesures et les valeurs d'intensités théoriques des listes BT2 [66] ou PS [38][39]. .....   | 110 |
| Figure 44 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> . Pour l'ensemble des raies mesurées dans cette étude, rapports d'intensité entre nos mesures et les données HITRAN2004 [16] ainsi que les données publiées par L.H. Coudert [58]. .....   | 111 |
| Figure 45: Exemples de specters enregistrés dans les régions n°2 ( 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> ) et n°3 (1400 – 2300 cm <sup>-1</sup> ). .....   | 115 |
| Figure 46: Détail du spectre 2g montrant le zéro de transmission observé sur deux transitions saturées. ....  | 115 |
| Figure 47 : Spectres enrichis <sup>18</sup> O. Calibration de la position par comparaison de raies d'H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O isolées et bien définies entre HITRAN2008 [15] et nos mesures. ....   | 123 |
| Figure 48 : Ensemble des raies mesurées d'H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O et HD <sup>18</sup> O par rapport aux transitions listées dans les BDD08 [15][59]. .....   | 124 |
| Figure 49 : H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O Région spectrale 1000 – 2300 cm <sup>-1</sup> : Rapport d'intensité entre nos mesures d'intensité S(Obs) et les BDD08 [15][59] .....   | 126 |
| Figure 50 : H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O, bande $\nu_1 - \nu_2$ . Comparaison des intensités observées avec les BDD08 [15][59], en noir, et avec les intensités de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39], symbole ouvert : raies listées dans les BDD08, symbole gris : raies nouvelles. ....  | 126 |
| Figure 51 : H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O. Région spectrale 1000 – 2300 cm <sup>-1</sup> . Comparaison entre les intensités observées et calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]. Le panneau supérieur représente les raies listées dans les BDD08 [15][59], et le panneau inférieur les nouvelles raies non encore listées dans ces bases. .... | 128 |

|  |     |
|--|-----|
| Figure 52 : H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O. Région spectrale 1000 – 2300 cm <sup>-1</sup> . Rapport d'intensité entre nos mesures S(Obs) et les mesures de A.W. Liu et al. (2006) [73].  | 129 |
| Figure 53 : HD <sup>18</sup> O. Région spectrale 1000 – 2300 cm <sup>-1</sup> . Comparaison des intensités observées S(Obs) avec HITRAN2008 [15] ou H. Partridge et D.W. Schwenke (PS) [38][39].   | 131 |
| Figure 54 : Détail de trois spectres dans la région de 8600 à 9000 cm <sup>-1</sup> enregistrés avec une pression de 5 Torr et pour 3 longueurs différentes.   | 144 |
| Figure 55 : Exemple d'ajustement réalisé un profil de Voigt avec les résidus de l'ajustement. Spectre 6a, Table 24. Raie H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O listée dans HITRAN2008 à 8641.341300 cm <sup>-1</sup> .  | 146 |
| Figure 56 : Ecart avec les positions d'HITRAN2008 après calibration en position de la région spectrale 6400 – 8000 cm <sup>-1</sup> .  | 150 |
| Figure 57 : Ensemble des transitions d'H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O mesurées dans la région spectrale de 6400 à 9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison avec les données listées dans les BDD08 [15][59]   | 155 |
| Figure 58 : Ensemble des transitions mesurées pour les isotopologues H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O, H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O et HD <sup>16</sup> O dans la région spectrale de 6400 à 9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison avec les données listées dans les BDD08 [15][59]. | 156 |
| Figure 59 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 8000-9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison des intensités obtenues S(Obs) par rapport aux bases de données BDD08 [15][59].   | 163 |
| Figure 60 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 8000-9400 cm <sup>-1</sup> . Rapport d'intensité entre les intensités mesurées S(Obs) et les intensités listées dans les bases de données BDD08 [15][59], représenté en fonction de l'intensité.                       | 163 |
| Figure 61 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectral 8000-9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison entre nos mesures et les données de R.N. Tolchenov et J. Tennyson. En noir, les raies prises égales à HITRAN2004 dans la liste de R.N. Tolchenov.                              | 165 |
| Figure 62 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectral 8000-9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison de nos mesures avec les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39]   | 166 |
| Figure 63 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O. Région 6400-9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison globale de nos mesures par rapport aux intensités listées dans les BDD08 [15][59].   | 168 |
| Figure 64 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région spectrale 6400-9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison globale entre nos mesures et les intensités calculées de H. Partridge et D.W. Schwenke [38][39].  | 169 |
| Figure 65 : Comparaison des raies d'H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O d'intensité allant de 1×10 <sup>-25</sup> et 5×10 <sup>-24</sup> cm/molec entre R.N. Tolchenov et J. Tennyson (2005) [98] et nos mesures.   | 170 |
| Figure 66 : Région spectrale n°1. Comparaison des intensités d'H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O, mesurées dans cette étude et des intensités calculées (PS).   | 173 |
| Figure 67 : H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O. Région spectrale 8000-9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison entre les intensités observées et les BDD08 [15][59] et avec les intensités de PS [38][39].  | 176 |
| Figure 68 : H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O Région spectral 8000-9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison entre les intensités observées et les BDD08 [15][59] et les intensités de PS [38][39].   | 176 |
| Figure 69 : H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O. Région spectrale 8000 – 9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison entre les intensités mesurées et les intensités proposées par A. W. Liu et al. [99] et par R. N. Tolchenov et J. Tennyson [98].  | 177 |
| Figure 70 : H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O Région spectrale 8000-9400 cm <sup>-1</sup> . Comparaison entre les intensités mesurées et les données proposées par A. W. Liu et al. [99] et par R. N. Tolchenov et J. Tennyson [98].  | 177 |
| Figure 71 : H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O Région spectrale 6400-9400 cm <sup>-1</sup> . Rapport d'intensité entre nos données et les BDD08, les calculs variationnels de PS, et les données de R.N. Tolchenov et J. Tennyson.   | 180 |
| Figure 72 : H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O Région spectrale 6400-9400 cm <sup>-1</sup> . Rapport d'intensité entre nos données et les BDD08, les calculs variationnels de PS, et les données de R.N. Tolchenov et J. Tennyson.   | 181 |
| Figure 73 : HD <sup>16</sup> O. Région spectrale 6400-9400 cm <sup>-1</sup> . Rapport d'intensité entre nos données et les BDD08 et les calculs variationnels de PS.   | 182 |

|  |     |
|--|-----|
| Figure 74 : Vue générale de l'étude de S. Mikhailenko et al (2011). En bleu les raies déjà listées, et obtenues par STF. En rouge les raies obtenues par CRDS. (Figure de S. Mikhailenko et al. [101]).....  | 184 |
| Figure 75 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O. Comparaison entre les données CRDS de S. Mikhailenko et al. (2011) [101] et nos mesures. En rouge le rapport d'intensité entre les intensités calculées de PS [38][39] et nos mesures. ....  | 186 |
| Figure 76 : Rapport d'intensité entre les mesures de S. Mikhailenko et al [101] et PS pour l'ensemble des transitions mesurées par ces auteurs. Les symboles pleins distinguent les transitions d'H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O, qui montrent un enrichissement de 25 %. (figure de S. Mikhailenko et al. (2011) [101]) .....                               | 186 |
| Figure 77 : Comparaison entre les données CRDS de S. Mikhailenko et al. (2007) [100] et nos mesures. En rouge le rapport d'intensité entre les intensités calculées de PS [38][39] et nos mesures.....   | 188 |
| Figure 78 : Exemple d'un spectre enregistré à la station de Camborne le 22/08/2008. (figure provenant de L. Tallis et al (2011) [114]).....  | 192 |
| Figure 79 : Paramètre de corrélation "a" obtenu avec HITRAN2008 [15] pour l'ensemble de la gamme spectrale étudiée par L. Tallis et al. (2011) [114] .....   | 193 |
| Figure 80 : Détail de la région spectrale de 8000 à 9200 cm <sup>-1</sup> . Le paramètre de corrélation entre la simulation et l'expérience est donné pour HITRAN2008 [15], la liste UCL08 [115] et mes données parues en 2010 [116]. (L. Tallis et al. (2011)).....   | 193 |
| Figure 81 : Spectre calculé du flux solaire arrivant à la surface, en noir, l'absorption supplémentaire due à l'utilisation de mes données par rapport aux données HITRAN2008. Le calcul présenté est réalisé pour une atmosphère tropicale (L. Tallis et al. (2011) [114]).....   | 195 |
| Figure 82 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O, bande $\nu_1+\nu_3$ . Panneau supérieur : coefficients d'élargissements listés dans HITRAN2008 [15], calculés par R. Gamache [121] et mesurés (Obs) ordonnés en énergie. Panneaux inférieurs : détails de la comparaison, valeurs des coefficients d'élargissement et écarts en % sur la zone sélectionnée. .... | 200 |
| Figure 83 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O bande $\nu_1+3\nu_2$ . Panneau supérieur : Coefficients d'élargissements d'HITRAN2008 [15], de R.N. Tolchenov [98], et valeurs mesurées (Obs) ordonnés en énergie. Panneau inférieur : Ecart absolu en % entre les valeurs mesurées et les données de R.N. Tolchenov ou HITRAN2008. ....                          | 202 |

# Liste des Tables

|   |     |
|---|-----|
| Table 1 : Détails expérimentaux des ajustements multi-spectres menés avec deux valeurs différentes de diaphragme d'entrée : diaphragme spectre et diaphragme apparent.....  | 70  |
| Table 2 : Fréquences fondamentales pour H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O, H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O et HD <sup>16</sup> O [28]. .....  | 74  |
| Table 3 : Groupe C <sub>2v</sub> . Eléments de symétrie.....  | 75  |
| Table 4 : Table de multiplication du groupe C <sub>2v</sub> .....   | 75  |
| Table 5 : Tables des représentations irréductibles du groupe C <sub>2v</sub> .....  | 75  |
| Table 6 : Eléments de symétrie du groupe C <sub>s</sub> .....   | 76  |
| Table 7 : Table de multiplication du groupe C <sub>s</sub> .....  | 76  |
| Table 8 : Table des représentations irréductibles du groupe C <sub>s</sub> .....  | 76  |
| Table 9 : Bandes spectrales de l'instrument IASI .....  | 90  |
| Table 10 : Région spectrale autour de 10 µm. Evolution des bases de données pour la vapeur d'eau valable pour les positions et intensités. * les données de L.H. Coudert intégrées au BDD08 rassemblent les raies d'intensité les plus fortes jusqu'à 1×10 <sup>-25</sup> cm/molec, les raies les plus faibles sont reprise d'HITRAN2004..... | 93  |
| Table 11 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O région spectrale de 1200 à 1400 cm <sup>-1</sup> : Conditions d'enregistrement des spectres .....   | 97  |
| Table 12 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O Région 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> . Rapports isotopiques obtenus sur les spectres 9, 10 et 11, enregistrés avec la cellule de 50m de base. Entre parenthèses, le pourcentage de différence entre le rapport isotopique du spectre et rapport naturel.....   | 100 |
| Table 13 : H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O région spectrale 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup> . Inter-comparaison des valeurs d'intensité d'H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O obtenues sur les spectres long parcours (9 à 11, Table 11) par rapport aux spectres moyens parcours ( 7 et 8, Table 11).....   | 100 |
| Table 14 : Transitions d'H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O mesurées dans la region spectrale de 1200 à 1400 cm <sup>-1</sup> .....   | 101 |
| Table 15 : Comparaisons menées entre la liste d'intensités mesurée de 1200 à 1400 cm <sup>-1</sup> et les données de la littérature. ....   | 102 |
| Table 16 : Spectres enrichis <sup>18</sup> O. Détail des éléments optiques utilisés pour l'enregistrement des spectres.....   | 114 |
| Table 17 : Spectres enrichis <sup>18</sup> O. Conditions d'enregistrement des spectres. ....  | 116 |
| Table 18 : Statistique des attributions des transitions d'H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O et HD <sup>18</sup> O mesurées dans la région spectrale de 1000 à 2300 cm <sup>-1</sup> .....  | 119 |
| Table 19 : Spectres enrichis <sup>18</sup> O. Détails des rapports isotopiques déterminés sur les spectres basses pression de chaque série de spectres enregistrés avec la cellule de 1 m de base. ....   | 120 |
| Table 20 : Spectres enrichis <sup>18</sup> O. Pressions partielles H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O spectres 30 cm.....   | 121 |
| Table 21: Résumé des transitions d'H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O sélectionnées pour la calibration des specters expérimentaux. Pour chaque région spectrale, la précision moyenne des positions calculées [67] est renseignée ainsi que le RMSD correspondant entre les positions expérimentales et calculées. ....                          | 123 |
| Table 22: Isotopologue H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O. Résumer des comparaisons menées entre les intensités expérimentales et les données de la littérature, pour chaque bande. Les RMSD sont calculés pour l'ensemble des transitions comparables (excepté les transitions doubles). ....  | 125 |
| Table 23 : Evolution des données d'intensité d'H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O des bases spectroscopiques HITRAN et GEISA .....  | 139 |
| Table 24 : Région spectrale 6400 – 9400 cm <sup>-1</sup> . Conditions d'enregistrement des spectres. ....   | 145 |

|   |     |
|---|-----|
| Table 25 : Région 6400 – 9400 $\text{cm}^{-1}$ . Rapports isotopiques mesurés pour $\text{HD}^{16}\text{O}$ sur les spectres longs parcours. ....   | 148 |
| Table 26 : Région spectrale 6400 – 9400 $\text{cm}^{-1}$ . Moyenne des rapports isotopiques mesurés par ajustement de la pression partielle dans MultiFIT, entre parenthèse le pourcentage d'écart avec la valeur du rapport naturel..... | 148 |
| Table 27 : Corrections en position appliquées sur les spectres enregistrés dans la région spectrale de 6400 à 8000 $\text{cm}^{-1}$ (Table 24).....   | 149 |
| Table 28 : Nombre de raies mesurées par isotopologues dans la région spectrale 6400 – 9400 $\text{cm}^{-1}$ . ....  | 151 |
| Table 29 : Statistique des attributions des transitions obtenues pour $\text{H}_2^{16}\text{O}$ .....   | 157 |
| Table 30 : Statistique des attributions obtenues pour les isotopologues mineurs : $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , $\text{H}_2^{17}\text{O}$ et $\text{HD}^{16}\text{O}$ .....   | 159 |
| Table 31 : Nombre de raies comparées dans la région spectrale 6400-9400 $\text{cm}^{-1}$ , détaillées par isotopologue pour chaque source de la littérature.....  | 161 |
| Table 32 : Moyenne du paramètre de corrélation, pour les deux sites de mesures Camborne et Jungfraujoch (données de L. Tallis et al. (2011) [114]).....   | 194 |
| Table 33: Bande $\nu_1+\nu_3$ , comparaison des coefficients d'élargissement de R.N. Tolchenov et J. Tennyson [98] et mesurés (Obs).....  | 201 |

# *Références bibliographiques*

- [1] J. Pinard. Réalisation d'un spectromètre par transformée de Fourier à très haut pouvoir de résolution. Thèse d'état, Université Paris-Sud, 1969
- [2] H. Delouis. Mise au point d'une chaîne de programme permettant le calcul et l'exploitation automatique des spectres obtenus par transformation de Fourier. Thèse d'état, Université Paris-Sud, 1973
- [3] P.R. Griffiths et J.A. de Haseth. Fourier Transform infrared Spectroscopy. Edited by P.J. Elving et J.D. Winefordner, 1986
- [4] P. Connes et G. Michel. Astronomical Fourier spectrometer. Applied Optics, 1975, 14 : 2067-2084
- [5] J-J. Plateaux, A. Barbe and A. Delahaigue. Reims high resolution Fourier transform spectrometer. Data reduction for ozone. Spectrochimica Acta, 1995, 51A : 1153-1169
- [6] L. Régalia. Mesures à l'aide d'un spectromètre par transformation de Fourier, des intensités et coefficients d'élargissement de molécules d'intérêt atmosphérique. Etude des précisions : application à N<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O, O<sub>3</sub>. Thèse, Université de Reims Champagne-Ardenne, 1996
- [7] L. Régalia, C. Oudot, X. Thomas, P. Von der Heyden, D. Décatoire. FTS improvements and connection with a long White cell. Application : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O intensity measurements around 1200 cm<sup>-1</sup>. JQSRT, 2010, 111 : 826-842
- [8] J.U. White. Long Optical Paths of Large Aperture. Journal of the Optical Society of America, 1942, 32: 285-288
- [9] J.P. Lux et A. Jenouvrier. Construction d'une cellule à réflexions multiples de grandes dimensions (50 m). Annales scientifiques de l'Université de Reims et de l'arers, 1985, tome 20
- [10] A. Jenouvrier, L. Daumont, L. Régalia-Jarlot, V.I.G. Tyuterev, M. Carleer, A.C. Vandaele, S. Mikhailenko, S. Fally. Fourier transforms measurements of water vapor line parameters in the 4200-6600 cm<sup>-1</sup> region. JQSRT, 2007, 105 : 326-355
- [11] X. Thomas. Acquisition de données sur un interferometer de Michelson. Rodez 2002.
- [12] J.J. Plateaux, L. Régalia, C. Boussin and A. Barbe. Multispectrum fitting technique for data recorded by Fourier transform spectrometer : application to N<sub>2</sub>O and CH<sub>3</sub>D. JQSRT, 2001, 68 : 507-520
- [13] S.S. Penner. Quantitative molecular spectroscopy and gas emissivity. Addison-Wesley Pub. Co. 1959
- [14] M. Simeckova, D. Jacquemart, L.S. Rothman, R.R. Gamache, A. Goldman. Einstein A-coefficients and statistical weights for molecular absorption transitions in the HITRAN database. JQSRT, 2006, 98 : 130-155
- [15] L.S. Rothman, I.E. Gordon, A. Barbe, D. ChrisBenner, P.F. Bernath, M. Birk, V. Boudon, L.R. Brown, A. Campargue, J.-P. Champion, K. Chance, L.H. Coudert, V. Dana, V.M. Devi, S. Fally, J.-M. Flaud, R.R.

- Gamache, A. Goldman, D. Jacquemart, I. Kleiner, N. Lacome, W.J. Lafferty, J.-Y. Mandin, S.T. Massie, S.N. Mikhailenko, C.E. Miller, N. Moazzen-Ahmadi, O.V. Naumenko, A.V. Nikitin, J. Orphal, V.I. Perevalov, A. Perrin, A. Predoi-Cross, C.P. Rinsland, M. Rotger, M. Simeckova, M.A.H. Smith, K. Sung, S.A. Tashkun, J. Tennyson, R.A. Toth, A.C. Vandaele and J. Vander Auwera. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. *JQSRT* 2009, 110 : 572-533
- [16] L.S. Rothman, D. Jacquemart, A. Barbe, D. Chris Benner, M. Birk, L.R. Brown, M.R. Carleer, C. Chackerian Jr, K. Chance, L.H. Coudert, V. Dana, V.M. Devi, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, A. Goldman, J.-M. Hartmann, K.W. Jucks, A.G. Maki, J.-Y. Mandin, S.T. Massie, J. Orphal, A. Perrin, C.P. Rinsland, M.A.H. Smith, J. Tennyson, R.N. Tolchenov, R.A. Toth, J. Wander Auwera, P. Varanasi and G. Wagner. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database. *JQSRT* 2005, 92 (2) : 139-204
- [17] E.E. Whiting. An empirical approximation to the Voigt profile. *JQSRT*, 1968, 8 : 1379-1384
- [18] J.J. Olivero, R.L. Longbothum. Empirical fits to the Voigt line width : A Brief review. *JQSRT*, 1977, 17 : 233-236
- [19] J. Humilicek. Optimized computation of the voigt and complex probability functions. *JQSRT*, 1982, 27 : 437-444
- [20] R.H. Dicke. The effect of Collisions upon the Doppler Width of Spectral Lines. *Phys. Rev.*, 1953, 89 : 472-473
- [21] S.G. Rautian and I.I. Sobel'man. The effect of collisions on the Doppler broadening of spectral lines. *Sov. Pkys. Usp.*, 1967, 9 : 701-716
- [22] L. Galatry. Simultaneous Effect of Doppler and Foreign Gas Broadening on Spectral Lines. *Phys. Rev.*, 1961, 122 : 1218-1223
- [23] P.R. Berman. Speed-dependant collisional width and shift parameters in the spectral profiles. *JQSRT*, 1972, 12 : 1331-1342
- [24] H.M. Pickett. Effects of velocity averaging on the shapes of absorption lines. *J. Chem. Phys.*, 1980, 73 : 6090-6095
- [25] R. Ciury and A.S. Pine. Speed-dependant lines mixing profiles. *JQSRT*, 2000, 67 : 375-393
- [26] H. Tran, J.-M. Flaud, T. Gabard, F. Hase, T. Von Clarmann, C. Camy-Peyret, S. Payan, J.-M. Hartmann. Model, software and database for line-mixing effects in the  $\nu_3$  and  $\nu_4$  band of  $\text{CH}_4$  and tests using laboratory and planetary measurements – I :  $\text{N}_2$  (and air) broadenings and the earth atmosphere. *JQSRT*, 2006, 101 : 284-305
- [27] C.D. Boone, K.A. Walker, P.F. Bernath. Speed-dependant Voigt profile for water vapor in infrared remote sensing applications. *JQSRT*, 2007, 105 : 525-532
- [28] Table of Molecular Vibrational Frequencies Consolidated Vol1. National Bureau of standards. 1972.
- [29] J. Lamouroux. Calculs de moments de transitions de bandes rovibrationnelles et des intensités de raies spectrales à partir de surfaces dipolaires par transformation de contact : Application aux molécules de groupe de symétrie  $C_{2v}$  et  $C_s$ . Thèse, université de Reims Champagne-Ardenne, 2007.
- [30] E. Biémont. Spectroscopie Moléculaire, structures moléculaires et analyse spectrale. De Boeck, 2006.

- [31] F. Maugière. Etude de la dynamique vibrationnelle de molécules triatomiques par les orbites périodiques et leurs bifurcations à partir de modèles effectifs et *ab initio* : états excités et effets de substitutions isotopiques. Thèse, Université de Reims Champagne – Ardenne, 2009.
- [32] <http://cfa-www.harvard.edu/HITRAN/>
- [33] <http://ether.ipsl.jussieu.fr/>
- [34] A.D. Bykov, O.V. Naumenko, A.M. Pshenichnikov, L.N. Sinitza and A.P. Shcherbabov. An expert system for identification of lines in vibrational-Rotational spectra. *Opt. Spectrosc.*, 2003, 94 : 528-537
- [35] L.L. Levin. Introduction into pattern recognition theory. Université de Tomsk, 1982
- [36] M.E. Eljashberg, L.A. Gribov, V.V. Serov. Molecular spectral analysis and Computer. Nauka, Moscou, 1980
- [37] M.A. Aizerman, E.I. Braverman and L.I. Posonoer. Potential functions method in the computer training problems. Nauka, Moscou, 1970
- [38] H. Partridge and D.W. Schwenke. The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive *ab initio* calculations and experimental data. *J. Chem. Phys.*, 1997, 106 : 4618-4640
- [39] D.W. Schwenke and H. Partridge. Convergence testing of the analytic representation of an *ab initio* dipole moment function for water: Improved fitting yields improved intensities. *J. Chem. Phys.*, 2000, 113 : 6592-6598
- [40] D. Jacquemart. Développement d'une procédure d'ajustement simultané de plusieurs spectres obtenus par Transformation de Fourier. Détermination des paramètres de raies de l'acétylène dans les régions à 5  $\mu\text{m}$  et à 13.6  $\mu\text{m}$ . Thèse, Université Paris VI, 2002.
- [41] D. Benner, C.P. Rinsland, V. Malathy Devi, M.A.H. Smith and D. Atkins. A multispectrum nonlinear least squares fitting technique. *JQSRT*, 1995, 53 : 705-721
- [42] X. Thomas, P. Von der Heyden, M.R. de Backer-Barilly, M.T. Bourgeois and A. Barbe. Infrared absolute intensities of ozone in the 10 and 5  $\mu\text{m}$  spectral range. *JQSRT*, 2010, 111 : 1080-1088
- [43] J. Lamouroux, L. Régalia-Jarlot, VI.G. Tyuterev, X. Thomas, P. Von der Heyden, S.A. Tashkun and Yu. Borkov. Measurements of lines intensities and determination of transition moment parameters from experimental data for the  $\nu_1$  and  $\nu_3$  bands of  $\text{D}_2^{32}\text{S}$ . *J. Mol. Spectrosc.*, 2008, 250 : 117-125
- [44] L. Régalia-Jarlot, X. Thomas, P. Von der Heyden and A. Barbe. Pressure-broadened line widths and pressure-induced line shifts coefficients of the (1-0) and (2-0) band of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ . *JQSRT*, 2005, 91 : 121-131
- [45] J-Y. Mandin, V. Dana, L. Régalia, A. Barbe and X. Thomas.  $\Lambda$ -Slippings and line intensities in the first overtone of nitric oxide. *J. Mol. Spectrosc.*, 1997, 185 : 347-355
- [46] J-Y. Mandin, V. Dana and C. Claveau. Line intensities of the  $\nu_5$  band of acetylene  $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$ . *JQSRT*, 67 : 429-446
- [47] C. Clerbaux, A. Boynard, L. Clarisse, M. Georges, J. Hadji-Lazaro, H. Herbin, D. Hurtmans, M. Pommier, A. Razavi, S. Turquety, C. Wespes and P-F. Coheur. Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared IASI/MetOp sounder. *Atmos. Chem. Phys.*, 2009, 9 : 6041-6054

- [48] L. Clarisse, P-R. Coheur, A.J. Prata, D. Hurtmans, A. Razavi, T. Phulpin, J. Hadji-Lazaro and C. Clerbaux. Tracking and quantifying volcanic SO<sub>2</sub> with IASI, the September 2007 eruption at Jebel at Tair. *Atmos. Chem. Phys.*, 2008, 8 : 7723-7734
- [49] S. Turquety, D. Hurtmans, J. Hadji-Lazaro, P-F. Coheur, C. Clerbaux, D. Josset and C. Tsamalis. Tracking the emission and transport of pollution from wildfires using the IASI CO retrievals : analysis of the summer 2007 Greek fires. *Atmos. Chem. Phys.*, 2009, 9 : 4897-4913
- [50] N. Jacquinet-Husson, N.A. Scott, A. Chédin, K. Garceran, R. Armante, A.A. Chursin, A. Barbe, M. Birk, L.R. Brown, C. Camy-Peyret, C. Claveau, C. Clerbaux, P.F. Coheur, V. Dana, L. Daumont, M.R. Debacker-Barilly, J.-M. Flaud, A. Goldman, A. Hamdouni, M. Hess, D. Jacquemart, P. Köpke, J.-Y. Mandin, S. Massie, S.N. Mikhailenko, V. Nemtchinov, A. Nikitin, D. Newnham, A. Perrin, V.I. Perevalov, L. Régalia-Jarlot, A. Rublev, F. Schreier, L. Schult, K.M. Smith, S.A. Tashkun, J.-L. Teffo, R.A. Toth, V.I.G. Tyuterev, J. Vander Auwera, P. Varanasi and G. Wagner. The 2003 Edition of the GEISA/IASI spectroscopic database. *JQSRT*, 2005, 95 : 429-467
- [51] B.C. Stewart, (Ed.). Support study on Water Vapor Spectroscopy for IASI. Final Report, EUMETSAT Contract EUM/CO/01/939/DK. 2003, 159pp.
- [52] R.A. Toth. Linelist available at <http://mark4sun.jpl.nasa.gov> <http://mark4sun.jpl.nasa.gov/>
- [53] R.A. Toth. Water vapor measurements between 590 and 2582 cm<sup>-1</sup>: Line positions and strengths. *J. Mol. Spectrosc.*, 1998, 190 : 379-396
- [54] R.A. Toth. Analysis of line positions and strengths of H<sub>2</sub><sup>16</sup>O ground and hot bands connecting to interacting upper states: (020), (100), and (001). *J Mol Spectrosc.*, 1999, 194 : 28-42.
- [55] R.A. Toth. HDO and D<sub>2</sub>O low pressure, long path spectra in the 600-3100 cm<sup>-1</sup> region I. HDO line positions and strengths. *J. Mol. Spectrosc.*, 1999, 195 : 73-97
- [56] R.A. Toth. Air- and N<sub>2</sub>-Broadening parameters of water vapor: 604 to 2271 cm<sup>-1</sup>. *J. Mol. Spectrosc.*, 2000, 201 : 218-243
- [57] R.A Toth, L.R Brown, C Plymate. Self-broadened widths and frequency shifts of water vapor lines between 590 and 2400 cm<sup>-1</sup>. *JQSRT*, 1998, 59 : 529-562
- [58] L.H Coudert, G. Wagner, M. Birk, U.I. Baranov, M.J. Lafferty and J-M. Flaud. The H<sub>2</sub><sup>16</sup>O molecule: line position and line intensity analyses up to the second triad. *J. Mol. Spect.* 2008, 251 (1-2) : 357-339
- [59] N. Jacquinet-Husson, L. Crepeau, R. Armante, C. Boutammine, A. Chédin, N.A. Scott, C. Crevoisier, V. Capelle, C. Boone, N. Poulet-Crovisier, A. Barbe, A. Campargue, D. Chris Benner, Y. Benilan, B. Bézard, V. Boudon, L.R. Brown, L.H. Coudert, A. Coustenis, V. Dana, V.M. Devi, S. Fally, A. Fayt, J.-M Flaud, A. Goldman, M. Herman, G.J. Harris, D. Jacquemart, A. Jolly, I. Kleiner, A. Kleinböhl, F. Kwabia-Tchana, N. Lavrentieva, N. Lacome, Li-Hong Xu, O.M. Lyulin, J.-Y. Mandin, A. Maki, S. Mikhailenko, C.E. Miller, T. Mishina, N. Moazzen-Ahmadi, H.S.P. Müller, A. Nikitin, J. Orphal, V. Perevalov, A. Perrin, D.T. Petkie, A. Predoi-Cross, C.P. Rinsland, J.J. Remedios, M. Rotger, M.A.H Smith, K. Sung, S. Tashkun, J. Tennyson, R.A. Toth, A.-C. Vandaele, J. Vander Auwera. The 2009 edition of the GEISA spectroscopic database. *JQSRT*, 2011, 112: 2395-2445
- [60] L.H. Coudert. Line frequency and line intensity analyses of water vapour. *Mol Phys*, 1999, 96 : 941-954

- [61] J-M. Flaud, C. Piccolo, B. Carli, A. Perrin, L.H. Coudert, J.L. Teffo, L.R. Brown. Molecular line parameters for the MIPAS (Michelson Interferometer for Passive Atmosphérique Souding) experiment. *Atmos Oceanic Opt*, 2003, 16 : 172-181
- [62] R. Lanquetin, L.H. Coudert, C. Camy Peyret. High-lying rotational levels of water: an analysis on the energy levels on the five first vibrational states. *J. Mol. Spectr.*, 2001, 206 : 83-103
- [63] J-M. Flaud and L. Régalia. Choix de la base de données pour GEISA-IASI: Etude des intensités des raies de la vapeur d'eau. CNES repport (2005)
- [64] P. De Bievre, N.E. Holden, and I.L. Barnes, "Isotopic Abundances and Atomic Weights of the Elements," *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1984, 13 : 809-891
- [65] R.A. Toth, K. Sung and L.R. Brown.  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  line strengths revisited :  $\nu_2$  and  $2\nu_2-\nu_2$  at 6  $\mu\text{m}$ . *JMS*, 2001, 265 : 59-68
- [66] R.J. Barber, J. Tennyson, G.J. Harris, and R.N. Tolchenov. A high-accuracy computed water line list. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 2006, 368 : 1087-1094
- [67] J. Tennyson, P.F. Bernath, L.R. Brown, A. Campargue, M.R. Carleer, A.G. Csaszar, R.R. Gamache, J.T. Hodges, A. Jenouvrier, O.V. Naumenko, O.L. Polyansky, L.S. Rothman, R.A. Toth, A.C. Vandaele, N.F. Zobov, L. Daumont, A.Z. Fazliev, T. Furtenbacher, I.E. Gordon, S.N. Mikhailenko, S.V. Shirin. IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor. Part I-Energy levels and transition wavenumbers for  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . *JQSRT*, 2009, 110 : 573-596
- [68] J.G. Williamson, K. Narahari Rao, L.H. Jones. High-resolution infrared spectra of water vapor  $\nu_2$  band of  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . *J. Mol. Spectrosc.*, 1971, 40 : 372-387
- [69] J.W.C. Johns, A.R.W. McKellar. Stark spectroscopy with the CO laser : Lamb dip spectra of  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  in the  $\nu_2$  fundamental band. *Can. J. Phys.*, 1978, 56, 737-743
- [70] G. Guelachvili. Experimental Doppler-limited spectra of the  $\nu_2$  bands of  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , and HDO by Fourier-transform spectroscopy : secondary wave-number standards between 1066 and 2296  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Opt. Soc. Am.*, 1983, 56 : 137-150
- [71] R.A. Toth. Transition frequencies and absolute strengths of  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  in the 6.2  $\mu\text{m}$  region. *J. Opt. Soc. Am. B*. 1992, 9 : 462-482
- [72] R.A. Toth.  $2\nu_2-\nu_2$  and  $\nu_2$  bands of  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ , and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  : line positions and strengths. *J. Opt. Soc. Am. B.*, 1993, 10 : 1526-1544
- [73] An-Wen Liu, Jun-He Du, Ke-Feng Song, Le Wang, Lei Wan, Shui-Ming Hu, J. Mol. High-resolution Fourier-transform spectroscopy of  $^{18}\text{O}$ -enriched water molecule in the 1080–7800  $\text{cm}^{-1}$  region. *J. Mol. Spectrosc.*, 2006, 237 : 149-162
- [74] A.-W. Liu, K.-F. Song, H.-Y. Ni, S.-M. Hu, O.V. Naumenko, I.A. Vasilenko, S.N. Mikhailenko. (000) and (010) energy level of the  $\text{HD}^{18}\text{O}$  and  $\text{D}_2^{18}\text{O}$  molecules from analysis of their  $\nu_2$  bands. *J. Mol. Spectrosc.*, 2011, 265 : 26-38
- [75] S.N. Mikhailenko, S.A. tashkun, T.A. Putilova, E.N. starikova, L. Daumont, A. Jenouvrier, S. Fally, M. Carleer, C. Hermans, A.C. Vandaele. Critical evaluation of rotation-vibration transitions and an experimental dataset of energy levels of  $\text{HD}^{18}\text{O}$ . *JQSRT*, 2009, 110 : 597-608

- [76] J. Tennyson, P.F. Bernath, L.R. Brown, A. Campargue, A.G. Császár, L. Daumont, R.R. Gamache, J.T. Hodges, O.V. Naumenko, O.L. Polyansky, L.S. Rothman, R.A. Toth, A.C. Vandaele, N.F. Zobov, S. Fally, A.Z. Fazliev, T. Furtenbacher, I.E. Gordon, S-M. Hu, S.N. Mikhailenko and B.A. Voronin. IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor. Part II. Energy levels and transition wavenumbers for HD<sup>16</sup>O, HD<sup>17</sup>O, and HD<sup>18</sup>O. JQSRT, 2010, 111 : 2160-2184
- [77] R.A. Toth. HD<sup>16</sup>O, HD<sup>18</sup>O, and HD<sup>17</sup>O transition frequencies and strengths in the  $\nu_2$  bands. J. Mol. Spectrosc., 1993, 162 : 20-40
- [78] M. Carleer, A. Jenouvrier, A.-C. Vandaele, M.-F. Mérienne, R. Colin, N. F. Zobov, O.L. Polyansky, J. Tennyson and V. A. Savin. The near infrared, visible and near ultraviolet overtone spectrum of water. J. Chem. Phys., 1999, 111 : 2444-2451
- [79] M.-F. Mérienne, A. Jenouvrier, C. Hermans, A.-C. Vandaele, M. Carleer, C. Clerbaux, P.-F. Coheur, R. Colin, S. Fally, M. Bachc. Water vapor line parameters in the 13 000-9250 cm<sup>-1</sup> region. JQSRT, 2003, 82 : 99-117
- [80] L.S. Rothman, R.R. Gamache, R.H. Tipping, C.P. Rinsland, M.A.H. Smith, D.C. Benner, V. Malathy Devi, J-M. Flaud, C. Camy-Peyret, A. Perrin, A. Goldman, S.T. Massie, L.R. Brown and R.A. Toth. The HITRAN molecular database : Editions of 1991 and 1992. JQSRT, 1992, 48 : 469-507
- [81] J-Y. Mandin, J.-P. Chevillard, J.-M. Flaud, C. Camy-Peyret. H<sub>2</sub><sup>16</sup>O : Line positions and intensities between 8000 and 9400 cm<sup>-1</sup> : the second hexad of interacting vibrational states : {(050), (130), (031), (210), (111), (012)}. Can. J. Phys, 1988, 66 : 997-1011.
- [82] J.-P. Chevillard, J.-Y. Mandin, J.-M. Flaud, C. Camy-Peyret. H<sub>2</sub><sup>16</sup>O : line positions and intensities between 9400 and 11500cm<sup>-1</sup>. The interacting vibrational states (041), (220), (121), (022), (300), (201), (102), and (003). Can. J. Phys, 1989, 67 : 1065-1084
- [83] L.S. Rothman, C.P. Rinsland, A. Goldman, S. Massie, D.P. Edwards, J-M. Flaud, A. Perrin, C. Camy-Peyret, V. Dana, J-Y. Mandin, J. Schroeder, A. McCann, R.R. Gamache, R.B. Wattson, K. Yoshino, K.V. Chance, K.W. Jucks, L.R. Brown, V. Nemtchinov and P. Varanasi. The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (Hitran Atmospheric WorkStation) : 1996 edition. JQSRT, 1998, 60 : 665-710
- [84] R.A. Toth. Extensive measurements of H<sub>2</sub><sup>16</sup>O line frequencies and strengths : 5750 to 7965 cm<sup>-1</sup>. Applied Optics, 1994, 33 : 4851-4867
- [85] L.S. Rothman, A. Barbe, D. Chris Benner, C. Camy-Peyret, M.R. Carleer, K. Chance, V. Dana, V.M. Devi, A. Fayt, J-M. Flaud, R.R. Gamache, A. Goldman, D. Jacquemart, K.W. Jucks, W.J. Lafferty, J-Y. Mandin, S.T. Massie, V. Nemtchinov, D.A. Newnham, A. Perrin, C.P. Rinsland, J. Schroeder, K.M. Smith, M.A.H. Smith, K. Tang, R.A. Toth, J. Vander Auwera, P. Varanasi and K. Yoshino. The HITRAN molecular spectroscopic database : edition of 2000 including updates through 2001. JQSRT, 2003, 82 : 5-44
- [86] L.P. Giver, C. Chackerian Jr and P. Varanasi. Visible and near-infrared H<sub>2</sub><sup>16</sup>O line intensity corrections for HITRAN-96. JQSRT, 2000, 66 : 101-105
- [87] L.R. Brown, R.A. Toth and M. Dulick. Empirical Line Parameters of H<sub>2</sub><sup>16</sup>O near 0.94  $\mu\text{m}$  : Positions, Intensities and Air-Broadening Coefficients. J. Mol. Spectrosc., 2002, 212 : 57-82

- [88] R. Tolchenov and J. Tennyson. Water line parameters from refitted spectra constrained by empirical upper state level of the 9400 – 14500  $\text{cm}^{-1}$ . *JQSRT*, 2007, 109 : 169-178
- [89] N. Jacquinet-Husson, E. Arié, J. Ballard, A. Barbe, G. BJORAKER, B. Bonnet, L.R. Brown, C. Camy-Peyret, J.P. Champion, A. Chédin, A. Chursin, C. Clerbaux, G. Duxbury, J-M. Flaud, N. Fourrié, A. Fayt, G. Graner, R. Gamache, A. Goldman, V.I. Golovko, G. Guelachvili, J.M. Hartmann, J.C. Hilico, J. Hillman, G. Lefèvre, E. Lellouch, S.N. Mikhailenko, O.V. Naumenko, V. Nemtchinov, D.A. Newnham, A. Nikitin, J. Orphal, A. Perrin, D.C. Reuter, C.P. Rinsland, L. Rosenmann, L.S. Rothman, N.A. Scott, J. Selby, L.N. Sinita, J.M. Sirota, A.M. Smith, K.M. Smith, V.I.G. Tyuterev, R.H. Tipping, S. Urban, P. Varanasi and M. Weber. The 1997 spectroscopic GEISA databank. *JQSRT*, 1999, 62 : 205-254
- [90] R.A. Toth. Measurements of  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  line positions and strengths: 11610 to 12861  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Mol. Spectrosc.*, 1994, 166 : 176-183
- [91] J-Y. Mandin, J-P. Chevillard, C. Camy-Peyret and J-M. Flaud. The high-resolution spectrum of water vapor between 13200 and 16500  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Mol. Spectrosc.*, 1986, 116 : 167-190
- [92] C. Camy-Peyret, J-M. Flaud, J-Y. Mandin, J-P. Chevillard, J. Brault, D.A. Ramsay and M. Vervloet. The high resolution spectrum of water vapor between 16500 and 25250  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Mol. Spectrosc.*, 1985, 113 : 208-228
- [93] L.P. Giver, C. Chackerian Jr, D.W. Schwenke, R.S. Freedman, M.D. DiRosa, P. Varanasi and R.L. Sams. Water vapor Line Intensity Corrections and Rovibrational Assignment Updates of the Shortwave HITRAN and GEISA Databases. Tenth ARM Team Meeting Proceedings, 2000.
- [94] D. Belmiloud, R. Schermaul, K.M. Smith, N.F. Zobov, J.W. Brault, R.C.M. Learner, D.A. Newnham and J. Tennyson. New Studies of the Visible and Near-Infrared Absorption by Water Vapour and Some Problems with the HITRAN Database. *Geophysical Research letters*, 2000, 27 : 3703-3706
- [95] K.M. Smith, I. Ptashnik, D.A. Newnham and K.P. Shine. Absorption by water vapor in the 1 to 2  $\mu\text{m}$  region. *JQSRT*, 2004, 83 : 735-749
- [96] S.E.B. Casanova, K.P. Shine, T. Gardiner, M. Coleman and H. Pegrum. Assessment of the consistency of near-infrared water vapor line intensities using high spectral resolution ground-based Fourier-transform measurements of solar radiation. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 2006, 111 : D11302, doi:10.1029/2005JD006583
- [97] J. Bailey. A comparison of water vapor line parameters for modeling the Venus deep Atmosphere. *Icarus*, 2009, 201 : 444-453
- [98] R.N. Tolchenov and J. Tennyson. Water line parameters for the weak lines in the range 7400 – 9600  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Mol. Spectrosc.*, 2005, 231: 23-27
- [99] A.W. Liu, S.M. Hu, C. Camy-Peyret, J-Y. Mandin, O. Naumenko, B. Voronin. Fourier transform absorption spectra of  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  in the 8000 – 9400  $\text{cm}^{-1}$  spectral region. *J. Mol. Spectrosc.*, 2006, 237 : 53-62
- [100] S.N. Mikhailenko, Le Wang, S. Kassir and A. Campargue. Weak water absorption lines around 1.455 and 1.66  $\mu\text{m}$  by CW-CRDS. *J. Mol. Spectrosc.*, 2007, 244 : 170-178
- [101] S. Mikhailenko, S. Kassi, Le Wang, A. Campargue. The absorption spectrum of water in the 1.25  $\mu\text{m}$  transparency window (7408 – 7920  $\text{cm}^{-1}$ ). *J. Mol. Spectrosc.*, 2011, 269 : 92-103

- [102] L. Daumont, J. Vander Auwera, J.-L. Teffo, V.I. Perevalov and S.A. Tashkun. Line intensity measurements in  $^{14}\text{N}_2^{16}\text{O}$  and their treatment using the effective dipole moment approach.II. The 5400-11 000  $\text{cm}^{-1}$  region. *JQSRT*, 2007, 104 : 342-356
- [103] L. Daumont. Private communication (2010)
- [104] R. Schermaul, R.C.M. Learner, A.A.D. Canas, J.W Brault, O.L. Polyansky, D. Belmiloud, N.F. Zobov, J. Tennyson. Weak line water vapor spectra in the region 13 200 – 15 000  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Mol. Spectrosc.*, 2002, 211 : 169-178
- [105] J-Y. Mandin, J.P. Chevillard, C. Camy-Pereyt, J-M. Flaud, J.W. Brault. The high-resolution of water vapor between 13 200 and 16 500  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 116 : 167-190
- [106] L.S. Rothman, R.R. Gamache, A. Goldman, L.R. Brown, R.A. Toth, H.M. Pickett, R.L. Poynter, J-M. Flaud, C. Camy-Peyret, A. Barbe, N. Husson, C.P. Rinsland and M.A.H. Smith. The HITRAN database : 1986 edition. *Applied Optics*, 1987, 26 : 4058-4097
- [107] G. Hettner. Infra-red absorption spectrum of water vapor. *Ann. Phys.*, 1918,55 : 476-496
- [108] W. M. Elsasser. Mean absorption and Equivalent absorption coefficient of a Band Spectrum. *Phys. Rev.*, 1938, 54 : 126-129
- [109] S.A. Clough, M.W. Shephard, E.J. Mlawer, J.S. Delamere, M.J. Iacono, K. Cady-Pereira, S. Boukabara and P.D. Brown. Atmospheric radiative transfer modeling: a summary of the AER codes. *JQSRT*, 2005, 91 : 233-244
- [110] D.J. Paynter, I.V. Ptashnik, K.P. Shine, K.M. Smith, R. McPheat, R.G. Williams. Laboratory measurements of the water vapor continuum in the 1200-8000  $\text{cm}^{-1}$  region between 293 K and 351 K. *J. Geophys. Res.*, 2009, 114 : D21301 doi:10.1029/2008JD011355
- [111] I.V. Ptashnik, K.P. Shine, A.A. Vigasin. Water vapor self continuum and water dimers : 1. Analysis of recent work. *JQSRT*, 2011, 112 : 1286-1303
- [112] Yui Baranov, W.J. Lafferty. The water vapor continuum and selective absorption in the 3 to 5  $\mu\text{m}$  spectral region at temperature from 311 K to 363 K. *JQSRT*, 2011, 112 : 1304-1313
- [113] I.V. Ptashnik. Evaluation of suitable spectral intervals for near-IR laboratory detection of water vapour continuum absorption. *JQSRT*, 2007, 108 : 146-160
- [114] L. Tallis, M. Coleman, T. Gardiner, I.V. Ptashnik and K.P. Shine. Assessment of the consistency of  $\text{H}_2\text{O}$  line intensities over the near-infrared using sun-pointing ground base Fourier transform spectroscopy. *JQSRT*, 2011, 112 : 2268-2280
- [115] A.J.L. Shillings, S.M. Ball, M.J. Barber, J. Tennyson and R.L. Jones. A upper limit for water dimer absorption in the 750 nm spectral region and a revised water line list. *Atmos. Chem. Phys.*, 2010, 10 : 23345-23380
- [116] C. Oudot, Le Wang, X. Thomas, P. Von der Heyden, L. Daumont and L. Régalia. Intensity measurements of  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  lines in the spectral region 8000-9350  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Mol. Spectrosc.*, 2010, 262 : 22-29
- [117] S. Mikhailenko, K.A.K. Albert, G. Nellau, S. Klee, P.B. Winnewisser, M. Winnewisser and V.G. Tyuterev. Water vapor absorption line intensities in the 1900-6600  $\text{cm}^{-1}$  region. *JQSRT*, 2008, 109 : 2687-2696

- [118] D. Robert, J. Bonamy. Short range force effects in semi-classical molecular line broadening calculations. J. Phys., 1979, 40 : 9412-9421
- [119] R.R. Gamache, unpublished data, average values of experimental data as a function of  $J''$  (2000)
- [120] L.R. Brown, Unassigned lines using default value 0.444 cm<sup>-1</sup>/atm // JPL, private communication for HITRAN database (2000)
- [121] R.R. Gamache. Communication privée (2011)



# *Annexes*

- |  |          |
|--|----------|
| 1. H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O – 1200 – 1400 cm <sup>-1</sup>                                     | page 229 |
| 2. H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O – 8000 – 9400 cm <sup>-1</sup> : Intensités                        | page 239 |
| 3. H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O – 8000 – 9400 cm <sup>-1</sup> : Coefficients d'auto-élargissement | page 273 |



# **1 H<sub>2</sub><sup>16</sup>O - 1200 - 1400 cm<sup>-1</sup>**

Matériel supplémentaire à l'article :

---

FTS improvements and connection with a long White cell. Application : H<sub>2</sub><sup>16</sup>O intensity measurements around 1200 cm<sup>-1</sup>.

L. Régalia, C. Oudot, X. Thomas, P. Von der Heyden, D. Décatoire.

JQSRT, 2010, 111 : 826-842

---

Liste des transitions d'H<sub>2</sub><sup>16</sup>O mesurées dans la gamme spectrale de 1200 à 1400 cm<sup>-1</sup> et comparaison aux données de la littérature :

- Positions (cm<sup>-1</sup>) reprises d'HITRAN2004 [16]
- Attribution des transitions (HITRAN2004 [16])
- S(...) : intensité des transitions données à 296 K en cm/molec

- $A = \frac{S(Obs) - S(HITRAN2004)}{S(Obs)} (\%)$

- $B = \frac{S(Obs) - S(LISA)}{S(Obs)} (\%)$

- $C = \frac{S(Obs) - S(Toth)}{S(Obs)} (\%)$

- $D = \frac{S(Obs) - S(Coudert)}{S(Obs)} (\%)$

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [16] | Upper state |   |   |    |    |   | Lower state |   |   |    |    |    | S(HITRAN2004)<br>[16] | S(Obs)<br>[7]   | S(LISA)<br>[60][61][62] | S(Toth)<br>[52] | S(Coudert)<br>[58] | A     | B      | C      | D     |
|--------------------------------------|-------------|---|---|----|----|---|-------------|---|---|----|----|----|-----------------------|-----------------|-------------------------|-----------------|--------------------|-------|--------|--------|-------|
| 1200.81178                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 5  | 8 | 0           | 0 | 0 | 14 | 6  | 9  | 4.84E-25              | <b>4.72E-25</b> | 4.88E-25                | 4.88E-25        | 4.89E-25           | -2.67 | -3.44  | -3.50  | -3.61 |
| 1201.46258                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 7  | 6 | 0           | 0 | 0 | 13 | 8  | 5  | 7.26E-25              | <b>7.19E-25</b> | 7.04E-25                | 7.46E-25        | 7.52E-25           | -1.04 | 2.11   | -3.80  | -4.58 |
| 1201.69290                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 7  | 5 | 0           | 0 | 0 | 13 | 8  | 6  | 2.42E-25              | <b>2.43E-25</b> | 2.35E-25                | 2.50E-25        | 2.45E-25           | 0.21  | 3.30   | -3.05  | -0.91 |
| 1205.02737                           | 0           | 2 | 0 | 3  | 1  | 2 | 0           | 1 | 0 | 4  | 4  | 1  | 5.24E-26              | <b>5.59E-26</b> | 5.31E-26                | 4.88E-26        |                    | 6.19  | 4.99   | 12.64  |       |
| 1207.27424                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 0  | 5 | 0           | 1 | 0 | 6  | 3  | 4  | 1.40E-24              | <b>1.42E-24</b> | 1.36E-24                | 1.44E-24        | 1.43E-24           | 1.90  | 4.50   | -1.19  | -0.49 |
| 1209.26634                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 1  | 6 | 0           | 1 | 0 | 7  | 2  | 5  | 1.74E-24              | <b>1.66E-24</b> | 1.67E-24                | 1.77E-24        | 1.74E-24           | -4.76 | -0.60  | -6.63  | -4.76 |
| 1209.76296                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 8  | 5 | 0           | 0 | 0 | 13 | 9  | 4  | 2.97E-25              | <b>2.89E-25</b> | 2.81E-25                | 3.00E-25        |                    | -2.63 | 2.80   | -3.70  |       |
| 1210.18528                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 3  | 7 | 0           | 0 | 0 | 9  | 6  | 4  | 3.20E-25              | <b>3.04E-25</b> | 3.04E-25                | 3.19E-25        |                    | -5.36 | 0.07   | -4.93  |       |
| 1211.15398                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 5  | 7 | 0           | 0 | 0 | 13 | 6  | 8  | 8.84E-25              | <b>8.67E-25</b> | 8.79E-25                | 9.08E-25        |                    | -1.93 | -1.38  | -4.75  |       |
| 1211.25564                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 1  | 4 | 0           | 0 | 0 | 5  | 4  | 1  | 7.71E-23              | <b>8.10E-23</b> | 7.59E-23                | 7.79E-23        |                    | 4.84  | 6.25   | 3.79   |       |
| 1212.24672                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 2  | 7 | 0           | 0 | 0 | 9  | 3  | 6  | 4.40E-22              | <b>4.42E-22</b> | 4.10E-22                | 4.44E-22        |                    | 0.56  | 7.35   | -0.41  |       |
| 1213.00716                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 5  | 7 | 0           | 0 | 0 | 12 | 6  | 6  | 4.16E-24              | <b>4.20E-24</b> | 4.10E-24                | 4.28E-24        |                    | 1.16  | 2.54   | -1.82  |       |
| 1213.09657                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 4  | 6 | 0           | 1 | 0 | 10 | 5  | 5  | 7.30E-26              | <b>6.84E-26</b> | 6.65E-26                | 4.56E-26        |                    | -6.75 | 2.85   | 33.33  |       |
| 1213.96476                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 4  | 7 | 0           | 0 | 0 | 11 | 7  | 4  | 6.13E-26              | <b>5.73E-26</b> | 5.00E-26                | 6.78E-26        |                    | -6.96 | 12.72  | -18.30 |       |
| 1214.95827                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 1  | 8 | 0           | 0 | 0 | 8  | 4  | 5  | 7.75E-24              | <b>7.70E-24</b> | 7.91E-24                | 7.66E-24        | 7.72E-24           | -0.56 | -2.70  | 0.56   | -0.26 |
| 1215.61282                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 2  | 8 | 0           | 0 | 0 | 9  | 5  | 5  | 1.05E-24              | <b>1.04E-24</b> | 1.05E-24                | 1.04E-24        |                    | -1.06 | -1.06  | 0.19   |       |
| 1217.00552                           | 0           | 0 | 0 | 14 | 8  | 6 | 0           | 0 | 0 | 13 | 3  | 11 | 2.79E-26              | <b>2.91E-26</b> | 3.18E-26                | 3.28E-26        |                    | 4.26  | -9.03  | -12.64 |       |
| 1218.51981                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 1  | 5 | 0           | 0 | 0 | 7  | 4  | 4  | 1.71E-22              | <b>1.71E-22</b> | 1.69E-22                | 1.73E-22        |                    | -0.06 | 1.17   | -1.17  |       |
| 1218.58114                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 3  | 6 | 0           | 0 | 0 | 8  | 6  | 3  | 1.44E-24              | <b>1.52E-24</b> | 1.39E-24                | 1.41E-24        |                    | 5.51  | 8.66   | 7.48   |       |
| 1218.63730                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 5  | 5 | 0           | 1 | 0 | 10 | 6  | 4  | 4.24E-26              | <b>4.47E-26</b> | 3.87E-26                | 3.65E-26        |                    | 5.17  | 13.35  | 18.36  |       |
| 1219.14720                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 6  | 6 | 0           | 0 | 0 | 12 | 7  | 5  | 2.43E-24              | <b>2.36E-24</b> | 2.36E-24                | 2.48E-24        | 2.56E-24           | -3.01 | 0.13   | -5.17  | -8.35 |
| 1219.95699                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 5  | 4 | 0           | 1 | 0 | 10 | 6  | 5  | 1.27E-25              | <b>1.33E-25</b> | 1.17E-25                | 1.34E-25        |                    | 4.65  | 12.30  | -0.53  |       |
| 1220.34459                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 6  | 5 | 0           | 0 | 0 | 12 | 7  | 6  | 7.30E-24              | <b>7.23E-24</b> | 7.08E-24                | 7.42E-24        | 7.32E-24           | -0.95 | 2.10   | -2.58  | -1.16 |
| 1220.44592                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 9  | 4 | 0           | 0 | 0 | 13 | 10 | 3  | 1.09E-25              | <b>1.09E-25</b> | 1.33E-25                | 1.02E-25        |                    | -0.09 | -22.33 | 6.25   |       |
| 1222.83187                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 9  | 4 | 0           | 0 | 0 | 12 | 4  | 9  | 4.48E-26              | <b>4.35E-26</b> | 4.68E-26                | 3.91E-26        |                    | -2.94 | -7.47  | 10.11  |       |
| 1223.37810                           | 0           | 0 | 0 | 7  | 2  | 6 | 0           | 0 | 0 | 8  | 3  | 5  | 5.73E-25              | <b>5.67E-25</b> | 5.32E-25                | 5.57E-25        | 5.78E-25           | -0.99 | 6.17   | 1.82   | -1.80 |
| 1223.76466                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 3  | 5 | 0           | 1 | 0 | 7  | 6  | 2  | 4.88E-25              | <b>4.87E-25</b> | 4.74E-25                | 5.04E-25        |                    | -0.27 | 2.73   | -3.53  |       |
| 1224.14030                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 7  | 7 | 0           | 0 | 0 | 13 | 2  | 12 | 4.76E-26              | <b>5.23E-26</b> | 5.53E-26                | 5.45E-26        |                    | 9.02  | -5.70  | -4.17  |       |
| 1224.82288                           | 0           | 0 | 0 | 11 | 7  | 5 | 0           | 0 | 0 | 12 | 8  | 4  | 1.14E-24              | <b>1.11E-24</b> | 1.08E-24                | 1.11E-24        |                    | -2.18 | 2.76   | 0.33   |       |
| 1224.89114                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 7  | 4 | 0           | 0 | 0 | 12 | 8  | 5  | 3.41E-24              | <b>3.22E-24</b> | 3.25E-24                | 3.49E-24        |                    | -5.80 | -0.87  | -8.32  |       |
| 1224.97772                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 3  | 7 | 0           | 0 | 0 | 10 | 4  | 6  | 7.26E-23              | <b>7.27E-23</b> | 7.22E-23                | 7.34E-23        |                    | 0.08  | 0.66   | -1.00  |       |
| 1225.08626                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 0  | 6 | 0           | 0 | 0 | 7  | 3  | 5  | 3.36E-22              | <b>3.35E-22</b> | 3.38E-22                | 3.41E-22        |                    | -0.35 | -0.92  | -1.84  |       |
| 1225.55127                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 4  | 7 | 0           | 0 | 0 | 11 | 5  | 6  | 6.82E-23              | <b>6.86E-23</b> | 6.73E-23                | 6.94E-23        |                    | 0.62  | 1.98   | -1.16  |       |
| 1225.82006                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 3  | 6 | 0           | 0 | 0 | 9  | 4  | 5  | 8.59E-25              | <b>8.51E-25</b> | 7.85E-25                | 8.51E-25        |                    | -0.99 | 7.74   | -0.01  |       |
| 1226.10364                           | 0           | 2 | 0 | 11 | 5  | 6 | 0           | 1 | 0 | 12 | 6  | 7  | 1.30E-23              | <b>1.25E-23</b> | 1.27E-23                | 1.32E-23        |                    | -3.27 | -1.52  | -5.26  |       |
| 1226.65427                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 3  | 4 | 0           | 0 | 0 | 6  | 6  | 1  | 7.79E-25              | <b>7.58E-25</b> | 7.70E-25                | 7.79E-25        |                    | -2.81 | -1.56  | -2.81  |       |
| 1228.52930                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 4  | 5 | 0           | 0 | 0 | 10 | 5  | 6  | 2.30E-25              | <b>2.31E-25</b> | 2.10E-25                | 2.62E-25        | 2.34E-25           | 0.04  | 8.72   | -13.67 | -1.48 |
| 1229.36372                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 0  | 9 | 0           | 1 | 0 | 9  | 3  | 6  | 6.98E-24              | <b>6.97E-24</b> | 7.33E-24                | 6.94E-24        | 7.07E-24           | -0.16 | -5.16  | 0.40   | -1.46 |
| 1232.96166                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 10 | 3 | 0           | 0 | 0 | 13 | 11 | 2  | 1.22E-26              | <b>1.24E-26</b> | 1.08E-26                |                 |                    | 1.61  | 13.31  |        |       |
| 1232.96166                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 10 | 2 | 0           | 0 | 0 | 13 | 11 | 3  | 3.66E-26              | <b>3.73E-26</b> | 3.23E-26                |                 |                    | 1.88  | 13.54  |        |       |
| 1233.28407                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 8  | 4 | 0           | 0 | 0 | 12 | 9  | 3  | 4.64E-25              | <b>4.69E-25</b> | 4.31E-25                |                 |                    | 1.07  | 8.06   |        |       |
| 1233.28658                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 8  | 3 | 0           | 0 | 0 | 12 | 9  | 4  | 1.39E-24              | <b>1.46E-24</b> | 1.29E-24                | 1.47E-24        |                    | 4.99  | 11.55  | -0.48  |       |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [16] | Upper state |   |   |    |   |    | Lower state |   |   |    |   |    | S(HITRAN2004)<br>[16] | S(Obs)<br>[7]   | S(LISA)<br>[60][61][62] | S(Toth)<br>[52] | S(Coudert)<br>[58] | A      | B      | C      | D     |
|--------------------------------------|-------------|---|---|----|---|----|-------------|---|---|----|---|----|-----------------------|-----------------|-------------------------|-----------------|--------------------|--------|--------|--------|-------|
| 1235.20415                           | 0           | 1 | 0 | 17 | 0 | 17 | 0           | 0 | 0 | 18 | 1 | 18 | 2.40E-25              | <b>2.41E-25</b> | 2.50E-25                | 2.34E-25        |                    | 0.41   | -3.90  | 2.90   |       |
| 1235.20415                           | 0           | 1 | 0 | 17 | 1 | 17 | 0           | 0 | 0 | 18 | 0 | 18 | 8.03E-26              | <b>7.09E-26</b> | 8.35E-26                |                 |                    | -13.26 | -17.73 |        |       |
| 1236.75656                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 1 | 10 | 0           | 0 | 0 | 11 | 4 | 7  | 1.44E-24              | <b>1.47E-24</b> | 1.51E-24                | 1.48E-24        | 1.46E-24           | 2.11   | -2.73  | -0.89  | 0.55  |
| 1237.53123                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 3 | 3  | 0           | 0 | 0 | 6  | 6 | 0  | 2.86E-25              | <b>2.85E-25</b> | 2.86E-25                | 2.99E-25        |                    | -0.07  | -0.18  | -4.77  |       |
| 1239.21915                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 5 | 6  | 0           | 0 | 0 | 11 | 6 | 5  | 5.49E-23              | <b>5.57E-23</b> | 5.36E-23                | 5.53E-23        |                    | 1.56   | 3.82   | 0.79   |       |
| 1239.99907                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 2 | 7  | 0           | 0 | 0 | 8  | 5 | 4  | 7.30E-24              | <b>7.72E-24</b> | 7.28E-24                | 7.06E-24        |                    | 5.44   | 5.70   | 8.55   |       |
| 1240.68930                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 4 | 5  | 0           | 0 | 0 | 9  | 5 | 4  | 7.63E-25              | <b>8.44E-25</b> | 6.94E-25                | 8.47E-25        |                    | 9.60   | 17.80  | -0.36  |       |
| 1242.79930                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 6 | 5  | 0           | 1 | 0 | 11 | 7 | 4  | 3.07E-23              | <b>3.03E-23</b> | 2.94E-23                | 3.10E-23        |                    | -1.09  | 3.00   | -2.21  |       |
| 1243.02138                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 5 | 4  | 0           | 0 | 0 | 9  | 6 | 3  | 4.20E-25              | <b>4.64E-25</b> | 3.85E-25                | 4.32E-25        |                    | 9.55   | 16.92  | 6.88   |       |
| 1243.19046                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 6 | 4  | 0           | 1 | 0 | 11 | 7 | 5  | 1.02E-23              | <b>1.01E-23</b> | 9.81E-24                | 1.03E-23        | 1.08E-23           | -1.30  | 2.63   | -2.19  | -7.35 |
| 1243.43686                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 5 | 3  | 0           | 0 | 0 | 9  | 6 | 4  | 1.40E-25              | <b>1.40E-25</b> | 1.29E-25                | 1.52E-25        |                    | -0.07  | 8.01   | -8.65  |       |
| 1244.13823                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 1 | 4  | 0           | 1 | 0 | 6  | 4 | 3  | 5.12E-22              | <b>5.31E-22</b> | 5.07E-22                | 5.16E-22        |                    | 3.55   | 4.47   | 2.85   |       |
| 1244.80298                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 5 | 5  | 0           | 0 | 0 | 11 | 6 | 6  | 1.86E-23              | <b>1.84E-23</b> | 1.81E-23                | 1.87E-23        |                    | -0.83  | 1.67   | -1.59  |       |
| 1246.68076                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 3 | 4  | 0           | 0 | 0 | 7  | 6 | 1  | 1.86E-24              | <b>1.91E-24</b> | 1.83E-24                | 1.84E-24        |                    | 2.62   | 4.14   | 3.66   |       |
| 1246.83732                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 4 | 4  | 0           | 0 | 0 | 9  | 5 | 5  | 1.65E-25              | <b>1.78E-25</b> | 1.47E-25                | 2.38E-25        |                    | 7.48   | 17.54  | -33.78 |       |
| 1247.75417                           | 0           | 2 | 0 | 13 | 2 | 11 | 0           | 1 | 0 | 13 | 5 | 8  | 1.06E-25              | <b>1.09E-25</b> | 1.08E-25                | 1.13E-25        |                    | 2.58   | 0.65   | -4.15  |       |
| 1247.88142                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 0 | 8  | 0           | 0 | 0 | 9  | 5 | 5  | 9.32E-26              | <b>9.27E-26</b> | 8.93E-26                | 9.08E-26        |                    | -0.50  | 3.72   | 2.08   |       |
| 1248.17731                           | 1           | 0 | 0 | 8  | 6 | 3  | 0           | 1 | 0 | 9  | 7 | 2  | 1.82E-25              | <b>1.89E-25</b> | 1.73E-25                | 1.82E-25        |                    | 3.76   | 8.25   | 3.70   |       |
| 1248.44618                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 7 | 4  | 0           | 1 | 0 | 11 | 8 | 3  | 1.42E-23              | <b>1.41E-23</b> | 1.34E-23                | 1.44E-23        |                    | -0.85  | 5.24   | -1.98  |       |
| 1248.46321                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 7 | 3  | 0           | 0 | 0 | 11 | 8 | 4  | 4.76E-24              | <b>4.69E-24</b> | 4.46E-24                | 4.76E-24        |                    | -1.49  | 4.88   | -1.49  |       |
| 1248.46332                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 6 | 2  | 0           | 0 | 0 | 9  | 7 | 3  | 5.69E-26              | <b>5.61E-26</b> | 5.51E-26                |                 |                    | -1.43  | 1.71   |        |       |
| 1248.89018                           | 0           | 2 | 0 | 4  | 0 | 4  | 0           | 1 | 0 | 5  | 3 | 3  | 5.93E-25              | <b>6.15E-25</b> | 5.80E-25                | 6.25E-25        |                    | 3.53   | 5.65   | -1.68  |       |
| 1251.34953                           | 0           | 2 | 0 | 3  | 1 | 3  | 0           | 1 | 0 | 4  | 4 | 0  | 1.52E-23              | <b>1.53E-23</b> | 1.50E-23                | 1.53E-23        | 1.57E-23           | 0.69   | 1.87   | 0.10   | -2.51 |
| 1253.34598                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 1 | 7  | 0           | 0 | 0 | 7  | 4 | 4  | 6.78E-24              | <b>6.45E-24</b> | 6.85E-24                | 6.74E-24        |                    | -5.04  | -6.11  | -4.46  |       |
| 1255.04800                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 4 | 11 | 0           | 0 | 0 | 16 | 5 | 12 | 2.88E-26              | <b>3.06E-26</b> | 2.96E-26                | 3.18E-26        |                    | 5.82   | 3.17   | -3.99  |       |
| 1255.15288                           | 0           | 1 | 0 | 17 | 1 | 16 | 0           | 0 | 0 | 18 | 2 | 17 | 4.02E-26              | <b>4.32E-26</b> | 4.68E-26                | 4.84E-26        |                    | 6.93   | -8.48  | -12.11 |       |
| 1255.70017                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 4 | 10 | 0           | 0 | 0 | 15 | 5 | 11 | 5.41E-26              | <b>5.27E-26</b> | 5.46E-26                | 3.70E-26        |                    | -2.52  | -3.62  | 29.83  |       |
| 1255.79378                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 4 | 9  | 0           | 0 | 0 | 14 | 5 | 10 | 8.47E-25              | <b>8.58E-25</b> | 8.50E-25                | 8.43E-25        |                    | 1.26   | 0.93   | 1.75   |       |
| 1255.96134                           | 0           | 1 | 0 | 16 | 0 | 16 | 0           | 0 | 0 | 17 | 1 | 17 | 1.19E-24              | <b>1.12E-24</b> | 1.65E-24                | 1.17E-24        |                    | -6.44  | -47.58 | -4.65  |       |
| 1256.54645                           | 0           | 1 | 0 | 16 | 1 | 16 | 0           | 0 | 0 | 17 | 0 | 17 | 6.78E-26              | <b>6.41E-26</b> | 6.85E-26                | 8.63E-26        |                    | -5.73  | -6.85  | -34.63 |       |
| 1256.54645                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 7 | 2  | 0           | 0 | 0 | 9  | 8 | 1  | 2.26E-26              | <b>2.13E-26</b> | 2.28E-26                |                 |                    | -5.87  | -7.18  |        |       |
| 1256.88065                           | 0           | 2 | 0 | 12 | 4 | 8  | 0           | 1 | 0 | 13 | 5 | 9  | 1.39E-24              | <b>1.39E-24</b> | 1.38E-24                | 1.38E-24        |                    | 0.00   | 0.43   | 0.58   |       |
| 1257.08761                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 8 | 3  | 0           | 0 | 0 | 11 | 9 | 2  | 5.81E-24              | <b>5.78E-24</b> | 5.32E-24                | 5.81E-24        |                    | -0.52  | 7.89   | -0.52  |       |
| 1257.08783                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 8 | 2  | 0           | 0 | 0 | 11 | 9 | 3  | 1.94E-24              | <b>1.92E-24</b> | 1.78E-24                |                 |                    | -1.04  | 7.55   |        |       |
| 1258.61761                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 4 | 6  | 0           | 0 | 0 | 10 | 5 | 5  | 9.72E-23              | <b>1.01E-22</b> | 9.55E-23                | 9.80E-23        | 9.75E-23           | 3.69   | 5.40   | 2.91   | 3.42  |
| 1258.89322                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 2 | 6  | 0           | 0 | 0 | 7  | 5 | 3  | 3.95E-24              | <b>3.81E-24</b> | 3.94E-24                | 3.91E-24        | 3.75E-24           | -3.65  | -3.31  | -2.62  | 1.57  |
| 1259.14772                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 3 | 5  | 0           | 0 | 0 | 8  | 6 | 2  | 7.87E-25              | <b>7.69E-25</b> | 7.65E-25                | 7.87E-25        | 7.48E-25           | -2.33  | 0.46   | -2.37  | 2.69  |
| 1260.34347                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 1 | 6  | 0           | 0 | 0 | 7  | 2 | 5  | 1.69E-21              | <b>1.72E-21</b> | 1.73E-21                | 1.68E-21        | 1.75E-21           | 1.56   | -0.42  | 2.37   | -1.46 |
| 1260.49760                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 4 | 7  | 0           | 0 | 0 | 12 | 5 | 8  | 1.91E-23              | <b>1.88E-23</b> | 1.90E-23                | 1.93E-23        | 1.86E-23           | -1.94  | -1.14  | -2.90  | 0.62  |
| 1261.92432                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 3 | 5  | 0           | 1 | 0 | 8  | 4 | 4  | 9.84E-25              | <b>9.34E-25</b> | 9.05E-25                | 9.60E-25        | 8.95E-25           | -5.40  | 3.05   | -2.79  | 4.17  |
| 1264.01392                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 5 | 5  | 0           | 0 | 0 | 10 | 6 | 4  | 7.02E-23              | <b>6.94E-23</b> | 6.79E-23                | 7.06E-23        | 6.95E-23           | -1.17  | 2.21   | -1.75  | -0.11 |
| 1264.38401                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 1 | 8  | 0           | 1 | 0 | 9  | 4 | 5  | 3.48E-26              | <b>4.14E-26</b> | 3.94E-26                |                 |                    | 15.91  | 4.90   |        |       |
| 1265.35524                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 1 | 3  | 0           | 0 | 0 | 5  | 4 | 2  | 1.09E-22              | <b>1.16E-22</b> | 1.08E-22                | 1.10E-22        | 1.09E-22           | 6.57   | 7.34   | 5.28   | 6.40  |
| 1266.07298                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 5 | 4  | 0           | 0 | 0 | 10 | 6 | 5  | 2.11E-22              | <b>2.13E-22</b> | 2.05E-22                | 2.12E-22        | 2.10E-22           | 0.96   | 4.01   | 0.49   | 1.57  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [16] | Upper state |   |   |    |    |    | Lower state |   |   |    |    |    | S(HITRAN2004)<br>[16] | S(Obs)<br>[7]   | S(LISA)<br>[60][61][62] | S(Toth)<br>[52] | S(Coudert)<br>[58] | A      | B      | C      | D      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|----|----|----|-------------|---|---|----|----|----|-----------------------|-----------------|-------------------------|-----------------|--------------------|--------|--------|--------|--------|
| 1266.56109                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 6  | 4  | 0           | 0 | 0 | 10 | 7  | 3  | 3.81E-23              | <b>3.87E-23</b> | 3.62E-23                | 3.81E-23        | 3.75E-23           | 1.49   | 6.28   | 1.44   | 3.10   |
| 1266.66805                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 6  | 3  | 0           | 0 | 0 | 10 | 7  | 4  | 1.14E-22              | <b>1.21E-22</b> | 1.09E-22                | 1.15E-22        | 1.12E-22           | 5.77   | 10.30  | 5.11   | 7.58   |
| 1267.21116                           | 0           | 2 | 0 | 8  | 8  | 1  | 0           | 1 | 0 | 9  | 9  | 0  | 2.16E-26              | <b>2.02E-26</b> | 2.46E-26                |                 |                    | -7.24  | -22.07 |        |        |
| 1267.21116                           | 0           | 2 | 0 | 8  | 8  | 0  | 0           | 1 | 0 | 9  | 9  | 1  | 7.22E-27              | <b>6.74E-27</b> | 8.20E-27                |                 |                    | -7.15  | -21.74 |        |        |
| 1267.40370                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 5  | 3  | 0           | 1 | 0 | 8  | 6  | 2  | 4.08E-25              | <b>3.95E-25</b> | 3.78E-25                | 3.87E-25        | 4.28E-25           | -3.06  | 4.50   | 2.12   | -8.32  |
| 1267.51312                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 5  | 2  | 0           | 1 | 0 | 8  | 6  | 3  | 1.23E-24              | <b>1.21E-24</b> | 1.13E-24                | 1.18E-24        | 1.10E-24           | -1.32  | 6.36   | 2.48   | 9.01   |
| 1267.95310                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 4  | 6  | 0           | 0 | 0 | 11 | 5  | 7  | 2.72E-23              | <b>2.74E-23</b> | 2.68E-23                | 2.76E-23        | 2.66E-23           | 0.80   | 2.15   | -0.84  | 2.74   |
| 1268.11481                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 9  | 2  | 0           | 0 | 0 | 11 | 10 | 1  | 2.13E-24              | <b>2.21E-24</b> | 1.90E-24                | 2.06E-24        |                    | 3.66   | 13.89  | 6.83   |        |
| 1268.11481                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 9  | 1  | 0           | 0 | 0 | 11 | 10 | 2  | 7.10E-25              | <b>7.37E-25</b> | 6.35E-25                |                 |                    | 3.66   | 13.88  |        |        |
| 1268.38220                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 2  | 6  | 0           | 0 | 0 | 8  | 3  | 5  | 5.53E-22              | <b>5.73E-22</b> | 5.59E-22                | 5.49E-22        | 5.68E-22           | 3.59   | 2.53   | 4.24   | 0.92   |
| 1268.76134                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 4  | 3  | 0           | 1 | 0 | 8  | 5  | 4  | 2.29E-24              | <b>2.24E-24</b> | 2.10E-24                | 2.26E-24        | 2.11E-24           | -1.96  | 6.24   | -0.76  | 6.11   |
| 1269.25763                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 3  | 6  | 0           | 1 | 0 | 10 | 4  | 7  | 3.46E-25              | <b>3.51E-25</b> | 3.23E-25                | 3.15E-25        | 2.94E-25           | 1.31   | 7.96   | 10.18  | 16.05  |
| 1269.95724                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 3  | 6  | 0           | 0 | 0 | 9  | 4  | 5  | 9.36E-22              | <b>9.68E-22</b> | 9.30E-22                | 9.52E-22        | 9.45E-22           | 3.34   | 3.90   | 1.67   | 2.40   |
| 1270.95325                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 11 | 0  | 0           | 0 | 0 | 12 | 12 | 1  | 1.69E-26              | <b>1.63E-26</b> | 1.52E-26                |                 |                    | -3.68  | 6.93   |        |        |
| 1270.95325                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 11 | 1  | 0           | 0 | 0 | 12 | 12 | 0  | 5.04E-26              | <b>4.87E-26</b> | 4.55E-26                | 8.31E-26        |                    | -3.49  | 6.57   | -70.64 |        |
| 1271.28956                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 1  | 5  | 0           | 1 | 0 | 6  | 2  | 4  | 1.75E-24              | <b>1.71E-24</b> | 1.68E-24                | 1.73E-24        | 1.59E-24           | -2.16  | 1.87   | -0.93  | 7.29   |
| 1271.78782                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 0  | 5  | 0           | 0 | 0 | 6  | 3  | 4  | 1.88E-21              | <b>1.95E-21</b> | 1.90E-21                | 1.84E-21        | 1.92E-21           | 3.89   | 2.77   | 5.74   | 1.84   |
| 1272.34038                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 7  | 3  | 0           | 0 | 0 | 10 | 8  | 2  | 1.76E-23              | <b>1.71E-23</b> | 1.64E-23                | 1.78E-23        |                    | -2.35  | 4.41   | -3.81  |        |
| 1272.34362                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 7  | 2  | 0           | 0 | 0 | 10 | 8  | 3  | 5.29E-23              | <b>5.31E-23</b> | 4.92E-23                | 5.33E-23        | 5.30E-23           | 0.30   | 7.27   | -0.45  | 0.06   |
| 1272.58678                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 6  | 2  | 0           | 1 | 0 | 8  | 7  | 1  | 1.78E-25              | <b>1.92E-25</b> | 1.70E-25                | 1.59E-25        | 2.13E-25           | 7.25   | 11.37  | 17.10  | -10.90 |
| 1272.68279                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 6  | 1  | 0           | 1 | 0 | 8  | 7  | 2  | 5.24E-25              | <b>5.86E-25</b> | 5.05E-25                | 5.24E-25        |                    | 10.53  | 13.86  | 10.53  |        |
| 1272.68728                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 2  | 5  | 0           | 0 | 0 | 6  | 5  | 2  | 1.24E-23              | <b>1.29E-23</b> | 1.23E-23                | 1.24E-23        | 1.22E-23           | 3.95   | 4.49   | 3.95   | 5.58   |
| 1272.93275                           | 0           | 1 | 0 | 16 | 1  | 15 | 0           | 0 | 0 | 17 | 2  | 16 | 7.34E-26              | <b>7.40E-26</b> | 8.37E-26                |                 |                    | 0.73   | -13.18 |        |        |
| 1272.96063                           | 0           | 1 | 0 | 16 | 2  | 15 | 0           | 0 | 0 | 17 | 1  | 16 | 2.20E-25              | <b>2.31E-25</b> | 2.51E-25                | 2.38E-25        | 2.17E-25           | 4.85   | -8.65  | -2.99  | 5.93   |
| 1273.28739                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 3  | 6  | 0           | 0 | 0 | 9  | 6  | 3  | 2.19E-24              | <b>2.05E-24</b> | 2.14E-24                | 2.16E-24        | 2.16E-24           | -7.14  | -4.69  | -5.62  | -5.77  |
| 1273.29549                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 2  | 5  | 0           | 1 | 0 | 7  | 3  | 4  | 5.97E-24              | <b>6.31E-24</b> | 5.60E-24                | 5.73E-24        | 5.65E-24           | 5.42   | 11.25  | 9.24   | 10.53  |
| 1275.73383                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 0  | 7  | 0           | 1 | 0 | 7  | 3  | 4  | 1.70E-25              | <b>1.77E-25</b> | 1.87E-25                | 1.54E-25        | 1.43E-25           | 3.96   | -5.60  | 12.90  | 19.29  |
| 1276.55337                           | 0           | 2 | 0 | 8  | 3  | 5  | 0           | 1 | 0 | 9  | 4  | 6  | 3.75E-25              | <b>3.97E-25</b> | 3.47E-25                | 3.45E-25        | 3.81E-25           | 5.50   | 12.46  | 13.01  | 3.88   |
| 1276.62619                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 0  | 15 | 0           | 0 | 0 | 16 | 1  | 16 | 5.45E-24              | <b>5.45E-24</b> | 5.59E-24                | 5.65E-24        |                    | -0.04  | -2.55  | -3.71  |        |
| 1276.62804                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 1  | 15 | 0           | 0 | 0 | 16 | 0  | 16 | 1.84E-24              | <b>1.84E-24</b> | 1.86E-24                |                 |                    | -0.05  | -1.25  |        |        |
| 1280.04753                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 4  | 5  | 0           | 0 | 0 | 10 | 5  | 6  | 3.14E-22              | <b>3.24E-22</b> | 3.09E-22                | 3.15E-22        | 3.15E-22           | 3.03   | 4.73   | 2.82   | 2.85   |
| 1280.44876                           | 0           | 1 | 0 | 16 | 3  | 14 | 0           | 0 | 0 | 17 | 2  | 15 | 5.73E-26              | <b>5.69E-26</b> | 6.02E-26                | 8.79E-26        |                    | -0.77  | -5.88  | -54.62 |        |
| 1280.99944                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 10 | 1  | 0           | 0 | 0 | 11 | 11 | 0  | 7.02E-25              | <b>5.95E-25</b> | 6.26E-25                | 7.38E-25        |                    | -17.98 | -5.18  | -24.03 |        |
| 1280.99944                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 10 | 0  | 0           | 0 | 0 | 11 | 11 | 1  | 2.34E-25              | <b>2.01E-25</b> | 2.09E-25                |                 |                    | -16.42 | -3.78  |        |        |
| 1281.16098                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 8  | 2  | 0           | 0 | 0 | 10 | 9  | 1  | 7.14E-24              | <b>7.21E-24</b> | 6.53E-24                |                 |                    | 1.00   | 9.41   |        |        |
| 1281.16125                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 8  | 1  | 0           | 0 | 0 | 10 | 9  | 2  | 2.15E-23              | <b>2.17E-23</b> | 1.96E-23                | 2.14E-23        |                    | 0.92   | 9.68   | 1.38   |        |
| 1282.07963                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 2  | 4  | 0           | 0 | 0 | 5  | 5  | 1  | 2.20E-24              | <b>2.17E-24</b> | 2.18E-24                | 2.26E-24        | 2.04E-24           | -1.06  | -0.23  | -4.05  | 6.03   |
| 1284.30575                           | 0           | 1 | 0 | 3  | 1  | 2  | 0           | 0 | 0 | 4  | 4  | 1  | 1.11E-22              | <b>1.18E-22</b> | 1.10E-22                | 1.13E-22        | 1.11E-22           | 6.41   | 6.83   | 4.64   | 5.99   |
| 1284.42683                           | 0           | 2 | 0 | 3  | 0  | 3  | 0           | 1 | 0 | 4  | 3  | 2  | 1.39E-24              | <b>1.34E-24</b> | 1.36E-24                | 1.53E-24        | 1.27E-24           | -4.11  | -1.94  | -14.44 | 4.79   |
| 1284.92718                           | 0           | 1 | 0 | 16 | 1  | 16 | 0           | 0 | 0 | 16 | 2  | 15 | 1.05E-24              | <b>1.11E-24</b> | 1.16E-24                | 1.04E-24        | 9.45E-25           | 5.91   | -4.27  | 6.36   | 14.92  |
| 1285.68987                           | 0           | 0 | 0 | 12 | 7  | 6  | 0           | 0 | 0 | 11 | 0  | 11 | 6.94E-26              | <b>6.39E-26</b> | 6.38E-26                | 6.66E-26        |                    | -8.54  | 0.22   | -4.18  |        |
| 1286.02851                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 1  | 6  | 0           | 0 | 0 | 6  | 4  | 3  | 3.82E-23              | <b>3.86E-23</b> | 3.85E-23                | 3.78E-23        | 3.78E-23           | 1.27   | 0.31   | 2.20   | 2.17   |
| 1286.12067                           | 0           | 2 | 0 | 13 | 0  | 13 | 0           | 1 | 0 | 14 | 1  | 14 | 8.39E-26              | <b>8.08E-26</b> | 8.79E-26                | 9.56E-26        |                    | -3.91  | -8.80  | -18.39 |        |
| 1286.69302                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 1  | 9  | 0           | 0 | 0 | 10 | 4  | 6  | 3.14E-24              | <b>3.07E-24</b> | 3.28E-24                | 3.17E-24        | 3.08E-24           | -2.54  | -7.11  | -3.43  | -0.46  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [16] | Upper state |   |   |    |   |    | Lower state |   |   |    |    |    | S(HITRAN2004)<br>[16] | S(Obs)<br>[7]   | S(LISA)<br>[60][61][62] | S(Toth)<br>[52] | S(Coudert)<br>[58] | A     | B      | C      | D      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|----|---|----|-------------|---|---|----|----|----|-----------------------|-----------------|-------------------------|-----------------|--------------------|-------|--------|--------|--------|
| 1286.79703                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 3 | 7  | 0           | 0 | 0 | 10 | 6  | 4  | 5.33E-25              | <b>5.52E-25</b> | 5.22E-25                | 5.24E-25        | 4.81E-25           | 3.48  | 5.40   | 5.02   | 12.80  |
| 1286.98165                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 2 | 10 | 0           | 0 | 0 | 12 | 5  | 7  | 2.50E-25              | <b>2.45E-25</b> | 2.57E-25                | 2.46E-25        |                    | -1.92 | -4.93  | -0.29  |        |
| 1287.30559                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 0 | 8  | 0           | 0 | 0 | 8  | 3  | 5  | 1.27E-23              | <b>1.34E-23</b> | 1.32E-23                | 1.27E-23        | 1.24E-23           | 4.99  | 1.25   | 5.06   | 7.16   |
| 1287.40006                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 4 | 5  | 0           | 0 | 0 | 9  | 5  | 4  | 1.05E-21              | <b>1.07E-21</b> | 1.03E-21                | 1.04E-21        | 1.05E-21           | 1.78  | 3.75   | 2.62   | 1.97   |
| 1288.13944                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 3 | 4  | 0           | 1 | 0 | 8  | 4  | 5  | 3.32E-24              | <b>3.32E-24</b> | 3.08E-24                | 3.03E-24        |                    | -0.12 | 7.23   | 8.73   |        |
| 1288.24992                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 5 | 4  | 0           | 0 | 0 | 9  | 6  | 3  | 7.06E-22              | <b>7.15E-22</b> | 6.79E-22                | 7.02E-22        | 6.97E-22           | 1.21  | 5.03   | 1.77   | 2.46   |
| 1288.88653                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 5 | 3  | 0           | 0 | 0 | 9  | 6  | 4  | 2.35E-22              | <b>2.42E-22</b> | 2.27E-22                | 2.36E-22        | 2.34E-22           | 2.66  | 6.26   | 2.33   | 3.12   |
| 1290.53589                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 6 | 3  | 0           | 0 | 0 | 9  | 7  | 2  | 3.77E-22              | <b>3.84E-22</b> | 3.57E-22                | 3.82E-22        | 3.71E-22           | 1.71  | 6.98   | 0.46   | 3.33   |
| 1290.55886                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 6 | 2  | 0           | 0 | 0 | 9  | 7  | 3  | 1.26E-22              | <b>1.29E-22</b> | 1.19E-22                | 1.24E-22        | 1.23E-22           | 2.35  | 7.70   | 3.82   | 4.29   |
| 1290.71595                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 1 | 14 | 0           | 0 | 0 | 16 | 2  | 15 | 1.11E-24              | <b>1.08E-24</b> | 1.23E-24                | 1.19E-24        | 1.11E-24           | -2.78 | -14.09 | -10.29 | -3.15  |
| 1290.76761                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 2 | 14 | 0           | 0 | 0 | 16 | 1  | 15 | 3.69E-25              | <b>3.83E-25</b> | 4.10E-25                | 3.83E-25        | 3.52E-25           | 3.73  | -7.02  | 0.10   | 8.24   |
| 1291.34791                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 4 | 3  | 0           | 1 | 0 | 7  | 5  | 2  | 5.97E-24              | <b>5.74E-24</b> | 5.51E-24                | 5.93E-24        | 5.61E-24           | -4.08 | 3.94   | -3.36  | 2.18   |
| 1291.90527                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 5 | 2  | 0           | 1 | 0 | 7  | 6  | 1  | 3.19E-24              | <b>3.02E-24</b> | 2.96E-24                | 3.29E-24        | 3.10E-24           | -5.63 | 1.89   | -9.05  | -2.62  |
| 1291.93038                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 5 | 1  | 0           | 1 | 0 | 7  | 6  | 2  | 1.06E-24              | <b>1.02E-24</b> | 9.86E-25                | 1.07E-24        | 1.02E-24           | -3.61 | 3.69   | -4.49  | 0.78   |
| 1292.01133                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 4 | 2  | 0           | 1 | 0 | 7  | 5  | 3  | 2.02E-24              | <b>2.08E-24</b> | 1.84E-24                | 1.97E-24        | 1.91E-24           | 2.98  | 11.58  | 5.33   | 8.17   |
| 1292.37163                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 9 | 0  | 0           | 0 | 0 | 10 | 10 | 1  | 7.83E-24              | <b>8.27E-24</b> | 7.06E-24                | 8.03E-24        |                    | 5.32  | 14.63  | 2.90   |        |
| 1292.37163                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 9 | 1  | 0           | 0 | 0 | 10 | 10 | 0  | 2.61E-24              | <b>2.75E-24</b> | 2.35E-24                |                 |                    | 5.09  | 14.44  |        |        |
| 1292.82688                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 3 | 4  | 0           | 1 | 0 | 7  | 4  | 3  | 8.39E-24              | <b>8.20E-24</b> | 7.82E-24                | 8.31E-24        | 7.91E-24           | -2.30 | 4.71   | -1.32  | 3.52   |
| 1295.52125                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 2 | 13 | 0           | 0 | 0 | 16 | 3  | 14 | 3.07E-25              | <b>2.97E-25</b> | 3.17E-25                | 2.87E-25        | 3.18E-25           | -3.47 | -6.71  | 3.27   | -7.21  |
| 1296.49001                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 7 | 2  | 0           | 0 | 0 | 9  | 8  | 1  | 1.74E-22              | <b>1.74E-22</b> | 1.61E-22                | 1.74E-22        |                    | 0.00  | 7.36   | 0.00   |        |
| 1296.49054                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 7 | 1  | 0           | 0 | 0 | 9  | 8  | 2  | 5.77E-23              | <b>5.76E-23</b> | 5.37E-23                |                 |                    | -0.17 | 6.70   |        |        |
| 1296.70935                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 4 | 4  | 0           | 0 | 0 | 9  | 5  | 5  | 3.59E-22              | <b>3.74E-22</b> | 3.52E-22                | 3.66E-22        | 3.61E-22           | 3.95  | 5.82   | 2.08   | 3.47   |
| 1296.99330                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 3 | 8  | 0           | 0 | 0 | 11 | 6  | 5  | 9.04E-25              | <b>8.81E-25</b> | 8.87E-25                | 8.71E-25        | 8.39E-25           | -2.59 | -0.67  | 1.12   | 4.71   |
| 1297.13476                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 6 | 1  | 0           | 1 | 0 | 7  | 7  | 0  | 1.30E-24              | <b>1.28E-24</b> | 1.23E-24                | 1.36E-24        | 1.25E-24           | -1.64 | 3.82   | -6.08  | 2.81   |
| 1297.18110                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 0 | 14 | 0           | 0 | 0 | 15 | 1  | 15 | 7.54E-24              | <b>7.90E-24</b> | 7.68E-24                | 7.87E-24        |                    | 4.56  | 2.73   | 0.38   |        |
| 1297.18372                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 1 | 14 | 0           | 0 | 0 | 15 | 0  | 15 | 2.26E-23              | <b>2.37E-23</b> | 2.31E-23                | 2.26E-23        |                    | 4.60  | 2.70   | 4.60   |        |
| 1298.11721                           | 0           | 0 | 1 | 6  | 3 | 3  | 0           | 1 | 0 | 7  | 7  | 0  | 1.16E-25              | <b>1.31E-25</b> | 1.17E-25                | 1.07E-25        |                    | 11.23 | 10.70  | 18.26  |        |
| 1298.66036                           | 0           | 3 | 0 | 4  | 2 | 3  | 0           | 2 | 0 | 5  | 3  | 2  | 2.54E-26              | <b>3.95E-26</b> | 3.47E-26                |                 |                    | 35.56 | 12.04  |        |        |
| 1298.91450                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 3 | 11 | 0           | 0 | 0 | 15 | 4  | 12 | 1.56E-25              | <b>1.70E-25</b> | 1.55E-25                | 1.37E-25        | 1.53E-25           | 7.96  | 8.43   | 19.22  | 9.79   |
| 1298.96435                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 4 | 12 | 0           | 0 | 0 | 16 | 3  | 13 | 3.01E-26              | <b>3.10E-26</b> | 3.01E-26                | 2.16E-26        |                    | 2.93  | 3.06   | 30.35  |        |
| 1301.04129                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 3 | 9  | 0           | 0 | 0 | 12 | 6  | 6  | 1.27E-25              | <b>1.48E-25</b> | 1.24E-25                | 1.37E-25        | 1.67E-25           | 14.57 | 16.39  | 7.62   | -12.81 |
| 1304.28575                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 3 | 3  | 0           | 1 | 0 | 7  | 4  | 4  | 2.94E-24              | <b>2.85E-24</b> | 2.73E-24                | 2.88E-24        | 2.63E-24           | -3.05 | 4.25   | -1.05  | 7.68   |
| 1305.48838                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 8 | 1  | 0           | 0 | 0 | 9  | 9  | 0  | 7.02E-23              | <b>7.27E-23</b> | 6.46E-23                | 6.82E-23        |                    | 3.44  | 11.20  | 6.19   |        |
| 1305.48838                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 8 | 0  | 0           | 0 | 0 | 9  | 9  | 1  | 2.34E-23              | <b>2.42E-23</b> | 2.15E-23                |                 |                    | 3.31  | 11.07  |        |        |
| 1305.70344                           | 0           | 2 | 0 | 12 | 0 | 12 | 0           | 1 | 0 | 13 | 1  | 13 | 9.52E-26              | <b>1.01E-25</b> | 9.85E-26                | 9.80E-26        |                    | 5.92  | 2.65   | 3.16   |        |
| 1305.73913                           | 0           | 2 | 0 | 12 | 1 | 12 | 0           | 1 | 0 | 13 | 0  | 13 | 2.86E-25              | <b>2.79E-25</b> | 2.96E-25                | 2.62E-25        | 2.60E-25           | -2.48 | -6.06  | 5.99   | 6.89   |
| 1306.28962                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 1 | 15 | 0           | 0 | 0 | 15 | 2  | 14 | 1.52E-24              | <b>1.43E-24</b> | 1.64E-24                | 1.58E-24        | 1.73E-24           | -6.02 | -14.38 | -10.13 | -20.66 |
| 1306.30272                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 0 | 15 | 0           | 0 | 0 | 15 | 1  | 14 | 4.56E-24              | <b>4.35E-24</b> | 4.92E-24                | 4.68E-24        | 4.58E-24           | -4.80 | -13.15 | -7.59  | -5.20  |
| 1306.78750                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 3 | 10 | 0           | 0 | 0 | 14 | 4  | 11 | 2.18E-24              | <b>2.03E-24</b> | 2.15E-24                | 2.11E-24        | 2.07E-24           | -7.44 | -6.26  | -4.09  | -1.97  |
| 1307.19700                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 1 | 6  | 0           | 1 | 0 | 7  | 4  | 3  | 2.14E-25              | <b>2.18E-25</b> | 2.26E-25                | 2.16E-25        | 1.96E-25           | 1.84  | -3.86  | 0.83   | 9.87   |
| 1308.17886                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 3 | 5  | 0           | 0 | 0 | 8  | 4  | 4  | 1.13E-21              | <b>1.17E-21</b> | 1.13E-21                | 1.15E-21        | 1.15E-21           | 3.34  | 3.68   | 1.63   | 1.28   |
| 1308.46283                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 1 | 13 | 0           | 0 | 0 | 15 | 2  | 14 | 1.69E-24              | <b>1.63E-24</b> | 1.84E-24                | 1.87E-24        | 1.57E-24           | -3.68 | -12.64 | -14.72 | 3.99   |
| 1308.56305                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 2 | 13 | 0           | 0 | 0 | 15 | 1  | 14 | 5.08E-24              | <b>5.37E-24</b> | 5.51E-24                | 5.37E-24        | 5.11E-24           | 5.39  | -2.52  | 0.05   | 4.91   |
| 1310.78178                           | 0           | 2 | 0 | 12 | 0 | 12 | 0           | 1 | 0 | 12 | 1  | 11 | 6.50E-26              | <b>6.91E-26</b> | 7.26E-26                | 7.18E-26        |                    | 5.91  | -5.04  | -3.94  |        |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [16] | Upper state |   |   |    |   |    | Lower state |   |   |    |   |    | S(HITRAN2004)<br>[16] | S(Obs)<br>[7]   | S(LISA)<br>[60][61][62] | S(Toth)<br>[52] | S(Coudert)<br>[58] | A     | B     | C     | D      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|----|---|----|-------------|---|---|----|---|----|-----------------------|-----------------|-------------------------|-----------------|--------------------|-------|-------|-------|--------|
| 1310.80855                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 2 | 12 | 0           | 0 | 0 | 15 | 3 | 13 | 5.00E-25              | <b>4.61E-25</b> | 5.06E-25                | 4.92E-25        | 4.67E-25           | -8.53 | -9.81 | -6.75 | -1.41  |
| 1311.89238                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 2 | 3  | 0           | 0 | 0 | 5  | 5 | 0  | 1.02E-23              | <b>1.03E-23</b> | 1.01E-23                | 1.03E-23        | 1.00E-23           | 0.75  | 1.73  | -0.12 | 2.50   |
| 1312.34685                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 3 | 9  | 0           | 0 | 0 | 13 | 4 | 10 | 3.07E-24              | <b>2.94E-24</b> | 3.03E-24                | 2.99E-24        | 2.87E-24           | -4.36 | -2.87 | -1.64 | 2.50   |
| 1312.39954                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 5 | 3  | 0           | 0 | 0 | 8  | 6 | 2  | 6.94E-22              | <b>7.09E-22</b> | 6.66E-22                | 6.86E-22        | 6.91E-22           | 2.10  | 6.03  | 3.22  | 2.50   |
| 1312.55566                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 5 | 2  | 0           | 0 | 0 | 8  | 6 | 3  | 2.08E-21              | <b>2.12E-21</b> | 2.00E-21                | 2.09E-21        | 2.07E-21           | 1.65  | 5.57  | 1.28  | 2.36   |
| 1312.71462                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 1 | 5  | 0           | 0 | 0 | 5  | 4 | 2  | 1.55E-23              | <b>1.59E-23</b> | 1.56E-23                | 1.54E-23        | 1.51E-23           | 2.56  | 2.24  | 3.37  | 5.51   |
| 1313.22952                           | 0           | 2 | 0 | 11 | 2 | 9  | 0           | 1 | 0 | 12 | 3 | 10 | 6.90E-26              | <b>6.90E-26</b> | 7.00E-26                | 5.73E-26        |                    | 0.00  | -1.52 | 16.93 |        |
| 1313.48301                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 0 | 4  | 0           | 0 | 0 | 5  | 3 | 3  | 8.55E-22              | <b>9.08E-22</b> | 8.70E-22                | 8.71E-22        | 8.91E-22           | 5.77  | 4.12  | 4.04  | 1.87   |
| 1313.59211                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 1 | 4  | 0           | 1 | 0 | 5  | 4 | 1  | 1.69E-25              | <b>1.73E-25</b> | 1.74E-25                |                 |                    | 2.31  | -0.64 |       |        |
| 1313.59641                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 4 | 4  | 0           | 0 | 0 | 8  | 5 | 3  | 1.07E-21              | <b>1.10E-21</b> | 1.05E-21                | 1.07E-21        | 1.08E-21           | 2.10  | 4.11  | 2.37  | 1.28   |
| 1314.50976                           | 0           | 2 | 0 | 2  | 0 | 2  | 0           | 1 | 0 | 3  | 3 | 1  | 1.67E-25              | <b>1.75E-25</b> | 1.64E-25                | 1.78E-25        | 1.99E-25           | 4.45  | 6.22  | -1.60 | -13.47 |
| 1314.73985                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 6 | 2  | 0           | 0 | 0 | 8  | 7 | 1  | 3.69E-22              | <b>3.64E-22</b> | 3.48E-22                | 3.69E-22        |                    | -1.26 | 4.48  | -1.34 |        |
| 1314.74336                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 6 | 1  | 0           | 0 | 0 | 8  | 7 | 2  | 1.11E-21              | <b>1.09E-21</b> | 1.04E-21                | 1.09E-21        |                    | -1.28 | 4.40  | 0.09  |        |
| 1315.86031                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 2 | 9  | 0           | 0 | 0 | 11 | 5 | 6  | 3.85E-24              | <b>3.81E-24</b> | 3.94E-24                | 3.84E-24        | 3.70E-24           | -0.91 | -3.43 | -0.77 | 2.98   |
| 1315.87276                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 4 | 11 | 0           | 0 | 0 | 15 | 3 | 12 | 4.60E-25              | <b>4.63E-25</b> | 4.51E-25                | 4.36E-25        | 4.21E-25           | 0.67  | 2.55  | 5.85  | 9.09   |
| 1315.92635                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 2 | 4  | 0           | 1 | 0 | 6  | 3 | 3  | 5.89E-24              | <b>5.76E-24</b> | 5.59E-24                | 5.69E-24        | 5.60E-24           | -2.33 | 2.92  | 1.15  | 2.64   |
| 1315.99321                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 4 | 2  | 0           | 1 | 0 | 6  | 5 | 1  | 4.60E-24              | <b>4.51E-24</b> | 4.28E-24                | 4.60E-24        | 4.38E-24           | -2.02 | 5.12  | -2.04 | 2.80   |
| 1316.08815                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 3 | 8  | 0           | 0 | 0 | 12 | 4 | 9  | 3.57E-23              | <b>3.40E-23</b> | 3.52E-23                | 3.56E-23        | 3.56E-23           | -5.00 | -3.56 | -4.71 | -4.82  |
| 1316.12968                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 4 | 1  | 0           | 1 | 0 | 6  | 5 | 2  | 1.38E-23              | <b>1.30E-23</b> | 1.28E-23                | 1.33E-23        | 1.32E-23           | -6.31 | 1.09  | -2.46 | -1.84  |
| 1316.54076                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 5 | 1  | 0           | 1 | 0 | 6  | 6 | 0  | 2.47E-24              | <b>2.52E-24</b> | 2.30E-24                | 2.38E-24        | 2.40E-24           | 2.23  | 8.74  | 5.61  | 4.65   |
| 1316.55000                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 5 | 0  | 0           | 1 | 0 | 6  | 6 | 1  | 7.30E-24              | <b>7.23E-24</b> | 6.85E-24                | 7.38E-24        | 7.18E-24           | -0.95 | 5.24  | -2.03 | 0.73   |
| 1316.97240                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 4 | 3  | 0           | 0 | 0 | 8  | 5 | 4  | 3.25E-21              | <b>3.34E-21</b> | 3.18E-21                | 3.21E-21        | 3.28E-21           | 2.66  | 4.85  | 3.92  | 1.80   |
| 1317.46276                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 0 | 6  | 0           | 1 | 0 | 6  | 3 | 3  | 1.89E-25              | <b>2.06E-25</b> | 2.00E-25                | 1.85E-25        | 2.34E-25           | 7.93  | 2.58  | 9.98  | -13.92 |
| 1317.61046                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 0 | 13 | 0           | 0 | 0 | 14 | 1 | 14 | 8.55E-23              | <b>8.73E-23</b> | 8.68E-23                | 8.55E-23        | 8.44E-23           | 2.07  | 0.61  | 2.10  | 3.32   |
| 1317.61571                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 1 | 13 | 0           | 0 | 0 | 14 | 0 | 14 | 2.85E-23              | <b>2.90E-23</b> | 2.89E-23                | 2.84E-23        | 2.75E-23           | 1.70  | 0.15  | 1.98  | 5.05   |
| 1318.92943                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 2 | 5  | 0           | 0 | 0 | 7  | 3 | 4  | 5.85E-21              | <b>6.10E-21</b> | 5.95E-21                | 6.01E-21        | 6.10E-21           | 4.05  | 2.36  | 1.43  | 0.03   |
| 1319.22924                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 3 | 7  | 0           | 0 | 0 | 11 | 4 | 8  | 4.28E-23              | <b>4.27E-23</b> | 4.24E-23                | 4.24E-23        | 4.28E-23           | -0.03 | 0.86  | 0.81  | -0.17  |
| 1320.05555                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 1 | 5  | 0           | 0 | 0 | 6  | 2 | 4  | 1.64E-21              | <b>1.72E-21</b> | 1.69E-21                | 1.67E-21        | 1.73E-21           | 4.99  | 1.91  | 3.13  | -0.12  |
| 1320.32737                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 3 | 3  | 0           | 1 | 0 | 6  | 4 | 2  | 6.78E-24              | <b>6.56E-24</b> | 6.34E-24                | 6.58E-24        | 6.44E-24           | -3.34 | 3.35  | -0.34 | 1.84   |
| 1320.86868                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 7 | 1  | 0           | 0 | 0 | 8  | 8 | 0  | 1.69E-22              | <b>1.72E-22</b> | 1.57E-22                |                 |                    | 1.69  | 8.44  |       |        |
| 1320.86875                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 7 | 0  | 0           | 0 | 0 | 8  | 8 | 1  | 5.08E-22              | <b>5.17E-22</b> | 4.72E-22                | 5.04E-22        |                    | 1.74  | 8.67  | 2.51  |        |
| 1322.55795                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 2 | 4  | 0           | 0 | 0 | 6  | 5 | 1  | 9.20E-24              | <b>9.38E-24</b> | 9.20E-24                | 9.28E-24        | 9.08E-24           | 1.94  | 1.96  | 1.06  | 3.17   |
| 1323.33442                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 3 | 6  | 0           | 0 | 0 | 10 | 4 | 7  | 4.36E-22              | <b>4.50E-22</b> | 4.31E-22                | 4.40E-22        | 4.37E-22           | 3.26  | 4.37  | 2.31  | 3.06   |
| 1324.34950                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 3 | 2  | 0           | 1 | 0 | 6  | 4 | 3  | 2.06E-23              | <b>2.04E-23</b> | 1.93E-23                | 1.99E-23        | 1.99E-23           | -1.00 | 5.52  | 2.48  | 2.63   |
| 1325.15840                           | 0           | 2 | 0 | 11 | 0 | 11 | 0           | 1 | 0 | 12 | 1 | 12 | 8.84E-25              | <b>8.69E-25</b> | 9.06E-25                | 8.75E-25        | 7.68E-25           | -1.68 | -4.32 | -0.70 | 11.64  |
| 1325.22711                           | 0           | 2 | 0 | 11 | 1 | 11 | 0           | 1 | 0 | 12 | 0 | 12 | 2.96E-25              | <b>2.92E-25</b> | 3.02E-25                | 2.82E-25        | 2.48E-25           | -1.13 | -3.32 | 3.56  | 15.05  |
| 1325.60509                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 2 | 11 | 0           | 0 | 0 | 14 | 3 | 12 | 6.62E-24              | <b>6.65E-24</b> | 6.63E-24                | 6.45E-24        | 6.55E-24           | 0.52  | 0.38  | 3.01  | 1.59   |
| 1326.13490                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 1 | 12 | 0           | 0 | 0 | 14 | 2 | 13 | 2.11E-23              | <b>2.19E-23</b> | 2.25E-23                | 2.20E-23        | 2.10E-23           | 3.62  | -2.64 | -0.49 | 3.89   |
| 1326.33136                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 2 | 12 | 0           | 0 | 0 | 14 | 1 | 13 | 7.02E-24              | <b>7.37E-24</b> | 7.49E-24                | 7.38E-24        | 6.89E-24           | 4.77  | -1.58 | -0.12 | 6.55   |
| 1326.81572                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 2 | 7  | 0           | 1 | 0 | 10 | 3 | 8  | 6.90E-25              | <b>6.50E-25</b> | 6.71E-25                | 6.78E-25        | 6.77E-25           | -6.11 | -3.15 | -4.29 | -4.09  |
| 1327.57121                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 1 | 14 | 0           | 0 | 0 | 14 | 2 | 13 | 1.82E-23              | <b>1.77E-23</b> | 1.92E-23                | 1.78E-23        | 1.73E-23           | -2.65 | -8.40 | -0.45 | 2.43   |
| 1327.59896                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 0 | 14 | 0           | 0 | 0 | 14 | 1 | 13 | 6.05E-24              | <b>6.06E-24</b> | 6.40E-24                | 5.97E-24        | 5.72E-24           | 0.22  | -5.59 | 1.55  | 5.62   |
| 1327.73556                           | 0           | 2 | 0 | 4  | 1 | 4  | 0           | 1 | 0 | 5  | 2 | 3  | 1.51E-23              | <b>1.47E-23</b> | 1.45E-23                | 1.48E-23        | 1.47E-23           | -2.39 | 1.41  | -0.42 | 0.39   |
| 1327.84456                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 1 | 8  | 0           | 0 | 0 | 9  | 4 | 5  | 4.80E-23              | <b>4.95E-23</b> | 4.99E-23                | 4.92E-23        | 4.77E-23           | 3.04  | -0.79 | 0.64  | 3.71   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [16] | Upper state |   |   |    |   |    | Lower state |   |   |    |   |    | S(HITRAN2004)<br>[16] | S(Obs)<br>[7]   | S(LISA)<br>[60][61][62] | S(Toth)<br>[52] | S(Coudert)<br>[58] | A      | B     | C      | D      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|----|---|----|-------------|---|---|----|---|----|-----------------------|-----------------|-------------------------|-----------------|--------------------|--------|-------|--------|--------|
| 1328.43915                           | 0           | 2 | 0 | 11 | 1 | 10 | 0           | 1 | 0 | 12 | 2 | 11 | 2.30E-25              | <b>2.28E-25</b> | 2.36E-25                | 2.18E-25        | 2.57E-25           | -0.75  | -3.51 | 4.30   | -12.73 |
| 1328.83842                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 3 | 11 | 0           | 0 | 0 | 14 | 2 | 12 | 2.20E-24              | <b>2.15E-24</b> | 2.20E-24                | 2.17E-24        | 2.04E-24           | -2.47  | -2.33 | -1.12  | 5.13   |
| 1329.90473                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 3 | 5  | 0           | 0 | 0 | 9  | 4 | 6  | 4.60E-22              | <b>4.70E-22</b> | 4.56E-22                | 4.64E-22        | 4.65E-22           | 2.10   | 2.91  | 1.23   | 1.01   |
| 1330.32687                           | 0           | 2 | 0 | 11 | 2 | 10 | 0           | 1 | 0 | 12 | 1 | 11 | 7.63E-26              | <b>7.48E-26</b> | 7.84E-26                | 8.59E-26        |                    | -1.92  | -4.76 | -14.82 |        |
| 1331.79480                           | 0           | 2 | 0 | 8  | 2 | 6  | 0           | 1 | 0 | 9  | 3 | 7  | 6.33E-25              | <b>6.21E-25</b> | 6.06E-25                | 6.13E-25        | 5.54E-25           | -2.00  | 2.48  | 1.29   | 10.76  |
| 1332.75708                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 2 | 5  | 0           | 0 | 0 | 7  | 5 | 2  | 4.20E-23              | <b>4.23E-23</b> | 4.21E-23                | 4.24E-23        | 4.13E-23           | 0.91   | 0.54  | -0.13  | 2.45   |
| 1333.40550                           | 0           | 3 | 0 | 3  | 2 | 1  | 0           | 2 | 0 | 4  | 3 | 2  | 5.65E-26              | <b>5.26E-26</b> |                         | 3.07E-26        |                    | -7.43  |       | 41.62  |        |
| 1333.48911                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 1 | 4  | 0           | 0 | 0 | 4  | 4 | 1  | 2.80E-23              | <b>2.84E-23</b> | 2.82E-23                | 2.80E-23        | 2.79E-23           | 1.28   | 0.75  | 1.28   | 1.49   |
| 1333.69301                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 2 | 8  | 0           | 0 | 0 | 10 | 5 | 5  | 4.40E-24              | <b>4.43E-24</b> | 4.48E-24                | 4.36E-24        | 4.22E-24           | 0.69   | -1.17 | 1.52   | 4.80   |
| 1333.97245                           | 0           | 2 | 0 | 11 | 0 | 11 | 0           | 1 | 0 | 11 | 1 | 10 | 5.97E-25              | <b>5.95E-25</b> | 6.53E-25                | 6.25E-25        | 5.53E-25           | -0.39  | -9.82 | -5.08  | 7.11   |
| 1334.42305                           | 0           | 2 | 0 | 11 | 3 | 9  | 0           | 1 | 0 | 12 | 2 | 10 | 2.14E-26              | <b>2.12E-26</b> | 2.23E-26                |                 |                    | -0.71  | -5.09 |        |        |
| 1334.61035                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 4 | 10 | 0           | 0 | 0 | 14 | 3 | 11 | 7.02E-25              | <b>6.26E-25</b> | 6.73E-25                | 6.78E-25        | 6.26E-25           | -12.16 | -7.51 | -8.33  | 0.03   |
| 1336.66273                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 5 | 2  | 0           | 0 | 0 | 7  | 6 | 1  | 5.45E-21              | <b>5.47E-21</b> | 5.22E-21                | 5.45E-21        | 5.42E-21           | 0.48   | 4.70  | 0.40   | 0.88   |
| 1336.68992                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 5 | 1  | 0           | 0 | 0 | 7  | 6 | 2  | 1.82E-21              | <b>1.87E-21</b> | 1.74E-21                | 1.82E-21        | 1.80E-21           | 2.84   | 6.91  | 2.57   | 3.59   |
| 1337.29584                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 2 | 5  | 0           | 1 | 0 | 8  | 3 | 6  | 4.84E-24              | <b>4.65E-24</b> | 4.57E-24                | 4.76E-24        | 4.56E-24           | -4.17  | 1.66  | -2.43  | 1.87   |
| 1337.89792                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 0 | 12 | 0           | 0 | 0 | 13 | 1 | 13 | 9.80E-23              | <b>1.03E-22</b> | 9.93E-23                | 9.88E-23        | 9.50E-23           | 5.10   | 3.87  | 4.36   | 8.03   |
| 1337.90873                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 1 | 12 | 0           | 0 | 0 | 13 | 0 | 13 | 2.95E-22              | <b>2.98E-22</b> | 2.98E-22                | 2.97E-22        | 2.89E-22           | 1.08   | -0.06 | 0.24   | 2.83   |
| 1338.28630                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 0 | 7  | 0           | 0 | 0 | 7  | 3 | 4  | 1.77E-22              | <b>1.92E-22</b> | 1.84E-22                | 1.78E-22        | 1.79E-22           | 7.86   | 4.17  | 7.40   | 6.82   |
| 1339.14848                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 6 | 1  | 0           | 0 | 0 | 7  | 7 | 0  | 2.88E-21              | <b>2.90E-21</b> | 2.72E-21                | 3.03E-21        |                    | 0.69   | 6.17  | -4.48  |        |
| 1339.14877                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 6 | 0  | 0           | 0 | 0 | 7  | 7 | 1  | 9.60E-22              | <b>9.67E-22</b> | 9.07E-22                |                 |                    | 0.72   | 6.22  |        |        |
| 1339.51881                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 4 | 2  | 0           | 0 | 0 | 7  | 5 | 3  | 2.87E-21              | <b>2.96E-21</b> | 2.81E-21                | 2.86E-21        | 2.89E-21           | 2.91   | 5.17  | 3.31   | 2.37   |
| 1339.60222                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 2 | 10 | 0           | 0 | 0 | 13 | 3 | 11 | 8.80E-24              | <b>8.78E-24</b> | 8.75E-24                | 8.51E-24        | 8.42E-24           | -0.15  | 0.41  | 3.09   | 4.11   |
| 1339.90137                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 2 | 6  | 0           | 0 | 0 | 8  | 5 | 3  | 1.42E-23              | <b>1.41E-23</b> | 1.44E-23                | 1.40E-23        | 1.39E-23           | -0.61  | -1.67 | 0.81   | 1.66   |
| 1340.16673                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 3 | 4  | 0           | 0 | 0 | 8  | 4 | 5  | 4.03E-21              | <b>4.04E-21</b> | 4.03E-21                | 4.03E-21        | 4.13E-21           | 0.23   | 0.28  | 0.33   | -2.12  |
| 1340.47511                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 3 | 4  | 0           | 0 | 0 | 7  | 4 | 3  | 1.01E-20              | <b>1.03E-20</b> | 1.01E-20                | 1.03E-20        | 1.04E-20           | 2.32   | 2.13  | 0.39   | -0.68  |
| 1340.61957                           | 0           | 2 | 0 | 4  | 4 | 1  | 0           | 1 | 0 | 5  | 5 | 0  | 2.84E-23              | <b>2.75E-23</b> | 2.66E-23                | 2.74E-23        | 2.75E-23           | -3.29  | 3.47  | 0.49   | 0.02   |
| 1340.63504                           | 0           | 2 | 0 | 4  | 4 | 0  | 0           | 1 | 0 | 5  | 5 | 1  | 9.48E-24              | <b>9.59E-24</b> | 8.86E-24                | 9.44E-24        | 9.32E-24           | 1.14   | 7.62  | 1.56   | 2.79   |
| 1341.10070                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 2 | 7  | 0           | 0 | 0 | 9  | 5 | 4  | 2.93E-23              | <b>2.92E-23</b> | 2.97E-23                | 2.90E-23        | 2.86E-23           | -0.34  | -1.91 | 0.52   | 1.83   |
| 1343.67834                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 1 | 11 | 0           | 0 | 0 | 13 | 2 | 12 | 2.66E-23              | <b>2.75E-23</b> | 2.78E-23                | 2.74E-23        | 2.71E-23           | 3.57   | -0.97 | 0.49   | 1.76   |
| 1343.97966                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 1 | 9  | 0           | 1 | 0 | 11 | 2 | 10 | 2.36E-25              | <b>2.32E-25</b> | 2.39E-25                | 2.15E-25        | 2.22E-25           | -1.76  | -2.67 | 7.45   | 4.52   |
| 1344.06892                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 2 | 11 | 0           | 0 | 0 | 13 | 1 | 12 | 7.95E-23              | <b>8.27E-23</b> | 8.34E-23                | 8.19E-23        | 8.02E-23           | 3.85   | -0.86 | 0.91   | 3.03   |
| 1344.45741                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 0 | 10 | 0           | 1 | 0 | 11 | 1 | 11 | 8.35E-25              | <b>8.41E-25</b> | 8.43E-25                | 9.84E-25        | 7.53E-25           | 0.70   | -0.25 | -17.00 | 10.44  |
| 1344.59249                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 1 | 10 | 0           | 1 | 0 | 11 | 0 | 11 | 2.51E-24              | <b>2.51E-24</b> | 2.53E-24                | 2.52E-24        | 2.28E-24           | 0.04   | -0.92 | -0.56  | 8.94   |
| 1344.72464                           | 0           | 2 | 0 | 6  | 2 | 4  | 0           | 1 | 0 | 7  | 3 | 5  | 3.78E-24              | <b>3.58E-24</b> | 3.57E-24                | 3.73E-24        | 3.52E-24           | -5.71  | 0.08  | -4.32  | 1.61   |
| 1345.53917                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 3 | 10 | 0           | 0 | 0 | 13 | 2 | 11 | 2.63E-23              | <b>2.63E-23</b> | 2.59E-23                | 2.59E-23        | 2.54E-23           | 0.00   | 1.37  | 1.52   | 3.42   |
| 1346.00353                           | 0           | 2 | 0 | 4  | 3 | 2  | 0           | 1 | 0 | 5  | 4 | 1  | 4.24E-23              | <b>4.11E-23</b> | 3.99E-23                | 4.11E-23        | 4.11E-23           | -3.07  | 2.82  | 0.00   | 0.09   |
| 1347.03169                           | 0           | 2 | 0 | 4  | 3 | 1  | 0           | 1 | 0 | 5  | 4 | 2  | 1.42E-23              | <b>1.32E-23</b> | 1.34E-23                | 1.43E-23        | 1.38E-23           | -6.96  | -0.92 | -8.02  | -4.02  |
| 1347.46311                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 2 | 9  | 0           | 1 | 0 | 11 | 1 | 10 | 7.02E-25              | <b>6.78E-25</b> | 7.11E-25                | 7.46E-25        |                    | -3.54  | -4.93 | -10.03 |        |
| 1348.49217                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 0 | 5  | 0           | 1 | 0 | 5  | 3 | 2  | 1.19E-24              | <b>1.22E-24</b> | 1.23E-24                | 1.20E-24        | 1.11E-24           | 2.30   | -0.66 | 1.48   | 8.95   |
| 1348.75668                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 1 | 13 | 0           | 0 | 0 | 13 | 2 | 12 | 2.22E-23              | <b>2.10E-23</b> | 2.29E-23                | 2.16E-23        | 2.10E-23           | -5.23  | -8.93 | -2.61  | 0.09   |
| 1348.81558                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 0 | 13 | 0           | 0 | 0 | 13 | 1 | 12 | 6.66E-23              | <b>6.39E-23</b> | 6.88E-23                | 6.37E-23        | 6.27E-23           | -4.17  | -7.71 | 0.30   | 1.82   |
| 1349.37981                           | 0           | 1 | 0 | 3  | 0 | 3  | 0           | 0 | 0 | 4  | 3 | 2  | 2.15E-21              | <b>2.24E-21</b> | 2.21E-21                | 2.20E-21        | 2.24E-21           | 3.65   | 1.19  | 1.59   | -0.29  |
| 1351.57016                           | 0           | 2 | 0 | 4  | 2 | 3  | 0           | 1 | 0 | 5  | 3 | 2  | 4.32E-23              | <b>4.19E-23</b> | 4.11E-23                | 4.20E-23        | 4.22E-23           | -2.97  | 1.99  | -0.18  | -0.71  |
| 1352.34871                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 2 | 9  | 0           | 0 | 0 | 12 | 3 | 10 | 9.52E-23              | <b>9.65E-23</b> | 9.40E-23                | 9.32E-23        | 9.29E-23           | 1.31   | 2.60  | 3.39   | 3.67   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [16] | Upper state |   |   |    |   |    | Lower state |   |   |    |   |    | S(HITRAN2004)<br>[16] | S(Obs)<br>[7]   | S(LISA)<br>[60][61][62] | S(Toth)<br>[52] | S(Coudert)<br>[58] | A     | B      | C      | D      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|----|---|----|-------------|---|---|----|---|----|-----------------------|-----------------|-------------------------|-----------------|--------------------|-------|--------|--------|--------|
| 1352.89707                           | 0           | 1 | 0 | 16 | 2 | 15 | 0           | 0 | 0 | 16 | 3 | 14 | 4.64E-25              | <b>4.66E-25</b> | 5.18E-25                | 4.64E-25        | 4.88E-25           | 0.45  | -11.14 | 0.43   | -4.68  |
| 1353.03036                           | 0           | 1 | 0 | 16 | 1 | 15 | 0           | 0 | 0 | 16 | 2 | 14 | 1.55E-25              | <b>1.64E-25</b> | 1.73E-25                | 1.51E-25        | 1.96E-25           | 5.13  | -5.56  | 7.76   | -19.73 |
| 1353.86791                           | 0           | 3 | 0 | 5  | 1 | 4  | 0           | 2 | 0 | 6  | 2 | 5  | 2.80E-26              | <b>2.84E-26</b> | 3.06E-26                |                 |                    | 1.51  | -7.64  |        |        |
| 1354.84567                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 3 | 3  | 0           | 0 | 0 | 7  | 4 | 4  | 3.62E-21              | <b>3.57E-21</b> | 3.60E-21                | 3.56E-21        | 3.70E-21           | -1.17 | -0.78  | 0.36   | -3.58  |
| 1355.20992                           | 0           | 2 | 0 | 5  | 2 | 3  | 0           | 1 | 0 | 6  | 3 | 4  | 2.47E-23              | <b>2.42E-23</b> | 2.34E-23                | 2.41E-23        | 2.38E-23           | -1.81 | 3.43   | 0.46   | 1.91   |
| 1356.03849                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 1 | 10 | 0           | 1 | 0 | 10 | 2 | 9  | 1.66E-24              | <b>1.52E-24</b> | 1.79E-24                | 1.71E-24        | 1.60E-24           | -9.26 | -17.63 | -12.69 | -5.24  |
| 1356.15551                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 4 | 9  | 0           | 0 | 0 | 13 | 3 | 10 | 8.43E-24              | <b>7.68E-24</b> | 7.95E-24                | 7.79E-24        | 7.67E-24           | -9.78 | -3.45  | -1.43  | 0.14   |
| 1357.20568                           | 0           | 2 | 0 | 10 | 0 | 10 | 0           | 1 | 0 | 10 | 1 | 9  | 5.57E-25              | <b>5.57E-25</b> | 6.00E-25                | 5.61E-25        |                    | -0.04 | -7.85  | -0.81  |        |
| 1358.02655                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 0 | 11 | 0           | 0 | 0 | 12 | 1 | 12 | 9.24E-22              | <b>9.21E-22</b> | 9.31E-22                | 9.12E-22        | 9.01E-22           | -0.26 | -1.01  | 1.02   | 2.17   |
| 1358.04986                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 1 | 11 | 0           | 0 | 0 | 12 | 0 | 12 | 3.08E-22              | <b>3.03E-22</b> | 3.10E-22                | 3.11E-22        | 2.98E-22           | -1.69 | -2.49  | -2.75  | 1.44   |
| 1358.57848                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 1 | 7  | 0           | 0 | 0 | 8  | 4 | 4  | 5.69E-23              | <b>5.96E-23</b> | 5.87E-23                | 5.73E-23        | 5.71E-23           | 4.62  | 1.50   | 3.92   | 4.20   |
| 1358.72201                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 1 | 8  | 0           | 1 | 0 | 10 | 2 | 9  | 1.97E-24              | <b>2.04E-24</b> | 1.96E-24                | 1.92E-24        | 1.81E-24           | 3.38  | 4.02   | 5.97   | 11.51  |
| 1361.01363                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 1 | 10 | 0           | 0 | 0 | 12 | 2 | 11 | 2.72E-22              | <b>2.96E-22</b> | 2.81E-22                | 2.66E-22        | 2.80E-22           | 7.89  | 4.88   | 10.02  | 5.42   |
| 1361.08256                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 5 | 1  | 0           | 0 | 0 | 6  | 6 | 0  | 4.20E-21              | <b>4.37E-21</b> | 4.04E-21                | 4.24E-21        |                    | 3.89  | 7.57   | 2.97   |        |
| 1361.08511                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 5 | 0  | 0           | 0 | 0 | 6  | 6 | 1  | 1.27E-20              | <b>1.32E-20</b> | 1.21E-20                | 1.29E-20        |                    | 3.79  | 8.18   | 2.27   |        |
| 1361.79623                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 2 | 10 | 0           | 0 | 0 | 12 | 1 | 11 | 9.08E-23              | <b>9.58E-23</b> | 9.36E-23                | 9.32E-23        | 9.16E-23           | 5.23  | 2.28   | 2.69   | 4.40   |
| 1362.60374                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 2 | 4  | 0           | 0 | 0 | 6  | 3 | 3  | 6.05E-21              | <b>6.34E-21</b> | 6.18E-21                | 6.17E-21        | 6.34E-21           | 4.57  | 2.60   | 2.70   | 0.00   |
| 1363.06252                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 3 | 9  | 0           | 0 | 0 | 12 | 2 | 10 | 3.13E-23              | <b>3.20E-23</b> | 3.06E-23                |                 |                    | 2.19  | 4.41   |        |        |
| 1363.06264                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 4 | 2  | 0           | 0 | 0 | 6  | 5 | 1  | 6.70E-21              | <b>6.85E-21</b> | 6.55E-21                |                 | 6.76E-21           | 2.19  | 4.41   |        | 1.30   |
| 1363.26375                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 4 | 1  | 0           | 0 | 0 | 6  | 5 | 2  | 2.01E-20              | <b>2.03E-20</b> | 1.97E-20                | 1.93E-20        | 2.02E-20           | 1.08  | 3.30   | 5.02   | 0.64   |
| 1363.32977                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 2 | 8  | 0           | 0 | 0 | 11 | 3 | 9  | 1.03E-22              | <b>1.04E-22</b> | 1.01E-22                | 1.02E-22        | 1.02E-22           | 1.05  | 2.40   | 1.53   | 1.24   |
| 1363.56411                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 0 | 9  | 0           | 1 | 0 | 10 | 1 | 10 | 6.41E-24              | <b>6.38E-24</b> | 6.41E-24                | 6.41E-24        | 6.12E-24           | -0.53 | -0.48  | -0.46  | 4.08   |
| 1363.83410                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 1 | 9  | 0           | 1 | 0 | 10 | 0 | 10 | 2.13E-24              | <b>2.04E-24</b> | 2.14E-24                | 2.16E-24        | 1.97E-24           | -4.76 | -4.85  | -6.03  | 3.25   |
| 1365.09471                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 2 | 8  | 0           | 1 | 0 | 10 | 1 | 9  | 6.50E-25              | <b>6.24E-25</b> | 6.46E-25                | 6.62E-25        | 6.05E-25           | -4.10 | -3.48  | -6.11  | 2.98   |
| 1366.27423                           | 0           | 3 | 0 | 2  | 1 | 2  | 0           | 2 | 0 | 3  | 2 | 1  | 5.65E-26              | <b>5.40E-26</b> | 7.39E-26                | 5.85E-26        |                    | -4.69 | -37.00 | -8.43  |        |
| 1368.62750                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 3 | 3  | 0           | 0 | 0 | 6  | 4 | 2  | 8.43E-21              | <b>8.78E-21</b> | 8.42E-21                | 8.47E-21        | 8.66E-21           | 3.96  | 4.12   | 3.52   | 1.37   |
| 1369.53145                           | 0           | 2 | 0 | 4  | 2 | 2  | 0           | 1 | 0 | 5  | 3 | 3  | 1.64E-23              | <b>1.56E-23</b> | 1.57E-23                | 1.63E-23        | 1.60E-23           | -5.18 | -0.31  | -4.41  | -2.49  |
| 1369.82768                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 1 | 12 | 0           | 0 | 0 | 12 | 2 | 11 | 2.22E-22              | <b>2.13E-22</b> | 2.26E-22                | 2.12E-22        | 2.10E-22           | -4.19 | -6.31  | 0.28   | 1.36   |
| 1369.95301                           | 0           | 1 | 0 | 12 | 0 | 12 | 0           | 0 | 0 | 12 | 1 | 11 | 7.38E-23              | <b>7.13E-23</b> | 7.54E-23                | 7.10E-23        | 6.97E-23           | -3.56 | -5.78  | 0.41   | 2.30   |
| 1370.57365                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 2 | 14 | 0           | 0 | 0 | 15 | 3 | 13 | 7.46E-25              | <b>7.34E-25</b> | 8.09E-25                | 7.46E-25        | 6.83E-25           | -1.70 | -10.30 | -1.66  | 6.91   |
| 1370.83538                           | 0           | 1 | 0 | 15 | 1 | 14 | 0           | 0 | 0 | 15 | 2 | 13 | 2.24E-24              | <b>2.10E-24</b> | 2.43E-24                | 2.28E-24        | 2.18E-24           | -6.81 | -16.06 | -8.77  | -4.09  |
| 1370.89248                           | 0           | 2 | 0 | 3  | 3 | 1  | 0           | 1 | 0 | 4  | 4 | 0  | 2.60E-23              | <b>2.55E-23</b> | 2.46E-23                | 2.60E-23        | 2.53E-23           | -2.06 | 3.39   | -1.98  | 0.61   |
| 1371.03948                           | 0           | 2 | 0 | 3  | 3 | 0  | 0           | 1 | 0 | 4  | 4 | 1  | 7.83E-23              | <b>7.74E-23</b> | 7.39E-23                | 7.79E-23        | 7.62E-23           | -1.06 | 4.53   | -0.60  | 1.55   |
| 1371.61421                           | 0           | 1 | 0 | 13 | 5 | 9  | 0           | 0 | 0 | 14 | 4 | 10 | 1.93E-25              | <b>1.97E-25</b> | 1.73E-25                | 1.85E-25        |                    | 2.28  | 12.57  | 6.23   |        |
| 1372.26982                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 2 | 7  | 0           | 0 | 0 | 10 | 3 | 8  | 8.92E-22              | <b>9.05E-22</b> | 8.84E-22                | 8.79E-22        | 8.98E-22           | 1.50  | 2.36   | 2.89   | 0.84   |
| 1373.76950                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 3 | 2  | 0           | 0 | 0 | 6  | 4 | 3  | 2.58E-20              | <b>2.66E-20</b> | 2.58E-20                |                 | 2.65E-20           | 3.15  | 3.34   |        | 0.56   |
| 1375.08613                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 1 | 4  | 0           | 0 | 0 | 5  | 2 | 3  | 1.40E-20              | <b>1.45E-20</b> | 1.45E-20                | 1.43E-20        | 1.49E-20           | 3.72  | -0.28  | 1.38   | -2.76  |
| 1377.08997                           | 0           | 2 | 0 | 3  | 1 | 3  | 0           | 1 | 0 | 4  | 2 | 2  | 1.31E-23              | <b>1.30E-23</b> | 1.27E-23                | 1.32E-23        | 1.29E-23           | -0.79 | 2.45   | -1.79  | 0.91   |
| 1377.97923                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 0 | 10 | 0           | 0 | 0 | 11 | 1 | 11 | 8.75E-22              | <b>8.68E-22</b> | 8.81E-22                | 8.67E-22        | 8.77E-22           | -0.88 | -1.50  | 0.09   | -1.06  |
| 1378.01006                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 1 | 9  | 0           | 0 | 0 | 11 | 2 | 10 | 2.80E-22              | <b>2.91E-22</b> | 2.86E-22                | 2.74E-22        | 2.87E-22           | 3.80  | 1.70   | 5.86   | 1.43   |
| 1378.02963                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 1 | 10 | 0           | 0 | 0 | 11 | 0 | 11 | 2.63E-21              | <b>2.67E-21</b> | 2.64E-21                | 2.54E-21        | 2.59E-21           | 1.52  | 0.92   | 4.74   | 2.94   |
| 1378.33736                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 1 | 9  | 0           | 1 | 0 | 9  | 2 | 8  | 1.41E-24              | <b>1.38E-24</b> | 1.50E-24                | 1.45E-24        | 1.30E-24           | -2.00 | -8.07  | -4.75  | 5.80   |
| 1378.49308                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 1 | 6  | 0           | 0 | 0 | 7  | 4 | 3  | 3.82E-22              | <b>3.80E-22</b> | 3.92E-22                | 3.83E-22        | 3.87E-22           | -0.55 | -3.00  | -0.71  | -1.84  |
| 1378.96664                           | 0           | 2 | 0 | 12 | 1 | 11 | 0           | 1 | 0 | 12 | 2 | 10 | 4.16E-26              | <b>3.90E-26</b> | 4.41E-26                |                 |                    | -6.64 | -12.97 |        |        |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [16] | Upper state |   |   |    |   |    | Lower state |   |   |    |   |    | S(HITRAN2004)<br>[16] | S(Obs)<br>[7]   | S(LISA)<br>[60][61][62] | S(Toth)<br>[52] | S(Coudert)<br>[58] | A      | B     | C     | D     |
|--------------------------------------|-------------|---|---|----|---|----|-------------|---|---|----|---|----|-----------------------|-----------------|-------------------------|-----------------|--------------------|--------|-------|-------|-------|
| 1379.58042                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 2 | 9  | 0           | 0 | 0 | 11 | 1 | 10 | 8.39E-22              | <b>8.48E-22</b> | 8.56E-22                |                 |                    | 1.06   | -0.90 |       |       |
| 1379.58165                           | 0           | 1 | 0 | 8  | 2 | 6  | 0           | 0 | 0 | 9  | 3 | 7  | 7.83E-22              | <b>7.91E-22</b> | 7.82E-22                |                 |                    | 1.01   | 1.15  |       |       |
| 1379.74521                           | 0           | 1 | 0 | 2  | 0 | 2  | 0           | 0 | 0 | 3  | 3 | 1  | 2.73E-22              | <b>2.81E-22</b> | 2.81E-22                | 2.79E-22        | 2.88E-22           | 3.02   | 0.07  | 0.78  | -2.49 |
| 1380.23159                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 0 | 6  | 0           | 0 | 0 | 6  | 3 | 3  | 2.12E-22              | <b>2.14E-22</b> | 2.20E-22                | 2.11E-22        | 2.17E-22           | 0.80   | -2.86 | 1.17  | -1.83 |
| 1380.60008                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 1 | 9  | 0           | 0 | 0 | 8  | 4 | 4  | 1.72E-25              | <b>1.30E-25</b> | 1.27E-25                | 1.21E-25        |                    | -32.74 | 1.93  | 6.78  |       |
| 1380.62381                           | 0           | 2 | 0 | 9  | 0 | 9  | 0           | 1 | 0 | 9  | 1 | 8  | 4.32E-24              | <b>4.38E-24</b> | 4.56E-24                | 4.52E-24        | 4.09E-24           | 1.37   | -4.25 | -3.27 | 6.47  |
| 1381.53142                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 4 | 8  | 0           | 0 | 0 | 12 | 3 | 9  | 9.72E-24              | <b>8.85E-24</b> | 9.00E-24                | 9.00E-24        | 8.86E-24           | -9.84  | -1.68 | -1.68 | -0.11 |
| 1381.62677                           | 0           | 2 | 0 | 3  | 0 | 3  | 0           | 1 | 0 | 3  | 3 | 0  | 6.29E-25              | <b>6.35E-25</b> | 6.30E-25                | 5.89E-25        | 6.65E-25           | 0.82   | 0.69  | 7.17  | -4.73 |
| 1381.76359                           | 0           | 2 | 0 | 3  | 2 | 2  | 0           | 1 | 0 | 4  | 3 | 1  | 2.87E-23              | <b>2.73E-23</b> | 2.74E-23                | 2.82E-23        | 2.80E-23           | -4.87  | -0.30 | -3.11 | -2.38 |
| 1382.06194                           | 0           | 1 | 0 | 10 | 3 | 8  | 0           | 0 | 0 | 11 | 2 | 9  | 2.97E-22              | <b>2.99E-22</b> | 2.88E-22                | 2.86E-22        | 2.88E-22           | 0.45   | 3.53  | 4.24  | 3.53  |
| 1382.42327                           | 0           | 2 | 0 | 8  | 0 | 8  | 0           | 1 | 0 | 9  | 1 | 9  | 4.96E-24              | <b>4.80E-24</b> | 4.91E-24                | 5.00E-24        | 4.73E-24           | -3.36  | -2.18 | -4.16 | 1.45  |
| 1382.97004                           | 0           | 2 | 0 | 8  | 1 | 8  | 0           | 1 | 0 | 9  | 0 | 9  | 1.48E-23              | <b>1.45E-23</b> | 1.47E-23                | 1.45E-23        | 1.43E-23           | -2.20  | -1.44 | -0.06 | 1.05  |
| 1383.65343                           | 0           | 2 | 0 | 8  | 2 | 7  | 0           | 1 | 0 | 9  | 1 | 8  | 4.76E-24              | <b>4.44E-24</b> | 4.70E-24                | 4.68E-24        | 4.55E-24           | -7.22  | -5.84 | -5.41 | -2.58 |
| 1384.17033                           | 0           | 2 | 0 | 7  | 1 | 6  | 0           | 1 | 0 | 8  | 2 | 7  | 1.09E-23              | <b>1.07E-23</b> | 1.06E-23                | 1.08E-23        | 1.06E-23           | -2.15  | 0.75  | -0.94 | 1.40  |
| 1386.47659                           | 0           | 1 | 0 | 7  | 2 | 5  | 0           | 0 | 0 | 8  | 3 | 6  | 5.73E-21              | <b>6.04E-21</b> | 5.76E-21                | 5.77E-21        | 5.94E-21           | 5.20   | 4.75  | 4.53  | 1.77  |
| 1387.52290                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 4 | 1  | 0           | 0 | 0 | 5  | 5 | 0  | 4.16E-20              | <b>4.13E-20</b> | 4.08E-20                | 4.07E-20        | 4.19E-20           | -0.78  | 1.24  | 1.41  | -1.41 |
| 1387.54560                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 4 | 0  | 0           | 0 | 0 | 5  | 5 | 1  | 1.39E-20              | <b>1.33E-20</b> | 1.36E-20                | 1.43E-20        | 1.41E-20           | -4.59  | -2.26 | -7.60 | -6.02 |
| 1388.34834                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 2 | 13 | 0           | 0 | 0 | 14 | 3 | 12 | 9.84E-24              | <b>9.66E-24</b> | 1.05E-23                | 9.92E-24        | 9.56E-24           | -1.89  | -8.21 | -2.72 | 1.05  |
| 1388.48352                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 0 | 9  | 0           | 0 | 0 | 10 | 1 | 10 | 1.67E-22              | <b>1.62E-22</b> | 1.70E-22                | 1.68E-22        | 1.68E-22           | -3.28  | -5.01 | -3.90 | -4.14 |
| 1388.86416                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 1 | 9  | 0           | 0 | 0 | 10 | 0 | 10 | 3.29E-24              | <b>3.38E-24</b> | 3.50E-24                | 3.33E-24        | 3.18E-24           | 2.58   | -3.55 | 1.39  | 5.72  |
| 1390.52185                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 1 | 5  | 0           | 0 | 0 | 6  | 4 | 2  | 3.59E-22              | <b>3.78E-22</b> | 3.65E-22                | 3.61E-22        | 3.65E-22           | 5.08   | 3.57  | 4.55  | 3.44  |
| 1390.75833                           | 0           | 1 | 0 | 14 | 1 | 13 | 0           | 0 | 0 | 14 | 2 | 12 | 2.25E-22              | <b>2.22E-22</b> | 2.27E-22                | 2.16E-22        | 2.15E-22           | -1.40  | -2.30 | 2.66  | 3.33  |
| 1391.02642                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 2 | 3  | 0           | 0 | 0 | 5  | 3 | 2  | 6.74E-22              | <b>6.57E-22</b> | 6.82E-22                | 6.37E-22        | 6.42E-22           | -2.67  | -3.90 | 2.97  | 2.24  |
| 1394.44585                           | 0           | 1 | 0 | 5  | 1 | 4  | 0           | 0 | 0 | 5  | 4 | 1  | 2.33E-21              | <b>2.27E-21</b> | 2.36E-21                | 2.14E-21        | 2.38E-21           | -2.78  | -4.28 | 5.60  | -5.12 |
| 1394.47451                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 1 | 11 | 0           | 0 | 0 | 11 | 2 | 10 | 5.41E-20              | <b>5.14E-20</b> | 5.38E-20                | 5.45E-20        | 5.44E-20           | -5.23  | -4.65 | -6.01 | -5.85 |
| 1394.49636                           | 0           | 1 | 0 | 11 | 0 | 11 | 0           | 0 | 0 | 11 | 1 | 10 | 4.36E-21              | <b>4.44E-21</b> | 4.40E-21                | 4.24E-21        | 4.50E-21           | 1.74   | 0.77  | 4.44  | -1.31 |
| 1395.80258                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 1 | 8  | 0           | 0 | 0 | 10 | 2 | 9  | 1.80E-20              | <b>1.88E-20</b> | 1.80E-20                | 1.78E-20        | 1.87E-20           | 4.10   | 4.05  | 5.17  | 0.48  |
| 1397.57543                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 3 | 2  | 0           | 0 | 0 | 5  | 4 | 1  | 7.75E-22              | <b>7.89E-22</b> | 7.82E-22                | 7.75E-22        | 7.92E-22           | 1.80   | 0.86  | 1.80  | -0.35 |
| 1397.73297                           | 0           | 1 | 0 | 6  | 2 | 4  | 0           | 0 | 0 | 7  | 3 | 5  | 6.78E-21              | <b>7.06E-21</b> | 6.80E-21                | 6.74E-21        | 6.77E-21           | 4.01   | 3.68  | 4.57  | 4.13  |
| 1397.84344                           | 0           | 1 | 0 | 4  | 3 | 1  | 0           | 0 | 0 | 5  | 4 | 2  | 2.26E-21              | <b>2.28E-21</b> | 2.27E-21                | 2.22E-21        | 2.27E-21           | 0.83   | 0.53  | 2.59  | 0.57  |
| 1399.20425                           | 0           | 1 | 0 | 9  | 2 | 8  | 0           | 0 | 0 | 10 | 1 | 9  | 4.64E-20              | <b>4.93E-20</b> | 4.76E-20                | 4.64E-20        | 4.89E-20           | 5.81   | 3.35  | 5.81  | 0.73  |



## **2 $H_2^{16}O - 8000 - 9400 \text{ cm}^{-1} : \text{Intensités}$**

Matériel supplémentaire à l'article :

---

Intensity measurements of  $H_2^{16}O$  lines in the spectral region 8000 – 9350  $\text{cm}^{-1}$ .

C. Oudot, Le Wang, X. Thomas, P. Von der Heyden, L. Daumont, L. Régalia.

J. Mol. Spectrosc., 2010, 262 : 22-29

---

Liste des intensités des transitions d' $H_2^{16}O$  dans la région spectrale de 8000 à 9350  $\text{cm}^{-1}$ , listées et attribuées dans HITRAN2008. Comparaison entre les intensités expérimentales et les intensités listées dans HITRAN2008.

- Position : ( $\text{cm}^{-1}$ ) reprises d'HITRAN2008 [15]
- Attribution des transitions : S. Mikhailenko
- S(Obs) : intensités expérimentales  $\text{cm}/\text{molec}$  (296 K)
- S(HITRAN2008) : intensités listées dans HITRAN2008 [15]  $\text{cm}/\text{molec}$  (296 K)
- $A = \frac{S(\text{Obs}) - S(\text{HITRAN2008})}{S(\text{HITRAN2008})}$  (%)

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 8057.86200                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3  | 2.55E-025 | 2.60E-025 | -2%  |
| 8060.13240                           | 1           | 3 | 0 | 9           | 0 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 1 | 10 | 4.57E-025 | 4.54E-025 | 1%   |
| 8061.29860                           | 1           | 3 | 0 | 9           | 1 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 0 | 10 | 1.54E-025 | 1.67E-025 | -8%  |
| 8073.44820                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3  | 9.09E-026 | 9.53E-026 | -5%  |
| 8073.53050                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 1.35E-025 | 1.60E-025 | -16% |
| 8082.83550                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3  | 2.56E-025 | 2.16E-025 | 19%  |
| 8084.49270                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 0 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 9  | 3.21E-025 | 2.87E-025 | 12%  |
| 8085.86690                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 0 | 9  | 9.66E-025 | 9.12E-025 | 6%   |
| 8086.19420                           | 0           | 3 | 1 | 12          | 0 | 12 | 0               | 0                     | 0 | 13 | 0 | 13 | 5.32E-026 | 5.56E-026 | -4%  |
| 8091.81730                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6  | 2.05E-025 | 1.91E-025 | 7%   |
| 8095.22403                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 0 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4  | 6.91E-026 | 1.08E-025 | -36% |
| 8095.59850                           | 1           | 3 | 0 | 9           | 0 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 8  | 4.25E-026 | 4.67E-026 | -9%  |
| 8096.32720                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4  | 2.05E-025 | 2.17E-025 | -6%  |
| 8100.39580                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5  | 1.40E-025 | 1.35E-025 | 4%   |
| 8107.69130                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 5 | 4  | 4.12E-026 | 3.85E-026 | 7%   |
| 8107.69130                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 0 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 1.83E-024 | 1.71E-024 | 7%   |
| 8108.31060                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 8  | 7.15E-026 | 7.39E-026 | -3%  |
| 8108.82830                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2  | 2.52E-025 | 2.90E-025 | -13% |
| 8109.81980                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 0 | 8  | 6.15E-025 | 5.96E-025 | 3%   |
| 8111.45370                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2  | 1.02E-024 | 9.24E-025 | 10%  |
| 8112.22400                           | 0           | 3 | 1 | 11          | 1 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 12 | 1 | 12 | 1.53E-025 | 1.39E-025 | 10%  |
| 8112.68240                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4  | 7.67E-025 | 6.96E-025 | 10%  |
| 8118.14380                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7  | 6.71E-025 | 6.89E-025 | -3%  |
| 8118.56720                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 2  | 1.47E-025 | 1.35E-025 | 9%   |
| 8120.43500                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7  | 1.04E-025 | 9.45E-026 | 10%  |
| 8121.86120                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3  | 4.95E-025 | 4.77E-025 | 4%   |
| 8124.03520                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 8  | 3.17E-025 | 3.11E-025 | 2%   |
| 8127.81820                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6  | 3.42E-025 | 3.07E-025 | 11%  |
| 8129.12740                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3  | 4.35E-025 | 4.00E-025 | 9%   |
| 8129.50080                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 0 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7  | 9.73E-025 | 9.24E-025 | 5%   |
| 8132.84410                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1  | 7.61E-026 | 1.26E-025 | -40% |
| 8133.16240                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7  | 3.19E-024 | 2.91E-024 | 10%  |
| 8134.17510                           | 0           | 5 | 0 | 6           | 6 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 2  | 1.67E-025 | 1.68E-025 | -1%  |
| 8137.19550                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5  | 1.59E-024 | 1.46E-024 | 9%   |
| 8137.89130                           | 0           | 3 | 1 | 10          | 0 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 0 | 11 | 4.28E-025 | 3.83E-025 | 12%  |
| 8137.96600                           | 0           | 3 | 1 | 10          | 1 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 1 | 11 | 1.38E-025 | 1.19E-025 | 16%  |
| 8140.59160                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 3.20E-025 | 3.01E-025 | 6%   |
| 8143.47860                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1  | 6.54E-025 | 6.18E-025 | 6%   |
| 8146.18940                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1  | 9.53E-025 | 8.66E-025 | 10%  |
| 8147.02680                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 2  | 3.30E-025 | 3.21E-025 | 3%   |
| 8147.64130                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 0 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6  | 3.11E-025 | 2.83E-025 | 10%  |
| 8147.68850                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4  | 7.48E-025 | 6.90E-025 | 8%   |
| 8149.07590                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 0 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3  | 5.18E-025 | 4.46E-025 | 16%  |
| 8149.60620                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 1.98E-024 | 1.83E-024 | 8%   |
| 8149.64330                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 0 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6  | 4.50E-024 | 4.05E-024 | 11%  |
| 8151.90230                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1  | 1.80E-024 | 1.60E-024 | 13%  |
| 8155.29270                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2  | 3.66E-025 | 3.39E-025 | 8%   |
| 8156.09520                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6  | 1.58E-024 | 1.44E-024 | 10%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A         |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|-----------|-----------|------|
| 8160.40640                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 1 | 2 | 0 0 0           | 4 2 3                 | 2.92E-024 | 2.62E-024 | 11%  |
| 8162.67650                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 0 | 9 | 0 0 0           | 10 0 10               | 3.43E-025 | 3.26E-025 | 5%   |
| 8162.92890                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 1 | 9 | 0 0 0           | 10 1 10               | 1.02E-024 | 8.92E-025 | 14%  |
| 8166.49400                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0 0 0           | 6 2 5                 | 5.15E-025 | 4.83E-025 | 7%   |
| 8166.77270                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 2 | 5 | 0 0 0           | 7 1 6                 | 1.04E-024 | 9.48E-025 | 10%  |
| 8168.04000                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 0 | 4 | 0 0 0           | 5 1 5                 | 2.01E-024 | 1.78E-024 | 13%  |
| 8171.53310                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 2 | 1 | 0 0 0           | 3 3 0                 | 3.04E-024 | 2.75E-024 | 11%  |
| 8172.51140                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 1 | 0 0 0           | 4 4 0                 | 5.82E-025 | 4.85E-025 | 20%  |
| 8172.54700                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 2 | 0 | 0 0 0           | 3 3 1                 | 9.53E-025 | 9.42E-025 | 1%   |
| 8172.62930                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 0 | 0 0 0           | 4 4 1                 | 1.62E-024 | 1.45E-024 | 12%  |
| 8173.07570                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 0 | 6 | 0 0 0           | 6 1 5                 | 2.32E-025 | 2.10E-025 | 10%  |
| 8175.94160                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 1 | 1 | 0 0 0           | 3 2 2                 | 1.17E-024 | 1.08E-024 | 8%   |
| 8176.30260                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 1 | 2 | 0 0 0           | 4 3 1                 | 7.77E-026 | 1.02E-025 | -24% |
| 8179.02330                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 1 | 4 | 0 0 0           | 5 0 5                 | 6.19E-024 | 5.56E-024 | 11%  |
| 8184.76510                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 0 | 3 | 0 0 0           | 4 1 4                 | 6.82E-024 | 6.04E-024 | 13%  |
| 8186.53970                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 0 | 8 | 0 0 0           | 9 0 9                 | 2.20E-024 | 1.96E-024 | 12%  |
| 8186.58230                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 1 | 5 | 0 0 0           | 5 2 4                 | 3.26E-025 | 2.88E-025 | 13%  |
| 8187.00750                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 1 | 8 | 0 0 0           | 9 1 9                 | 7.60E-025 | 7.19E-025 | 6%   |
| 8187.12980                           | 1           | 3 | 0 | 1           | 1 | 1 | 0 0 0           | 2 2 0                 | 1.07E-024 | 9.68E-025 | 11%  |
| 8187.37130                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 4 | 0 | 0 0 0           | 5 5 1                 | 2.19E-025 | 1.99E-025 | 10%  |
| 8187.37130                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 4 | 1 | 0 0 0           | 5 5 0                 | 6.58E-025 | 6.00E-025 | 10%  |
| 8192.17460                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 4 | 0 0 0           | 6 1 5                 | 5.35E-025 | 4.43E-025 | 21%  |
| 8194.46560                           | 1           | 3 | 0 | 1           | 1 | 0 | 0 0 0           | 2 2 1                 | 3.95E-024 | 3.49E-024 | 13%  |
| 8194.59550                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 0 | 3 | 0 0 0           | 4 2 2                 | 2.96E-025 | 2.53E-025 | 17%  |
| 8194.83040                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 1 | 8 | 0 0 0           | 10 1 9                | 1.57E-025 | 1.30E-025 | 21%  |
| 8195.42180                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0 0 0           | 3 3 0                 | 9.12E-026 | 1.14E-025 | -20% |
| 8196.99690                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 2 | 7 | 0 0 0           | 8 3 6                 | 1.14E-025 | 1.21E-025 | -6%  |
| 8197.43810                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 0 | 5 | 0 0 0           | 5 1 4                 | 1.47E-024 | 1.42E-024 | 4%   |
| 8200.90370                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 0 | 2 | 0 0 0           | 3 1 3                 | 2.21E-024 | 1.95E-024 | 13%  |
| 8201.05100                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 2 | 8 | 0 0 0           | 10 2 9                | 4.74E-025 | 4.22E-025 | 12%  |
| 8202.55480                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 1 | 3 | 0 0 0           | 4 0 4                 | 2.26E-024 | 2.01E-024 | 12%  |
| 8202.74380                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 2 | 6 | 0 0 0           | 9 2 7                 | 6.18E-025 | 5.40E-025 | 14%  |
| 8204.00870                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 1 | 4 | 0 0 0           | 4 2 3                 | 1.49E-024 | 1.34E-024 | 11%  |
| 8209.11020                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 1 | 7 | 0 0 0           | 9 1 8                 | 1.11E-024 | 1.05E-024 | 6%   |
| 8209.36220                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 0 | 7 | 0 0 0           | 8 0 8                 | 1.51E-024 | 1.37E-024 | 10%  |
| 8210.55280                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 1 | 7 | 0 0 0           | 8 1 8                 | 4.53E-024 | 4.21E-024 | 8%   |
| 8212.17630                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 0 | 0 0 0           | 6 6 1                 | 1.90E-025 | 1.46E-025 | 30%  |
| 8212.17630                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 1 | 0 0 0           | 6 6 0                 | 6.36E-026 | 4.87E-026 | 31%  |
| 8216.72960                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 3 | 5 | 0 0 0           | 9 3 6                 | 3.65E-025 | 3.34E-025 | 9%   |
| 8217.87880                           | 1           | 3 | 0 | 1           | 0 | 1 | 0 0 0           | 2 1 2                 | 5.81E-024 | 5.15E-024 | 13%  |
| 8218.30590                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 1 | 3 | 0 0 0           | 3 2 2                 | 6.26E-025 | 5.76E-025 | 9%   |
| 8219.16890                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 0 | 4 | 0 0 0           | 4 1 3                 | 9.83E-025 | 8.56E-025 | 15%  |
| 8219.39430                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 2 | 7 | 0 0 0           | 9 2 8                 | 3.86E-025 | 3.65E-025 | 6%   |
| 8220.80810                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 3 | 0 0 0           | 5 1 4                 | 1.56E-024 | 1.40E-024 | 11%  |
| 8221.10780                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 0 | 8 | 0 0 0           | 8 2 7                 | 1.51E-025 | 1.46E-025 | 3%   |
| 8221.33630                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 1 | 6 | 0 0 0           | 7 2 5                 | 5.51E-025 | 5.15E-025 | 7%   |
| 8222.00790                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 2 | 5 | 0 0 0           | 6 3 4                 | 5.48E-025 | 4.80E-025 | 14%  |
| 8222.03990                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 1 | 6 | 0 0 0           | 8 1 7                 | 7.40E-025 | 6.70E-025 | 10%  |
| 8227.29690                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 1 | 2 | 0 0 0           | 3 0 3                 | 5.49E-024 | 5.17E-024 | 6%   |
| 8229.15740                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 1 | 2 | 0 0 0           | 2 2 1                 | 1.67E-024 | 1.52E-024 | 10%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 8230.25410                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 3 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 3 | 8 | 2.04E-025 | 1.90E-025 | 7%   |
| 8231.00060                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7 | 8.11E-024 | 7.23E-024 | 12%  |
| 8231.11060                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3 | 2.96E-025 | 2.79E-025 | 6%   |
| 8231.49200                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1 | 8.86E-025 | 8.23E-025 | 8%   |
| 8231.66390                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 1.29E-024 | 1.18E-024 | 9%   |
| 8233.18480                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7 | 2.72E-024 | 2.41E-024 | 13%  |
| 8234.46950                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6 | 4.67E-024 | 4.22E-024 | 11%  |
| 8234.65400                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4 | 4.29E-025 | 3.77E-025 | 14%  |
| 8236.23790                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2 | 4.88E-024 | 4.41E-024 | 11%  |
| 8236.83880                           | 1           | 3 | 0 | 0           | 0 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 1 | 1.40E-024 | 1.29E-024 | 9%   |
| 8237.74870                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2 | 9.61E-025 | 9.36E-025 | 3%   |
| 8237.99410                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7 | 2.43E-024 | 2.20E-024 | 10%  |
| 8238.66050                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 2.37E-024 | 2.11E-024 | 12%  |
| 8242.10160                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 1 | 2.91E-025 | 2.83E-025 | 3%   |
| 8243.59630                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3 | 2.50E-024 | 2.19E-024 | 14%  |
| 8244.19600                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 5 | 3.47E-025 | 3.27E-025 | 6%   |
| 8246.07900                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 0 | 8.77E-025 | 7.86E-025 | 12%  |
| 8246.70460                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 0 | 8.78E-025 | 8.24E-025 | 7%   |
| 8248.00590                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1 | 2.24E-024 | 1.91E-024 | 17%  |
| 8248.10630                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 2.99E-024 | 2.62E-024 | 14%  |
| 8248.10630                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 4.68E-025 | 4.09E-025 | 14%  |
| 8248.61230                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1 | 3.94E-024 | 3.54E-024 | 11%  |
| 8249.25340                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1 | 4.14E-025 | 4.07E-025 | 2%   |
| 8249.42260                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 7 | 1.90E-025 | 1.92E-025 | -1%  |
| 8250.50170                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6 | 3.38E-025 | 2.99E-025 | 13%  |
| 8251.29920                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6 | 4.39E-024 | 3.92E-024 | 12%  |
| 8251.82490                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 4.23E-025 | 3.73E-025 | 13%  |
| 8252.84890                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2 | 1.19E-024 | 1.13E-024 | 5%   |
| 8253.20280                           | 1           | 3 | 0 | 1           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2 | 1.05E-024 | 9.55E-025 | 10%  |
| 8255.00340                           | 1           | 3 | 0 | 1           | 0 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 0 | 5.49E-024 | 4.86E-024 | 13%  |
| 8255.23060                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 1.32E-023 | 1.14E-023 | 16%  |
| 8255.57550                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4 | 3.85E-025 | 4.75E-025 | -19% |
| 8255.82710                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4 | 1.91E-024 | 1.76E-024 | 9%   |
| 8257.18330                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6 | 1.55E-024 | 1.40E-024 | 11%  |
| 8257.34880                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3 | 1.88E-025 | 2.11E-025 | -11% |
| 8261.31630                           | 0           | 3 | 1 | 1           | 0 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 0 | 1.34E-025 | 1.53E-025 | -12% |
| 8264.33320                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3 | 4.20E-026 | 3.97E-026 | 6%   |
| 8264.33320                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 0 |   | 0               | 0                     | 0 | 6  | 6 | 2 | 5.96E-025 | 5.63E-025 | 6%   |
| 8264.64760                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4 | 1.40E-023 | 1.18E-023 | 19%  |
| 8268.24530                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1 | 2.82E-025 | 2.77E-025 | 2%   |
| 8268.42350                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1 | 2.65E-025 | 2.67E-025 | -1%  |
| 8269.01060                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 0 | 9.60E-026 | 1.26E-025 | -24% |
| 8269.93260                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6 | 1.41E-024 | 1.31E-024 | 8%   |
| 8270.23910                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 1.90E-023 | 1.62E-023 | 17%  |
| 8273.57330                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4 | 4.10E-025 | 4.01E-025 | 2%   |
| 8274.52450                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4 | 2.40E-024 | 2.10E-024 | 14%  |
| 8276.75920                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 2.22E-025 | 2.66E-025 | -17% |
| 8276.86510                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 6.28E-024 | 5.72E-024 | 10%  |
| 8277.26200                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5 | 8.04E-024 | 7.33E-024 | 10%  |
| 8281.45150                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 4 | 5 | 3.16E-025 | 2.98E-025 | 6%   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 8281.78880                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 2.90E-025 | 2.92E-025 | -1%  |
| 8281.96290                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3 | 1.02E-023 | 8.51E-024 | 20%  |
| 8283.12300                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 2 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 4 | 7 | 1.26E-025 | 1.28E-025 | -2%  |
| 8283.58610                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2 | 6.18E-025 | 6.19E-025 | 0%   |
| 8284.64750                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 6.60E-024 | 5.98E-024 | 10%  |
| 8288.32230                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4 | 8.15E-024 | 6.91E-024 | 18%  |
| 8291.85000                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5 | 9.66E-025 | 8.98E-025 | 8%   |
| 8295.22440                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 1.07E-024 | 9.41E-025 | 14%  |
| 8298.27120                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 2.27E-023 | 1.92E-023 | 18%  |
| 8298.40140                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 4.09E-024 | 3.33E-024 | 23%  |
| 8303.02490                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4 | 1.01E-024 | 8.94E-025 | 13%  |
| 8303.02490                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 2 | 2.60E-025 | 2.33E-025 | 12%  |
| 8304.07350                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 2.91E-025 | 2.84E-025 | 2%   |
| 8305.41890                           | 0           | 5 | 0 | 6           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 2 | 6.21E-026 | 7.49E-026 | -17% |
| 8305.57220                           | 1           | 3 | 0 | 1           | 1 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 0 | 1 | 4.93E-024 | 4.59E-024 | 7%   |
| 8305.57220                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3 | 1.73E-024 | 1.60E-024 | 8%   |
| 8306.04400                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 1 | 6.75E-025 | 6.00E-025 | 13%  |
| 8306.46900                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 3.18E-025 | 2.94E-025 | 8%   |
| 8306.88700                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3 | 2.79E-023 | 2.35E-023 | 19%  |
| 8307.28510                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 2.43E-024 | 2.06E-024 | 18%  |
| 8307.47420                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2 | 2.30E-023 | 1.93E-023 | 19%  |
| 8308.74780                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1 | 3.81E-025 | 3.64E-025 | 5%   |
| 8310.02100                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3 | 9.46E-025 | 8.39E-025 | 13%  |
| 8310.21850                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 4.60E-024 | 4.02E-024 | 14%  |
| 8312.15210                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2 | 2.59E-024 | 2.27E-024 | 14%  |
| 8313.38660                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 4 | 2.67E-025 | 2.45E-025 | 9%   |
| 8314.40860                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 4.34E-025 | 4.05E-025 | 7%   |
| 8315.07540                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4 | 5.14E-024 | 4.64E-024 | 11%  |
| 8320.18520                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3 | 8.68E-024 | 7.72E-024 | 12%  |
| 8320.59010                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 1.53E-023 | 1.35E-023 | 13%  |
| 8320.68160                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 5 | 8.25E-025 | 7.37E-025 | 12%  |
| 8321.55540                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 0 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 7 | 1.27E-025 | 1.46E-025 | -13% |
| 8323.29300                           | 1           | 3 | 0 | 1           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 0  | 0 | 0 | 1.60E-024 | 1.33E-024 | 20%  |
| 8324.00690                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3 | 6.07E-024 | 5.46E-024 | 11%  |
| 8325.67550                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5 | 7.64E-025 | 6.76E-025 | 13%  |
| 8325.86560                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1 | 3.48E-025 | 3.39E-025 | 3%   |
| 8327.39440                           | 0           | 3 | 1 | 1           | 0 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2 | 8.57E-024 | 8.02E-024 | 7%   |
| 8327.99360                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 7.62E-025 | 6.60E-025 | 15%  |
| 8330.10720                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2 | 3.35E-024 | 3.03E-024 | 11%  |
| 8332.19180                           | 0           | 3 | 1 | 1           | 1 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1 | 6.08E-024 | 5.52E-024 | 10%  |
| 8335.23790                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2 | 6.98E-024 | 6.22E-024 | 12%  |
| 8338.86790                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 2 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1 | 1.28E-023 | 1.11E-023 | 15%  |
| 8339.27400                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3 | 2.43E-024 | 2.19E-024 | 11%  |
| 8340.26410                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 0 | 1 | 5.60E-024 | 4.95E-024 | 13%  |
| 8340.93270                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 2.83E-025 | 2.80E-025 | 1%   |
| 8341.18490                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 3.92E-025 | 3.97E-025 | -1%  |
| 8341.68880                           | 0           | 3 | 1 | 1           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2 | 1.94E-023 | 1.63E-023 | 19%  |
| 8342.91080                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3 | 1.74E-024 | 1.58E-024 | 10%  |
| 8343.66400                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 4.40E-024 | 3.95E-024 | 11%  |
| 8344.87080                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 1.86E-025 | 1.55E-025 | 20%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |   |   |   |           |           |     |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|---|---|---|-----------|-----------|-----|
| 8345.88330                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 4 | 4 | 6.33E-025 | 5.89E-025 | 7%  |
| 8349.74380                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 1 | 2 | 3.68E-024 | 3.12E-024 | 18% |
| 8350.05830                           | 0           | 3 | 1 | 0           | 0 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 1 | 0 | 1 | 1.62E-023 | 1.38E-023 | 17% |
| 8351.65790                           | 0           | 5 | 0 | 6           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 3 | 4 | 2.22E-025 | 2.25E-025 | -1% |
| 8352.38710                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 1 | 3 | 1.22E-024 | 1.11E-024 | 10% |
| 8353.76740                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 1 | 8 | 9.09E-026 | 8.74E-026 | 4%  |
| 8354.51670                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 0 | 2 | 1.87E-024 | 1.71E-024 | 9%  |
| 8356.13560                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 5 | 4 | 1.14E-025 | 1.06E-025 | 8%  |
| 8357.59850                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 1 | 3 | 1.02E-024 | 9.50E-025 | 7%  |
| 8357.59850                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 2 | 2 | 7.86E-025 | 7.29E-025 | 8%  |
| 8358.75780                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 1 | 2 | 6.63E-024 | 5.94E-024 | 12% |
| 8360.37500                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 2 | 3 | 5.47E-025 | 4.50E-025 | 22% |
| 8360.78240                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 5 | 4 | 1.67E-025 | 1.58E-025 | 6%  |
| 8362.20350                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 4 | 3.10E-024 | 2.76E-024 | 12% |
| 8362.58990                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 2 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 1 | 1 | 5.94E-025 | 5.39E-025 | 10% |
| 8362.80570                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 3 | 1 | 2.36E-024 | 2.11E-024 | 12% |
| 8364.01200                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 3 | 2 | 7.30E-024 | 6.10E-024 | 20% |
| 8364.01200                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 4 | 2.40E-025 | 2.00E-025 | 20% |
| 8364.75930                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 0 | 5 | 2.28E-024 | 2.04E-024 | 12% |
| 8366.35800                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 3 | 6 | 3.70E-025 | 3.71E-025 | 0%  |
| 8367.28760                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 1 | 1 | 4.07E-024 | 3.55E-024 | 15% |
| 8367.60950                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 0 | 3 | 4.91E-024 | 4.38E-024 | 12% |
| 8369.23180                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 5 | 4 | 2.80E-025 | 2.50E-025 | 12% |
| 8370.31230                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 2 | 9.40E-025 | 8.58E-025 | 10% |
| 8371.23330                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 3 | 2.85E-024 | 2.64E-024 | 8%  |
| 8372.05690                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 1 | 4 | 3.15E-024 | 2.80E-024 | 13% |
| 8374.18770                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 1 | 5 | 5.37E-025 | 4.84E-025 | 11% |
| 8377.45540                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 1 | 2 | 2.85E-024 | 2.54E-024 | 12% |
| 8378.81360                           | 0           | 3 | 1 | 1           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 1 | 1 | 0 | 2.29E-023 | 1.97E-023 | 16% |
| 8380.53710                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 4 | 5 | 4.82E-025 | 4.66E-025 | 3%  |
| 8380.73850                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 0 | 4 | 1.23E-024 | 1.15E-024 | 7%  |
| 8383.66290                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 2 | 3 | 2.73E-024 | 2.47E-024 | 11% |
| 8385.04290                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 1 | 3 | 1.17E-024 | 1.00E-024 | 17% |
| 8385.35440                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 5 | 4 | 6.23E-025 | 5.77E-025 | 8%  |
| 8388.39810                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 5 | 3 | 2.54E-025 | 2.43E-025 | 5%  |
| 8388.52670                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 3 | 6 | 3.08E-025 | 3.18E-025 | -3% |
| 8389.29400                           | 2           | 1 | 0 | 9           | 0 | 9 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 5 | 4 | 1.57E-025 | 1.23E-025 | 28% |
| 8389.35450                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 5 | 7.28E-025 | 6.53E-025 | 11% |
| 8389.74490                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 2 | 3 | 6.10E-025 | 5.31E-025 | 15% |
| 8390.23110                           | 0           | 3 | 1 | 1           | 1 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 1 | 1 | 1 | 7.80E-024 | 6.82E-024 | 14% |
| 8390.73100                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 0 | 6 | 3.83E-025 | 3.89E-025 | -2% |
| 8393.71640                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 4 | 5 | 3.66E-025 | 3.06E-025 | 20% |
| 8393.71640                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 6 | 3.51E-025 | 3.19E-025 | 10% |
| 8394.05790                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 0 | 5 | 2.42E-024 | 2.17E-024 | 12% |
| 8395.42750                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 1 | 4 | 3.01E-024 | 2.65E-024 | 14% |
| 8396.26200                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 4 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 4 | 1 | 3.11E-024 | 2.73E-024 | 14% |
| 8396.47730                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 4 | 2 | 1.04E-024 | 9.91E-025 | 5%  |
| 8398.83100                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 2 | 2 | 2.27E-024 | 2.04E-024 | 11% |
| 8401.34370                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 1 | 2 | 1.09E-023 | 9.26E-024 | 18% |
| 8403.12610                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 0 | 5 | 6.07E-025 | 5.72E-025 | 6%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 8403.94510                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4  | 2.48E-025 | 2.46E-025 | 1%   |
| 8404.60170                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 0 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6  | 1.33E-024 | 1.28E-024 | 4%   |
| 8407.18660                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6  | 4.68E-025 | 4.46E-025 | 5%   |
| 8408.45520                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5  | 6.94E-025 | 6.53E-025 | 6%   |
| 8408.79600                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1  | 1.62E-023 | 1.48E-023 | 9%   |
| 8410.22840                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5  | 1.51E-025 | 1.63E-025 | -7%  |
| 8410.56480                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 3  | 3.72E-025 | 3.62E-025 | 3%   |
| 8410.82020                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 2  | 1.34E-024 | 1.17E-024 | 15%  |
| 8412.66660                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6  | 4.45E-025 | 3.99E-025 | 12%  |
| 8413.80200                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 0  | 1.20E-023 | 1.01E-023 | 19%  |
| 8414.26340                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 2 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3  | 4.29E-025 | 4.14E-025 | 4%   |
| 8414.58010                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 0  | 6.41E-024 | 5.74E-024 | 12%  |
| 8416.12250                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 2 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1  | 3.65E-023 | 3.09E-023 | 18%  |
| 8417.86580                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 1.94E-024 | 1.71E-024 | 13%  |
| 8418.22280                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 0 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7  | 2.40E-025 | 2.41E-025 | 0%   |
| 8418.97290                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 4 | 5  | 3.24E-025 | 2.45E-025 | 32%  |
| 8419.69660                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 5.64E-024 | 4.94E-024 | 14%  |
| 8419.79650                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7  | 7.48E-025 | 6.43E-025 | 16%  |
| 8419.85410                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 0 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 0 | 1  | 3.18E-023 | 2.71E-023 | 17%  |
| 8420.62980                           | 1           | 3 | 0 | 2           | 2 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 1  | 2.36E-024 | 1.91E-024 | 24%  |
| 8420.62980                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 4 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2  | 1.12E-024 | 9.08E-025 | 23%  |
| 8421.21480                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 3 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 5 | 4  | 9.35E-026 | 6.15E-026 | 52%  |
| 8421.21480                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4  | 8.86E-026 | 6.50E-026 | 36%  |
| 8422.18730                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5  | 2.77E-025 | 2.37E-025 | 17%  |
| 8422.39600                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 2  | 4.20E-025 | 3.66E-025 | 15%  |
| 8423.20500                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 4  | 3.66E-025 | 3.54E-025 | 3%   |
| 8423.73470                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6  | 1.30E-024 | 1.18E-024 | 10%  |
| 8425.32680                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 1  | 6.26E-024 | 5.41E-024 | 16%  |
| 8426.62560                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 0 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4  | 1.03E-025 | 9.19E-026 | 12%  |
| 8428.11120                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3  | 7.33E-024 | 6.96E-024 | 5%   |
| 8430.51900                           | 1           | 3 | 0 | 9           | 0 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 3.21E-025 | 3.42E-025 | -6%  |
| 8431.18640                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5  | 1.09E-025 | 1.64E-025 | -34% |
| 8431.18640                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 3  | 1.02E-026 | 1.53E-026 | -33% |
| 8431.76720                           | 1           | 3 | 0 | 9           | 1 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 0 | 8  | 1.03E-025 | 1.16E-025 | -11% |
| 8432.07650                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3  | 2.12E-024 | 1.90E-024 | 12%  |
| 8432.14510                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1  | 1.73E-024 | 1.57E-024 | 10%  |
| 8433.69200                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 3 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4  | 8.13E-025 | 6.95E-025 | 17%  |
| 8434.82570                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7  | 2.75E-025 | 2.29E-025 | 20%  |
| 8435.46830                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 5 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 1  | 4.34E-025 | 4.06E-025 | 7%   |
| 8435.46830                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 5 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 2  | 1.30E-024 | 1.21E-024 | 7%   |
| 8435.99710                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 3 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 4  | 1.96E-025 | 1.75E-025 | 12%  |
| 8436.59970                           | 1           | 1 | 1 | 14          | 0 | 14 | 0               | 0                     | 0 | 15 | 0 | 15 | 9.56E-026 | 9.37E-026 | 2%   |
| 8436.59970                           | 1           | 1 | 1 | 14          | 1 | 14 | 0               | 0                     | 0 | 15 | 1 | 15 | 3.20E-026 | 3.14E-026 | 2%   |
| 8438.46810                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 1 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 0  | 2.19E-023 | 1.95E-023 | 12%  |
| 8439.26710                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4  | 3.19E-024 | 2.69E-024 | 19%  |
| 8439.76320                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 4 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 7  | 1.26E-025 | 1.59E-025 | -21% |
| 8440.28440                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 0 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2  | 1.26E-023 | 1.07E-023 | 18%  |
| 8441.17150                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 5 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 4  | 9.58E-026 | 1.36E-025 | -30% |
| 8441.36150                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2  | 9.76E-025 | 8.99E-025 | 9%   |
| 8442.39200                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4  | 8.78E-025 | 8.13E-025 | 8%   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 8443.61300                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2  | 3.69E-023 | 3.10E-023 | 19%  |
| 8446.90020                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2  | 3.77E-024 | 3.35E-024 | 13%  |
| 8446.99700                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 8.04E-025 | 7.60E-025 | 6%   |
| 8447.80190                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 5  | 3.38E-025 | 3.51E-025 | -4%  |
| 8448.58100                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1  | 2.73E-024 | 2.42E-024 | 13%  |
| 8450.83520                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5  | 3.54E-025 | 3.62E-025 | -2%  |
| 8451.52400                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 6 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 3  | 2.42E-025 | 2.11E-025 | 15%  |
| 8451.52400                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 6 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 2  | 8.06E-026 | 7.04E-026 | 14%  |
| 8452.45470                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 0  | 4.95E-025 | 4.78E-025 | 4%   |
| 8452.62680                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2  | 8.60E-025 | 8.71E-025 | -1%  |
| 8454.34470                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 9.65E-025 | 8.77E-025 | 10%  |
| 8455.24210                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2  | 6.55E-024 | 5.86E-024 | 12%  |
| 8455.92140                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 0 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5  | 1.17E-024 | 1.06E-024 | 10%  |
| 8456.16870                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3  | 3.42E-024 | 3.04E-024 | 13%  |
| 8458.82520                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 0 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3  | 3.72E-023 | 3.19E-023 | 17%  |
| 8458.94810                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 3.66E-025 | 3.18E-025 | 15%  |
| 8459.39980                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1  | 5.18E-024 | 4.60E-024 | 13%  |
| 8459.58390                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3  | 7.86E-025 | 7.05E-025 | 11%  |
| 8460.13850                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4  | 9.96E-025 | 9.34E-025 | 7%   |
| 8461.10980                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 0  | 3.32E-023 | 2.87E-023 | 16%  |
| 8461.21230                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 1.20E-023 | 1.07E-023 | 12%  |
| 8461.31760                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3  | 1.72E-024 | 1.55E-024 | 11%  |
| 8461.42930                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 3 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 1  | 1.16E-023 | 9.46E-024 | 23%  |
| 8461.53330                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 1.60E-023 | 1.34E-023 | 19%  |
| 8462.24870                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6  | 6.31E-026 | 1.37E-025 | -54% |
| 8463.12940                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3  | 2.31E-024 | 2.13E-024 | 8%   |
| 8463.76380                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4  | 6.70E-025 | 6.32E-025 | 6%   |
| 8464.38250                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5  | 5.82E-025 | 6.12E-025 | -5%  |
| 8464.96850                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1  | 1.00E-023 | 8.46E-024 | 18%  |
| 8466.27200                           | 1           | 1 | 1 | 13          | 0 | 13 | 0               | 0                     | 0 | 14 | 0 | 14 | 1.57E-025 | 1.63E-025 | -4%  |
| 8466.27200                           | 1           | 1 | 1 | 13          | 1 | 13 | 0               | 0                     | 0 | 14 | 1 | 14 | 4.70E-025 | 4.89E-025 | -4%  |
| 8467.90270                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4  | 2.78E-024 | 2.56E-024 | 9%   |
| 8468.15860                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5  | 2.67E-024 | 2.41E-024 | 11%  |
| 8468.75380                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3  | 1.29E-024 | 1.14E-024 | 13%  |
| 8469.40390                           | 0           | 6 | 0 | 6           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3  | 7.70E-025 | 7.07E-025 | 9%   |
| 8470.99740                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3  | 2.33E-025 | 2.52E-025 | -8%  |
| 8471.52930                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4  | 1.35E-024 | 1.22E-024 | 11%  |
| 8474.05410                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4  | 1.84E-024 | 1.56E-024 | 18%  |
| 8475.94300                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 0 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4  | 1.04E-023 | 9.04E-024 | 15%  |
| 8476.30840                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 6 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 2  | 1.26E-025 | 1.25E-025 | 1%   |
| 8476.30840                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 6 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 1  | 3.77E-025 | 3.76E-025 | 0%   |
| 8477.64460                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4  | 3.17E-023 | 2.72E-023 | 17%  |
| 8479.87450                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2  | 2.87E-025 | 2.25E-025 | 28%  |
| 8484.19100                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3  | 1.45E-024 | 1.33E-024 | 9%   |
| 8484.19100                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 2 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 13 | 2 | 11 | 3.96E-025 | 3.61E-025 | 10%  |
| 8484.49630                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 2 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 0 | 9  | 1.02E-025 | 1.38E-025 | -26% |
| 8486.05120                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1  | 1.87E-023 | 1.61E-023 | 16%  |
| 8489.83430                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 0  | 6.36E-024 | 6.49E-024 | -2%  |
| 8489.94750                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 7 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 7 | 3  | 1.04E-026 | 9.25E-027 | 12%  |
| 8489.94750                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 1 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 13 | 1 | 12 | 5.22E-025 | 4.75E-025 | 10%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 8489.94750                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 7 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 7 | 2  | 3.06E-026 | 2.79E-026 | 10%  |
| 8490.06110                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6  | 3.28E-025 | 2.67E-025 | 23%  |
| 8490.73910                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2  | 2.91E-023 | 2.47E-023 | 18%  |
| 8490.81880                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 3.73E-025 | 4.14E-025 | -10% |
| 8491.33050                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 2 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 13 | 2 | 12 | 1.89E-025 | 1.86E-025 | 2%   |
| 8491.43140                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6  | 9.33E-025 | 8.51E-025 | 10%  |
| 8491.46270                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 2  | 9.24E-025 | 8.34E-025 | 11%  |
| 8491.73540                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 4 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5  | 2.71E-025 | 2.54E-025 | 7%   |
| 8491.89630                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 0 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5  | 2.35E-023 | 1.98E-023 | 19%  |
| 8492.55810                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4  | 6.11E-025 | 5.75E-025 | 6%   |
| 8493.03830                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5  | 7.88E-024 | 7.10E-024 | 11%  |
| 8493.52990                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 3 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6  | 3.31E-025 | 3.13E-025 | 6%   |
| 8494.78360                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 1 | 12 | 0               | 0                     | 0 | 13 | 1 | 13 | 5.23E-025 | 4.46E-025 | 17%  |
| 8495.06940                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 0 | 12 | 0               | 0                     | 0 | 13 | 0 | 13 | 1.65E-024 | 1.41E-024 | 17%  |
| 8495.31700                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 2  | 6.90E-025 | 6.01E-025 | 15%  |
| 8498.61690                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4  | 3.75E-024 | 3.01E-024 | 25%  |
| 8498.90170                           | 1           | 3 | 0 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6  | 2.59E-025 | 2.95E-025 | -12% |
| 8500.51020                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3  | 1.07E-025 | 1.16E-025 | -8%  |
| 8501.30610                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 4 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 12 | 4 | 9  | 3.05E-025 | 2.47E-025 | 23%  |
| 8501.36280                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 5 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 12 | 5 | 8  | 1.08E-025 | 1.26E-025 | -14% |
| 8504.82560                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5  | 1.42E-024 | 1.32E-024 | 8%   |
| 8505.66780                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 4 | 7  | 6.70E-025 | 6.53E-025 | 3%   |
| 8506.72940                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 0 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6  | 5.24E-024 | 4.87E-024 | 8%   |
| 8507.40590                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 2 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 12 | 2 | 10 | 2.82E-025 | 2.50E-025 | 13%  |
| 8507.46310                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6  | 1.55E-023 | 1.38E-023 | 12%  |
| 8507.46310                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 3 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 3 | 8  | 7.86E-025 | 7.42E-025 | 6%   |
| 8508.30890                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 8.04E-024 | 6.92E-024 | 16%  |
| 8508.87240                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 3 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 12 | 3 | 10 | 6.47E-025 | 5.51E-025 | 17%  |
| 8511.17810                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1  | 2.57E-024 | 2.33E-024 | 10%  |
| 8512.01910                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 6.08E-025 | 5.19E-025 | 17%  |
| 8512.15290                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3  | 1.51E-024 | 1.37E-024 | 10%  |
| 8515.51200                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3  | 7.65E-024 | 6.23E-024 | 23%  |
| 8515.84620                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 2  | 1.32E-024 | 1.23E-024 | 7%   |
| 8516.31700                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1  | 2.39E-023 | 2.01E-023 | 19%  |
| 8516.80420                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6  | 1.83E-025 | 1.94E-025 | -6%  |
| 8517.42230                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 4  | 5.20E-025 | 4.72E-025 | 10%  |
| 8517.42230                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 4 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3  | 4.07E-024 | 3.69E-024 | 10%  |
| 8517.61590                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 4 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1  | 1.03E-023 | 8.02E-024 | 28%  |
| 8517.61590                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 2 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 12 | 2 | 11 | 1.43E-024 | 1.12E-024 | 28%  |
| 8517.97820                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 4 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 2  | 3.32E-024 | 2.97E-024 | 12%  |
| 8518.35470                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3  | 8.89E-025 | 7.55E-025 | 18%  |
| 8518.45730                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7  | 4.82E-025 | 4.02E-025 | 20%  |
| 8518.45730                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 4 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 0  | 7.76E-024 | 6.47E-024 | 20%  |
| 8518.49490                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 4 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1  | 2.22E-023 | 1.94E-023 | 14%  |
| 8518.97470                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 4 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 5  | 8.28E-025 | 7.56E-025 | 10%  |
| 8518.97470                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 0 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4  | 8.01E-025 | 7.82E-025 | 2%   |
| 8519.06640                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 2 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7  | 3.41E-025 | 3.58E-025 | -5%  |
| 8519.96130                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 1 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 12 | 1 | 11 | 4.49E-025 | 4.47E-025 | 0%   |
| 8520.46490                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 0 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7  | 9.51E-024 | 8.52E-024 | 12%  |
| 8520.73800                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7  | 3.10E-024 | 2.85E-024 | 9%   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 8521.11790                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 2  | 4.84E-025 | 4.63E-025 | 5%   |
| 8521.18330                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3  | 1.08E-024 | 9.69E-025 | 11%  |
| 8521.72100                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 5 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 5 | 6  | 3.65E-025 | 3.19E-025 | 14%  |
| 8523.56780                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 1 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 12 | 1 | 12 | 4.94E-024 | 4.53E-024 | 9%   |
| 8523.60060                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 0 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 12 | 0 | 12 | 1.49E-024 | 1.51E-023 | -90% |
| 8523.97830                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3  | 1.61E-025 | 1.98E-025 | -19% |
| 8524.48810                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 0  | 1.58E-024 | 3.21E-024 | -51% |
| 8524.99040                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 4 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 3 | 8  | 6.59E-025 | 5.72E-025 | 15%  |
| 8525.83560                           | 1           | 3 | 0 | 3           | 3 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1  | 4.88E-024 | 4.55E-024 | 7%   |
| 8525.91280                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1  | 1.59E-024 | 1.45E-024 | 10%  |
| 8526.16100                           | 0           | 5 | 0 | 7           | 6 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4  | 5.66E-025 | 4.75E-025 | 19%  |
| 8527.15660                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 3 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 2 | 9  | 8.03E-025 | 7.11E-025 | 13%  |
| 8527.23080                           | 0           | 3 | 1 | 2           | 2 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 0 | 1  | 2.41E-025 | 2.42E-025 | 0%   |
| 8528.15930                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 4 | 8  | 3.11E-025 | 2.74E-025 | 14%  |
| 8529.81150                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3  | 2.16E-023 | 1.83E-023 | 18%  |
| 8530.44340                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 5 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 5 | 7  | 1.28E-025 | 1.65E-025 | -22% |
| 8531.88860                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 3 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 1.78E-025 | 1.67E-025 | 7%   |
| 8532.04020                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 0  | 5.66E-025 | 5.25E-025 | 8%   |
| 8533.14630                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 0 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 0 | 8  | 1.78E-024 | 1.60E-024 | 11%  |
| 8533.14630                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3  | 9.94E-025 | 8.91E-025 | 12%  |
| 8533.31650                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 1 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 5.17E-024 | 4.78E-024 | 8%   |
| 8533.95480                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 3 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 3 | 9  | 4.30E-025 | 4.53E-025 | -5%  |
| 8533.95480                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 2 | 3  | 0               | 1                     | 0 | 5  | 4 | 2  | 2.41E-025 | 2.53E-025 | -5%  |
| 8534.12460                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 2 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 2 | 9  | 1.42E-024 | 1.35E-024 | 5%   |
| 8536.54000                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 3 | 7  | 1.06E-024 | 9.79E-025 | 8%   |
| 8536.82250                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4  | 5.27E-025 | 5.34E-025 | -1%  |
| 8537.21470                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 1 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 9  | 7.41E-026 | 1.49E-025 | -50% |
| 8537.35210                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 2 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7  | 4.84E-025 | 4.82E-025 | 0%   |
| 8539.22640                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4  | 1.61E-023 | 1.34E-023 | 20%  |
| 8539.22640                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 4 | 6  | 4.50E-025 | 3.76E-025 | 20%  |
| 8539.43600                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 2.28E-024 | 1.99E-024 | 15%  |
| 8542.26120                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1  | 1.01E-024 | 9.62E-025 | 5%   |
| 8542.44820                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 4  | 1.87E-025 | 2.02E-025 | -7%  |
| 8542.82120                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2  | 6.85E-024 | 6.13E-024 | 12%  |
| 8542.94680                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 2 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 2 | 10 | 1.66E-024 | 1.47E-024 | 13%  |
| 8543.53240                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 2  | 4.10E-025 | 3.90E-025 | 5%   |
| 8544.03250                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 1 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 1 | 10 | 4.76E-024 | 4.42E-024 | 8%   |
| 8544.03250                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 3.00E-025 | 2.78E-025 | 8%   |
| 8544.37440                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1  | 2.02E-024 | 1.85E-024 | 9%   |
| 8544.83290                           | 0           | 3 | 1 | 10          | 0 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 0 | 9  | 2.42E-024 | 2.32E-024 | 4%   |
| 8544.87460                           | 0           | 3 | 1 | 10          | 1 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 9  | 8.72E-025 | 8.25E-025 | 6%   |
| 8545.03480                           | 0           | 5 | 0 | 6           | 6 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4  | 9.94E-025 | 9.19E-025 | 8%   |
| 8545.49030                           | 0           | 3 | 1 | 10          | 2 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 0 | 11 | 2.89E-024 | 2.57E-024 | 12%  |
| 8545.61210                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 4 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1  | 5.14E-025 | 4.48E-025 | 15%  |
| 8546.92880                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 4 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 1.43E-024 | 1.30E-024 | 10%  |
| 8550.51360                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 5 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 6  | 1.33E-024 | 1.27E-024 | 5%   |
| 8550.58270                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4  | 5.28E-024 | 4.88E-024 | 8%   |
| 8550.69390                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 1 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 1 | 11 | 4.66E-024 | 4.21E-024 | 11%  |
| 8550.83890                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 8.46E-025 | 8.24E-025 | 3%   |
| 8551.69370                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 0 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 0 | 11 | 9.85E-024 | 8.42E-024 | 17%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A         |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|-----------|-----------|------|
| 8552.00580                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 3 | 6  | 0 0 0           | 9 2 7                 | 3.24E-025 | 3.24E-025 | 0%   |
| 8552.34110                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 2 | 3  | 0 0 0           | 5 3 2                 | 3.81E-024 | 3.43E-024 | 11%  |
| 8553.23960                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 2  | 0 0 0           | 5 0 5                 | 3.65E-025 | 3.60E-025 | 1%   |
| 8555.00750                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 2 | 7  | 0 0 0           | 10 2 8                | 2.13E-024 | 2.02E-024 | 5%   |
| 8555.15090                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 4  | 0 0 0           | 10 5 5                | 3.76E-025 | 3.62E-025 | 4%   |
| 8555.50630                           | 0           | 3 | 1 | 11          | 1 | 11 | 0 0 0           | 10 1 10               | 2.43E-024 | 2.33E-024 | 4%   |
| 8555.50630                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 6  | 0 0 0           | 10 4 7                | 5.89E-025 | 5.65E-025 | 4%   |
| 8555.66890                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 3  | 0 0 0           | 6 3 4                 | 1.34E-024 | 1.28E-024 | 5%   |
| 8556.11220                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 5  | 0 0 0           | 7 5 2                 | 3.23E-025 | 3.54E-025 | -9%  |
| 8557.06620                           | 1           | 3 | 0 | 10          | 3 | 8  | 0 0 0           | 11 0 11               | 1.36E-024 | 1.23E-024 | 11%  |
| 8557.14900                           | 1           | 2 | 1 | 7           | 1 | 7  | 0 1 0           | 8 1 8                 | 1.33E-025 | 1.55E-025 | -14% |
| 8557.79010                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 4  | 0 0 0           | 8 2 7                 | 2.81E-025 | 2.68E-025 | 5%   |
| 8558.02280                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 3 | 2  | 0 0 0           | 3 3 1                 | 3.75E-024 | 3.35E-024 | 12%  |
| 8558.63150                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 3 | 1  | 0 0 0           | 3 3 0                 | 1.14E-023 | 9.79E-024 | 16%  |
| 8558.95260                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 7  | 0 0 0           | 10 3 8                | 6.19E-024 | 5.47E-024 | 13%  |
| 8559.65520                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 5  | 0 0 0           | 10 5 6                | 1.21E-024 | 1.09E-024 | 11%  |
| 8561.83130                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 3 | 7  | 0 0 0           | 10 1 10               | 1.22E-024 | 1.08E-024 | 13%  |
| 8562.02520                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 1 | 6  | 0 0 0           | 6 1 5                 | 3.26E-024 | 2.94E-024 | 11%  |
| 8563.14640                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 3  | 0 0 0           | 4 3 2                 | 4.12E-024 | 3.74E-024 | 10%  |
| 8563.61050                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 5  | 0 0 0           | 9 3 6                 | 1.04E-023 | 8.99E-024 | 16%  |
| 8564.59680                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 3 | 3  | 0 0 0           | 5 1 4                 | 8.63E-025 | 8.45E-025 | 2%   |
| 8565.37800                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 6 | 3  | 0 0 0           | 10 6 4                | 1.60E-025 | 1.22E-025 | 31%  |
| 8565.37800                           | 2           | 1 | 0 | 9           | 0 | 9  | 0 0 0           | 9 1 8                 | 1.27E-025 | 9.70E-026 | 31%  |
| 8565.64080                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 3 | 4  | 0 0 0           | 6 1 5                 | 3.05E-025 | 3.02E-025 | 1%   |
| 8565.75860                           | 0           | 3 | 1 | 12          | 0 | 12 | 0 0 0           | 11 0 11               | 7.50E-025 | 6.89E-025 | 9%   |
| 8566.20440                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 6 | 4  | 0 0 0           | 10 6 5                | 3.81E-025 | 3.70E-025 | 3%   |
| 8567.56330                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 2 | 4  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 1.20E-023 | 1.03E-023 | 17%  |
| 8568.00410                           | 1           | 2 | 1 | 6           | 4 | 2  | 0 1 0           | 7 4 3                 | 1.96E-026 | 1.69E-025 | -88% |
| 8568.61150                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 1 | 8  | 0 0 0           | 10 1 9                | 4.70E-024 | 4.22E-024 | 11%  |
| 8568.91960                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 3  | 0 0 0           | 5 5 0                 | 3.49E-025 | 3.50E-025 | 0%   |
| 8569.63340                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 3 | 1  | 0 0 0           | 4 4 0                 | 5.15E-025 | 5.25E-025 | -2%  |
| 8569.81590                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 3 | 0  | 0 0 0           | 4 4 1                 | 1.55E-024 | 1.53E-024 | 1%   |
| 8570.68330                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 2 | 6  | 0 0 0           | 6 2 5                 | 1.00E-023 | 8.85E-024 | 13%  |
| 8570.82470                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 2 | 8  | 0 0 0           | 10 2 9                | 1.17E-023 | 9.95E-024 | 18%  |
| 8570.90420                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 3  | 0 0 0           | 5 3 2                 | 8.31E-024 | 7.27E-024 | 14%  |
| 8571.83420                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 3 | 5  | 0 0 0           | 7 1 6                 | 5.52E-025 | 4.90E-025 | 13%  |
| 8572.00860                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 6  | 0 0 0           | 7 4 3                 | 3.74E-025 | 3.85E-025 | -3%  |
| 8572.65700                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 4  | 0 0 0           | 9 4 5                 | 7.38E-024 | 6.34E-024 | 16%  |
| 8573.16180                           | 0           | 3 | 1 | 3           | 3 | 1  | 0 0 0           | 3 1 2                 | 2.84E-025 | 2.81E-025 | 1%   |
| 8573.38920                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 2 | 2  | 0 0 0           | 5 3 3                 | 7.26E-025 | 6.94E-025 | 5%   |
| 8574.46980                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 2 | 3  | 0 1 0           | 6 2 4                 | 9.45E-026 | 1.21E-025 | -22% |
| 8574.51370                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 2 | 8  | 0 0 0           | 9 0 9                 | 3.66E-025 | 3.18E-025 | 15%  |
| 8574.55950                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 3 | 4  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 1.79E-024 | 1.58E-024 | 13%  |
| 8575.04710                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 4 | 2  | 0 0 0           | 6 2 5                 | 2.20E-025 | 2.33E-025 | -6%  |
| 8575.82480                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 0 | 4  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 9.78E-024 | 8.27E-024 | 18%  |
| 8576.50730                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 3  | 0 0 0           | 6 5 2                 | 1.48E-024 | 1.26E-024 | 17%  |
| 8577.28590                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 6  | 0 0 0           | 9 2 7                 | 1.75E-023 | 1.53E-023 | 14%  |
| 8577.68060                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 0 | 9  | 0 0 0           | 10 0 10               | 1.18E-023 | 1.27E-023 | -7%  |
| 8578.05510                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 1 | 9  | 0 0 0           | 10 1 10               | 3.45E-023 | 2.95E-023 | 17%  |
| 8578.26600                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 5 | 3  | 0 0 0           | 8 5 4                 | 8.35E-025 | 7.31E-025 | 14%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 8578.81080                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 3 | 6.75E-025 | 6.08E-025 | 11%  |
| 8578.96730                           | 0           | 3 | 1 | 10          | 2 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 9 | 1.66E-025 | 2.88E-025 | -42% |
| 8580.68570                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 2 | 1.64E-024 | 1.54E-024 | 6%   |
| 8581.27370                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 0 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8 | 1.50E-025 | 3.02E-025 | -50% |
| 8581.53720                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2 | 1.27E-023 | 1.19E-023 | 7%   |
| 8581.57870                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 1 | 1.51E-024 | 1.45E-024 | 4%   |
| 8581.98900                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 5 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 0 | 1.10E-023 | 9.92E-024 | 11%  |
| 8583.29840                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 4 | 6 | 2.70E-024 | 2.37E-024 | 14%  |
| 8583.97570                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6 | 5.38E-024 | 4.79E-024 | 12%  |
| 8584.16860                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 7 | 5.47E-024 | 5.09E-024 | 7%   |
| 8584.59010                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 3 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 4 | 6 | 2.92E-025 | 2.67E-025 | 9%   |
| 8584.71990                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 6.82E-025 | 6.95E-025 | -2%  |
| 8584.79320                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 1 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 1 | 9 | 2.10E-025 | 2.61E-025 | -20% |
| 8584.86020                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 3 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6 | 1.18E-024 | 1.05E-024 | 12%  |
| 8585.16900                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 0 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 9 | 4.84E-025 | 4.61E-025 | 5%   |
| 8585.38360                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 6 | 2.01E-025 | 2.00E-025 | 0%   |
| 8585.91710                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1 | 2.09E-024 | 1.91E-024 | 9%   |
| 8586.94490                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 5 | 4 | 3.24E-024 | 3.06E-024 | 6%   |
| 8588.29990                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 5 | 3.57E-024 | 3.22E-024 | 11%  |
| 8588.89870                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 5 | 5 | 1.10E-024 | 1.06E-024 | 4%   |
| 8589.57260                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 7 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 7 | 4 | 1.17E-025 | 1.54E-025 | -24% |
| 8590.03790                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 5 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6 | 3.23E-024 | 2.85E-024 | 13%  |
| 8590.17170                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6 | 1.86E-024 | 1.72E-024 | 8%   |
| 8590.90570                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7 | 3.36E-025 | 3.34E-025 | 1%   |
| 8592.36770                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 8 | 3.31E-023 | 3.15E-023 | 5%   |
| 8593.16760                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 2 | 2.53E-025 | 2.58E-025 | -2%  |
| 8593.46770                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 0 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 7 | 2.83E-025 | 3.34E-025 | -15% |
| 8593.83560                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 8 | 1.15E-023 | 1.04E-023 | 11%  |
| 8594.03270                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2 | 2.85E-024 | 2.24E-024 | 27%  |
| 8594.15150                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 5 | 7.30E-024 | 6.24E-024 | 17%  |
| 8595.64400                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 6 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 6 | 3 | 8.37E-025 | 8.63E-025 | -3%  |
| 8595.83240                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1 | 1.89E-024 | 1.71E-024 | 11%  |
| 8595.90020                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 6 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 6 | 4 | 3.29E-025 | 3.19E-025 | 3%   |
| 8596.89580                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4 | 2.11E-024 | 1.96E-024 | 8%   |
| 8597.29960                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 3 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 8 | 2.89E-025 | 3.30E-025 | -12% |
| 8598.88450                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 5 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 6 | 5 | 1.16E-025 | 1.33E-025 | -13% |
| 8599.98650                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 1 | 1.20E-024 | 1.22E-024 | -2%  |
| 8601.24810                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5 | 1.78E-024 | 1.67E-024 | 7%   |
| 8601.98720                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6 | 1.19E-023 | 1.05E-023 | 13%  |
| 8603.30970                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 0 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 0 | 9 | 8.06E-023 | 7.08E-023 | 14%  |
| 8603.39980                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 9 | 2.67E-023 | 2.39E-023 | 12%  |
| 8604.02720                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 1 | 5  | 0               | 1                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 3.85E-025 | 4.05E-025 | -5%  |
| 8604.57730                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3 | 3.48E-024 | 2.85E-024 | 22%  |
| 8604.95830                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 7 | 9.24E-025 | 8.36E-025 | 11%  |
| 8605.18490                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 0 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7 | 1.66E-025 | 1.69E-025 | -2%  |
| 8605.53400                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 4 | 6.07E-024 | 5.42E-024 | 12%  |
| 8606.40070                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7 | 2.96E-025 | 3.29E-025 | -10% |
| 8606.81060                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 1 | 3  | 0               | 1                     | 0 | 5  | 1 | 4 | 3.23E-025 | 4.47E-025 | -28% |
| 8607.70080                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1 | 1.03E-024 | 8.42E-025 | 22%  |
| 8608.06960                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2 | 1.04E-023 | 9.24E-024 | 13%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 8609.08650                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 2 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7 | 2.83E-024 | 3.39E-024 | -17% |
| 8609.83140                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6 | 3.84E-023 | 3.44E-023 | 12%  |
| 8611.38190                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 5 | 1.87E-023 | 1.62E-023 | 15%  |
| 8611.82850                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 0 | 9 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 8 | 6.36E-025 | 6.22E-025 | 2%   |
| 8612.85810                           | 2           | 1 | 0 | 9           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 7 | 1.51E-025 | 1.74E-025 | -13% |
| 8613.52550                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 1 | 9 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 8 | 1.76E-024 | 1.60E-024 | 10%  |
| 8614.22020                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2 | 1.20E-024 | 1.21E-024 | -1%  |
| 8614.41830                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 0 | 8.17E-024 | 7.00E-024 | 17%  |
| 8615.06990                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 7 | 2.69E-023 | 2.32E-023 | 16%  |
| 8615.83790                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 7 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 7 | 2 | 3.34E-025 | 3.06E-025 | 9%   |
| 8615.83790                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 7 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 7 | 3 | 1.10E-025 | 1.02E-025 | 8%   |
| 8616.81850                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 1.07E-024 | 9.74E-025 | 10%  |
| 8617.29560                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 0 | 2.37E-025 | 1.98E-025 | 20%  |
| 8617.37440                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 5 | 3 | 2.46E-024 | 2.23E-024 | 10%  |
| 8617.47710                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 2 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 1 | 1.14E-024 | 9.83E-025 | 16%  |
| 8617.58130                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 3.19E-023 | 2.85E-023 | 12%  |
| 8617.64600                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7 | 7.80E-023 | 6.70E-023 | 16%  |
| 8618.05870                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 0 | 3.22E-024 | 2.87E-024 | 12%  |
| 8618.05870                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 5 | 4 | 4.33E-024 | 3.85E-024 | 12%  |
| 8618.23090                           | 0           | 6 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 2.18E-023 | 2.11E-023 | 3%   |
| 8619.21290                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 2.14E-025 | 2.26E-025 | -5%  |
| 8619.82470                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 2.89E-023 | 2.44E-023 | 18%  |
| 8621.22460                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 0 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6 | 7.11E-025 | 6.38E-025 | 11%  |
| 8622.25590                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 3.80E-024 | 3.13E-024 | 21%  |
| 8622.75020                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4 | 6.69E-023 | 5.92E-023 | 13%  |
| 8623.03740                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 6 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 1 | 4.16E-026 | 4.14E-026 | 0%   |
| 8623.03740                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 2 | 1.23E-025 | 1.24E-025 | -1%  |
| 8623.03740                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 6 | 3 | 1.63E-025 | 1.65E-025 | -1%  |
| 8623.95400                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 6 | 4 | 1.09E-025 | 1.05E-025 | 4%   |
| 8624.18410                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 0 | 4 | 0               | 1                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 4.78E-025 | 4.09E-025 | 17%  |
| 8624.18410                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 6.69E-024 | 5.72E-024 | 17%  |
| 8625.46300                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 2 | 7.35E-025 | 5.71E-025 | 29%  |
| 8625.51910                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 6 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 3 | 2.08E-024 | 1.75E-024 | 19%  |
| 8626.57090                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 1 | 4 | 0               | 1                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 1.93E-025 | 2.13E-025 | -9%  |
| 8627.07020                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4 | 6.62E-024 | 5.48E-024 | 21%  |
| 8628.14160                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 0 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 0 | 8 | 5.67E-023 | 4.78E-023 | 19%  |
| 8628.31140                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4 | 9.14E-024 | 7.90E-024 | 16%  |
| 8628.31140                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8 | 1.65E-022 | 1.43E-022 | 15%  |
| 8628.59280                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 1 | 2 | 0               | 1                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 1.39E-025 | 3.81E-025 | -64% |
| 8630.11440                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 2 | 9 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 8 | 1.96E-025 | 1.98E-025 | -1%  |
| 8630.48070                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6 | 2.44E-025 | 2.64E-025 | -8%  |
| 8630.66380                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 3.16E-025 | 3.02E-025 | 5%   |
| 8631.84510                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 3.10E-023 | 2.63E-023 | 18%  |
| 8632.80410                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 2 | 1 | 0               | 1                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 2.26E-024 | 2.00E-024 | 13%  |
| 8632.84320                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3 | 2.11E-024 | 1.88E-024 | 12%  |
| 8632.84320                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 2.44E-024 | 2.17E-024 | 12%  |
| 8633.41150                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1 | 7.74E-025 | 7.80E-025 | -1%  |
| 8634.40550                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6 | 3.93E-025 | 3.91E-025 | 1%   |
| 8635.13580                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 4 | 5 | 1.93E-025 | 1.76E-025 | 10%  |
| 8636.03830                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5 | 2.66E-023 | 2.41E-023 | 10%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 8636.48300                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 3 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 4 | 7 | 1.88E-025 | 2.33E-025 | -19% |
| 8636.75810                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6 | 1.67E-022 | 1.47E-022 | 14%  |
| 8636.97210                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3 | 3.71E-023 | 3.26E-023 | 14%  |
| 8637.87780                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 0 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7 | 4.29E-024 | 4.25E-024 | 1%   |
| 8639.12740                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 2 | 4.88E-025 | 4.41E-025 | 11%  |
| 8639.56830                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 4 | 1.29E-023 | 1.10E-023 | 17%  |
| 8639.72900                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5 | 1.38E-024 | 1.21E-024 | 14%  |
| 8639.85020                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1 | 5.72E-024 | 5.25E-024 | 9%   |
| 8639.95790                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 0 | 2.00E-024 | 1.74E-024 | 15%  |
| 8640.71990                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 7 | 1.66E-024 | 1.57E-024 | 6%   |
| 8641.34130                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6 | 5.20E-023 | 4.39E-023 | 18%  |
| 8641.60530                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 7 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 1 | 1.33E-025 | 1.69E-025 | -21% |
| 8641.60530                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 7 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 2 | 4.00E-025 | 5.08E-025 | -21% |
| 8641.92550                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 2 | 2 | 0               | 1                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 3.79E-025 | 4.91E-025 | -23% |
| 8643.26640                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3 | 3.26E-025 | 3.54E-025 | -8%  |
| 8643.91790                           | 0           | 6 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3 | 2.29E-025 | 2.46E-025 | -7%  |
| 8644.02730                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 0 | 3.34E-024 | 2.86E-024 | 17%  |
| 8644.23430                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 4 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 1 | 1.09E-024 | 1.06E-024 | 3%   |
| 8645.39760                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 7 | 5.51E-025 | 5.01E-025 | 10%  |
| 8645.50920                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3 | 1.79E-024 | 1.63E-024 | 10%  |
| 8646.03480                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 6 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 3 | 7.49E-025 | 6.47E-025 | 16%  |
| 8646.46950                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4 | 7.01E-023 | 6.02E-023 | 16%  |
| 8646.77170                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 2 | 1.37E-023 | 1.17E-023 | 17%  |
| 8646.88820                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1 | 6.84E-025 | 8.82E-025 | -22% |
| 8646.95140                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 2 | 5.88E-025 | 4.82E-025 | 22%  |
| 8646.95140                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 3 | 4.72E-024 | 3.90E-024 | 21%  |
| 8646.95140                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 6 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 1 | 1.75E-024 | 1.44E-024 | 22%  |
| 8647.10570                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 2 | 2.06E-025 | 2.21E-025 | -7%  |
| 8647.44310                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 6 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 6 | 1 | 4.84E-024 | 4.37E-024 | 11%  |
| 8647.44310                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 6 | 0 | 1.61E-024 | 1.46E-024 | 10%  |
| 8648.75060                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 2.68E-025 | 2.82E-025 | -5%  |
| 8648.75060                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 1 | 3 | 0               | 1                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 7.83E-025 | 8.23E-025 | -5%  |
| 8648.95730                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5 | 1.19E-024 | 1.15E-024 | 3%   |
| 8649.27150                           | 0           | 5 | 0 | 6           | 6 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 1.09E-025 | 1.12E-025 | -3%  |
| 8649.27150                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 2 | 1.03E-025 | 1.06E-025 | -3%  |
| 8649.50950                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 3 | 6.68E-025 | 6.47E-025 | 3%   |
| 8649.67720                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 9.52E-025 | 9.39E-025 | 1%   |
| 8650.16980                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 5 | 5.50E-025 | 5.45E-025 | 1%   |
| 8650.47690                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 1.70E-024 | 1.60E-024 | 6%   |
| 8650.68210                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 9.46E-026 | 9.32E-026 | 2%   |
| 8651.09460                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5 | 1.51E-024 | 1.35E-024 | 12%  |
| 8652.08750                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7 | 3.10E-022 | 2.69E-022 | 15%  |
| 8652.40280                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7 | 1.04E-022 | 9.24E-023 | 13%  |
| 8654.30990                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 1.27E-024 | 1.14E-024 | 11%  |
| 8654.30990                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4 | 4.58E-026 | 4.11E-026 | 11%  |
| 8654.44590                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4 | 1.72E-025 | 2.48E-025 | -31% |
| 8654.82400                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3 | 4.58E-023 | 3.86E-023 | 19%  |
| 8654.97060                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 2 | 9.28E-025 | 7.90E-025 | 17%  |
| 8654.97060                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 6 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 1 | 2.78E-024 | 2.37E-024 | 17%  |
| 8655.27260                           | 1           | 2 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0               | 1                     | 0 | 3  | 1 | 2 | 6.49E-025 | 7.43E-025 | -13% |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |   |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|---|---|---|-----------|-----------|------|
| 8656.49930                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 4 | 5 | 8.64E-025 | 8.14E-025 | 6%   |
| 8657.14440                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 4 | 4 | 6.21E-025 | 5.46E-025 | 14%  |
| 8657.14440                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 3 | 4 | 6.32E-025 | 5.56E-025 | 14%  |
| 8657.29000                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 3 | 4 | 3.07E-024 | 2.76E-024 | 11%  |
| 8657.52980                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 3 | 1.36E-025 | 2.23E-025 | -39% |
| 8658.07940                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 1 | 5 | 1.05E-022 | 8.86E-023 | 19%  |
| 8660.24470                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 3 | 0 | 1.78E-024 | 1.71E-024 | 4%   |
| 8660.97260                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 2 | 4 | 5.35E-025 | 4.47E-025 | 20%  |
| 8660.97260                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 2 | 5 | 5.22E-025 | 4.37E-025 | 19%  |
| 8661.69590                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 4 | 6.45E-024 | 6.10E-024 | 6%   |
| 8662.01720                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 3 | 4 | 1.30E-022 | 1.16E-022 | 12%  |
| 8662.59730                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 0 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 2 | 6 | 3.56E-024 | 3.30E-024 | 8%   |
| 8663.15250                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 2 | 1 | 2.78E-023 | 2.28E-023 | 22%  |
| 8663.47760                           | 2           | 1 | 0 | 1           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 2 | 0 | 1.55E-024 | 1.53E-024 | 1%   |
| 8663.51260                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 4 | 2 | 2.06E-024 | 1.88E-024 | 10%  |
| 8663.80650                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 4 | 1 | 5.93E-024 | 5.30E-024 | 12%  |
| 8665.13110                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 2.72E-022 | 2.29E-022 | 19%  |
| 8665.32930                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 3 | 6 | 4.70E-024 | 3.91E-024 | 20%  |
| 8665.86900                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 2 | 5.62E-025 | 5.16E-025 | 9%   |
| 8666.76460                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 2 | 2.03E-023 | 1.74E-023 | 17%  |
| 8667.21250                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 3 | 4 | 1.28E-023 | 1.12E-023 | 14%  |
| 8667.64560                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 3 | 5.98E-023 | 5.16E-023 | 16%  |
| 8668.26050                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 6 | 1.14E-023 | 9.94E-024 | 15%  |
| 8668.52280                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 4 | 6.25E-024 | 5.61E-024 | 11%  |
| 8669.19630                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 1 | 4 | 5.13E-024 | 4.53E-024 | 13%  |
| 8669.59900                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 3 | 3 | 5.82E-025 | 4.85E-025 | 20%  |
| 8670.25810                           | 2           | 1 | 0 | 1           | 1 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 2 | 1 | 5.27E-024 | 4.55E-024 | 16%  |
| 8670.25810                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 3 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 3 | 6 | 1.82E-024 | 1.57E-024 | 16%  |
| 8670.67900                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 1 | 2 | 1.53E-025 | 1.65E-025 | -7%  |
| 8670.67900                           | 1           | 2 | 1 | 2           | 1 | 2 | 0               | 1                     | 0 | 3 | 1 | 3 | 2.30E-025 | 2.48E-025 | -7%  |
| 8670.67900                           | 0           | 3 | 1 | 10          | 2 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 2 | 7 | 1.45E-025 | 1.55E-025 | -6%  |
| 8673.85020                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 5 | 4 | 5.82E-025 | 5.50E-025 | 6%   |
| 8675.00920                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 2 | 3 | 3.20E-022 | 2.84E-022 | 13%  |
| 8675.04850                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 0 | 6 | 1.60E-022 | 1.34E-022 | 19%  |
| 8675.36190                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 5 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 5 | 1 | 8.00E-024 | 1.89E-023 | -58% |
| 8675.39730                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 5 | 2 | 2.09E-023 | 2.36E-023 | -11% |
| 8675.78030                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 1 | 6 | 5.13E-022 | 4.46E-022 | 15%  |
| 8676.14700                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 4 | 2.68E-024 | 2.59E-024 | 3%   |
| 8678.03610                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 4 | 4 | 1.84E-025 | 2.29E-025 | -20% |
| 8678.44800                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 0 | 4 | 4.81E-025 | 5.34E-025 | -10% |
| 8678.63660                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 3 | 2 | 1.78E-024 | 1.63E-024 | 9%   |
| 8679.29640                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 2 | 3 | 2.73E-024 | 2.35E-024 | 16%  |
| 8680.25910                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 4 | 5.21E-022 | 4.07E-022 | 28%  |
| 8681.26560                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 3 | 5 | 2.74E-024 | 2.41E-024 | 14%  |
| 8681.94600                           | 1           | 2 | 1 | 1           | 1 | 0 | 0               | 1                     | 0 | 2 | 1 | 1 | 1.84E-025 | 2.44E-025 | -25% |
| 8682.25270                           | 1           | 3 | 0 | 10          | 3 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 2 | 7 | 1.53E-025 | 1.16E-025 | 32%  |
| 8684.53820                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 3 | 1 | 4.07E-025 | 4.92E-025 | -17% |
| 8685.20320                           | 0           | 5 | 0 | 6           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 3 | 2 | 5.67E-025 | 4.85E-025 | 17%  |
| 8685.41990                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 2.23E-023 | 1.88E-023 | 19%  |
| 8685.71900                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 3 | 2 | 2.04E-022 | 1.78E-022 | 15%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 8686.57270                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2 | 1.04E-024 | 9.69E-025 | 7%   |
| 8686.66520                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3 | 4.08E-024 | 3.61E-024 | 13%  |
| 8687.02450                           | 1           | 2 | 1 | 1           | 0 | 1 | 0               | 1                     | 0 | 2  | 0 | 2 | 3.08E-025 | 3.40E-025 | -9%  |
| 8687.25110                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3 | 2.30E-024 | 2.10E-024 | 10%  |
| 8687.38340                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 2 | 1.52E-024 | 1.35E-024 | 13%  |
| 8689.15550                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3 | 6.90E-023 | 6.05E-023 | 14%  |
| 8689.22290                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 1.40E-022 | 1.22E-022 | 15%  |
| 8691.30960                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6 | 1.63E-024 | 1.45E-024 | 12%  |
| 8691.99370                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4 | 1.23E-023 | 1.03E-023 | 19%  |
| 8692.65520                           | 1           | 2 | 1 | 1           | 1 | 1 | 0               | 1                     | 0 | 2  | 1 | 2 | 6.03E-025 | 7.06E-025 | -15% |
| 8693.51520                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1 | 2.23E-025 | 2.28E-025 | -2%  |
| 8694.06780                           | 1           | 1 | 1 | 1           | 0 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 0 | 5.10E-024 | 4.55E-024 | 12%  |
| 8694.19740                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 1.06E-024 | 9.46E-025 | 12%  |
| 8694.26270                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 1.33E-023 | 1.19E-023 | 12%  |
| 8694.45520                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 1 | 1.15E-024 | 1.01E-024 | 14%  |
| 8695.18160                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 4 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1 | 6.98E-023 | 5.74E-023 | 22%  |
| 8695.38950                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 2 | 2.23E-023 | 1.91E-023 | 17%  |
| 8695.83680                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2 | 8.10E-025 | 7.67E-025 | 6%   |
| 8695.97630                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 7.91E-024 | 7.25E-024 | 9%   |
| 8696.47370                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 2 | 1.08E-024 | 1.05E-024 | 3%   |
| 8696.98770                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 7.83E-022 | 6.13E-022 | 28%  |
| 8697.90490                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 3 | 3.49E-025 | 3.51E-025 | -1%  |
| 8697.90490                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 1 | 3 | 0               | 1                     | 0 | 3  | 1 | 2 | 2.63E-025 | 2.47E-026 | 965% |
| 8698.52590                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 2.50E-022 | 2.08E-022 | 20%  |
| 8700.14110                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 5 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 6 | 1 | 4.59E-025 | 4.52E-025 | 2%   |
| 8700.14110                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 6 | 0 | 1.54E-025 | 1.52E-025 | 1%   |
| 8700.80200                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 3.08E-024 | 2.67E-024 | 15%  |
| 8703.01320                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4 | 1.32E-024 | 1.19E-024 | 11%  |
| 8703.51400                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3 | 1.35E-024 | 1.24E-024 | 9%   |
| 8704.17810                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 2.39E-022 | 1.97E-022 | 21%  |
| 8704.39510                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 1.66E-022 | 1.43E-022 | 16%  |
| 8705.16320                           | 2           | 1 | 0 | 1           | 0 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2 | 7.24E-024 | 6.22E-024 | 16%  |
| 8705.37440                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1 | 1.97E-024 | 2.10E-024 | -6%  |
| 8705.53740                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 1.29E-023 | 1.07E-023 | 21%  |
| 8706.09190                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3 | 1.15E-023 | 1.05E-023 | 10%  |
| 8706.23830                           | 0           | 3 | 1 | 4           | 4 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 2.25E-025 | 2.17E-025 | 4%   |
| 8707.64840                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3 | 3.22E-024 | 2.61E-024 | 23%  |
| 8709.85070                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 7 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 1 | 2.37E-025 | 2.07E-025 | 14%  |
| 8709.85070                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 7 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 2 | 7.11E-025 | 6.20E-025 | 15%  |
| 8710.17290                           | 1           | 2 | 1 | 0           | 0 | 0 | 0               | 1                     | 0 | 1  | 0 | 1 | 4.93E-025 | 5.83E-025 | -15% |
| 8710.44970                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3 | 2.17E-024 | 2.09E-024 | 4%   |
| 8710.49230                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 7 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 7 | 0 | 1.90E-024 | 1.74E-024 | 9%   |
| 8710.49230                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 7 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 7 | 1 | 6.30E-025 | 5.79E-025 | 9%   |
| 8712.18560                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3 | 2.49E-025 | 2.38E-025 | 5%   |
| 8713.65920                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 5.33E-022 | 4.09E-022 | 30%  |
| 8713.89680                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4 | 5.57E-025 | 5.20E-025 | 7%   |
| 8714.00930                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 2 | 9 | 6.61E-025 | 5.61E-025 | 18%  |
| 8714.00930                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3 | 6.95E-025 | 5.89E-025 | 18%  |
| 8714.31190                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4 | 2.82E-025 | 3.05E-025 | -8%  |
| 8714.76640                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1 | 6.78E-023 | 6.10E-023 | 11%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 8715.88130                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 2.04E-022 | 1.83E-022 | 11%  |
| 8717.24750                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2  | 1.51E-024 | 1.41E-024 | 7%   |
| 8717.91100                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 0 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4  | 3.36E-022 | 2.68E-022 | 25%  |
| 8720.10000                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 5  | 9.51E-025 | 8.53E-025 | 11%  |
| 8720.61840                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 1 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 0  | 1.08E-024 | 1.15E-024 | -6%  |
| 8720.66850                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 0 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2  | 7.77E-024 | 7.43E-024 | 5%   |
| 8720.82510                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4  | 9.50E-022 | 7.60E-022 | 25%  |
| 8720.82510                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5  | 2.47E-023 | 1.98E-023 | 25%  |
| 8721.04920                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1  | 4.30E-024 | 4.53E-024 | -5%  |
| 8721.97330                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 0 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3  | 5.27E-023 | 4.46E-023 | 18%  |
| 8722.16640                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 6  | 7.03E-024 | 5.37E-024 | 31%  |
| 8722.90470                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 4 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 1  | 5.45E-025 | 5.12E-025 | 6%   |
| 8723.02990                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 0  | 3.67E-025 | 3.42E-025 | 7%   |
| 8723.21030                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 4 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 2  | 1.90E-024 | 1.54E-024 | 23%  |
| 8723.57520                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4  | 4.94E-023 | 4.19E-023 | 18%  |
| 8724.44510                           | 2           | 1 | 0 | 0           | 0 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 1  | 1.92E-024 | 1.71E-024 | 12%  |
| 8726.47110                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2  | 3.20E-022 | 2.55E-022 | 25%  |
| 8727.24460                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 4 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 4 | 7  | 1.12E-025 | 1.44E-025 | -22% |
| 8727.35060                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 2  | 7.82E-026 | 6.30E-026 | 24%  |
| 8728.14040                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 1  | 8.12E-025 | 1.05E-024 | -23% |
| 8728.57930                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 0  | 1.93E-024 | 1.79E-024 | 8%   |
| 8729.21070                           | 1           | 2 | 1 | 1           | 1 | 1  | 0               | 1                     | 0 | 1  | 1 | 0  | 5.27E-025 | 8.32E-025 | -37% |
| 8729.54920                           | 2           | 1 | 0 | 1           | 1 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2  | 3.05E-025 | 3.44E-025 | -11% |
| 8730.13180                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 1 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2  | 5.66E-022 | 4.54E-022 | 25%  |
| 8733.66210                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 0 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 1.72E-023 | 1.48E-023 | 16%  |
| 8733.80830                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 2 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1  | 4.55E-022 | 3.66E-022 | 24%  |
| 8734.35370                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 0 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1  | 3.14E-024 | 2.78E-024 | 13%  |
| 8736.83590                           | 1           | 2 | 1 | 2           | 2 | 1  | 0               | 1                     | 0 | 2  | 2 | 0  | 3.15E-025 | 3.68E-025 | -14% |
| 8737.43810                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4  | 2.28E-024 | 2.03E-024 | 12%  |
| 8738.24890                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 2 | 1  | 0               | 1                     | 0 | 4  | 0 | 4  | 2.27E-024 | 2.38E-024 | -5%  |
| 8738.33150                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 1.54E-022 | 1.07E-022 | 44%  |
| 8738.54700                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 0 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3  | 1.15E-021 | 9.09E-022 | 27%  |
| 8739.24760                           | 1           | 2 | 1 | 2           | 2 | 0  | 0               | 1                     | 0 | 2  | 2 | 1  | 8.07E-025 | 9.09E-025 | -11% |
| 8739.24760                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 3 | 2  | 0               | 1                     | 0 | 4  | 3 | 1  | 1.09E-025 | 1.23E-025 | -11% |
| 8740.40730                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 0 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1  | 2.48E-023 | 2.05E-023 | 21%  |
| 8741.28960                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 3 | 8  | 2.77E-025 | 2.62E-025 | 6%   |
| 8741.33300                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 3 | 1  | 0               | 1                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 3.47E-025 | 4.07E-025 | -15% |
| 8741.75380                           | 1           | 2 | 1 | 6           | 4 | 2  | 0               | 1                     | 0 | 6  | 4 | 3  | 1.09E-025 | 9.91E-026 | 10%  |
| 8741.93730                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 2 | 1  | 0               | 1                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 1.96E-025 | 2.19E-025 | -11% |
| 8741.98800                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2  | 2.02E-024 | 1.76E-024 | 15%  |
| 8742.28830                           | 2           | 1 | 0 | 1           | 0 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 0  | 8.32E-024 | 6.70E-024 | 24%  |
| 8742.41590                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 3 | 1  | 0               | 1                     | 0 | 3  | 3 | 0  | 6.64E-025 | 7.00E-025 | -5%  |
| 8742.92920                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 3.37E-022 | 2.65E-022 | 27%  |
| 8744.44600                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 4 | 2  | 0               | 1                     | 0 | 5  | 4 | 1  | 6.20E-025 | 1.96E-025 | 216% |
| 8744.92110                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 2  | 8.38E-025 | 7.55E-025 | 11%  |
| 8746.46380                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 4  | 3.45E-025 | 3.26E-025 | 6%   |
| 8747.22930                           | 0           | 1 | 2 | 10          | 0 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 1 | 11 | 3.09E-025 | 3.30E-025 | -6%  |
| 8747.35240                           | 0           | 1 | 2 | 10          | 1 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 0 | 11 | 9.04E-025 | 9.00E-025 | 0%   |
| 8747.77000                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 4 | 0  | 0               | 1                     | 0 | 4  | 4 | 1  | 2.15E-025 | 2.61E-025 | -18% |
| 8747.77000                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 4 | 1  | 0               | 1                     | 0 | 4  | 4 | 0  | 7.17E-026 | 8.69E-026 | -17% |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 8748.17630                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4  | 1.23E-023 | 1.03E-023 | 19%  |
| 8748.87690                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 0  | 1.79E-024 | 1.55E-024 | 15%  |
| 8748.90970                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 4 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 1  | 4.11E-025 | 3.98E-025 | 3%   |
| 8749.65440                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3  | 3.23E-023 | 2.71E-023 | 19%  |
| 8749.82570                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 1  | 5.66E-025 | 5.12E-025 | 11%  |
| 8750.08830                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 7.19E-025 | 7.20E-025 | 0%   |
| 8750.24260                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 5  | 2.11E-024 | 1.93E-024 | 9%   |
| 8750.63020                           | 1           | 2 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0               | 1                     | 0 | 2  | 1 | 2  | 5.17E-025 | 5.39E-025 | -4%  |
| 8750.73190                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5  | 1.29E-024 | 1.23E-024 | 5%   |
| 8751.06560                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 2.22E-025 | 2.69E-025 | -17% |
| 8751.50230                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3  | 2.39E-024 | 2.16E-024 | 11%  |
| 8751.71080                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4  | 9.74E-024 | 8.59E-024 | 13%  |
| 8751.92250                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 2  | 2.11E-024 | 1.93E-024 | 9%   |
| 8752.35760                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 5 | 1 | 0               | 1                     | 0 | 5  | 5 | 0  | 1.56E-025 | 1.37E-025 | 14%  |
| 8754.74160                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 4 | 6  | 1.82E-025 | 2.37E-025 | -23% |
| 8754.93020                           | 1           | 1 | 1 | 1           | 1 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1  | 2.43E-022 | 1.91E-022 | 27%  |
| 8756.89410                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 7  | 1.82E-025 | 1.08E-025 | 69%  |
| 8757.24410                           | 1           | 2 | 1 | 1           | 0 | 1 | 0               | 1                     | 0 | 0  | 0 | 0  | 2.08E-025 | 2.70E-025 | -23% |
| 8757.39560                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6  | 1.26E-024 | 1.16E-024 | 9%   |
| 8757.56200                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3  | 4.88E-024 | 4.37E-024 | 12%  |
| 8760.14100                           | 1           | 1 | 1 | 1           | 0 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2  | 3.61E-022 | 2.82E-022 | 28%  |
| 8760.42010                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 2 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 4.81E-024 | 4.55E-024 | 6%   |
| 8760.89260                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6  | 6.80E-025 | 5.90E-025 | 15%  |
| 8761.03570                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3  | 1.52E-025 | 1.26E-025 | 21%  |
| 8763.05680                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 3 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 8  | 6.12E-026 | 7.98E-026 | -23% |
| 8763.12930                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 9  | 6.71E-025 | 6.14E-025 | 9%   |
| 8763.46800                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 2 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 1 | 9  | 1.90E-025 | 2.15E-025 | -12% |
| 8765.04060                           | 1           | 1 | 1 | 1           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2  | 7.77E-022 | 6.22E-022 | 25%  |
| 8769.08550                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 0  | 5.43E-025 | 5.25E-025 | 3%   |
| 8769.13030                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1  | 1.49E-024 | 1.45E-024 | 3%   |
| 8770.12430                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6  | 1.09E-024 | 1.05E-024 | 4%   |
| 8770.96470                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 2.24E-025 | 2.52E-025 | -11% |
| 8771.53200                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3  | 9.51E-023 | 8.31E-023 | 14%  |
| 8772.29750                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2  | 1.89E-022 | 1.61E-022 | 17%  |
| 8772.77650                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1  | 3.74E-024 | 3.35E-024 | 12%  |
| 8773.11250                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 0 | 9 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 1 | 10 | 2.10E-024 | 2.06E-024 | 2%   |
| 8773.21860                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 1 | 9 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 0 | 10 | 7.03E-025 | 6.45E-025 | 9%   |
| 8773.46800                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5  | 6.06E-025 | 5.64E-025 | 7%   |
| 8773.59120                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4  | 2.27E-023 | 1.93E-023 | 18%  |
| 8774.53550                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 2  | 1.32E-024 | 1.21E-024 | 9%   |
| 8775.19480                           | 1           | 2 | 1 | 2           | 1 | 2 | 0               | 1                     | 0 | 1  | 1 | 1  | 3.86E-025 | 6.66E-025 | -42% |
| 8776.60440                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 4 | 5  | 2.42E-024 | 2.18E-024 | 11%  |
| 8777.64430                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 2  | 1.13E-025 | 1.98E-025 | -43% |
| 8777.73930                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 5 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 5 | 6  | 1.29E-025 | 2.31E-025 | -44% |
| 8778.65770                           | 1           | 2 | 1 | 2           | 0 | 2 | 0               | 1                     | 0 | 1  | 0 | 1  | 9.51E-025 | 1.25E-024 | -24% |
| 8781.36340                           | 2           | 1 | 0 | 1           | 1 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 0 | 1  | 8.87E-024 | 7.92E-024 | 12%  |
| 8782.48750                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5  | 6.71E-025 | 7.12E-025 | -6%  |
| 8783.20600                           | 1           | 1 | 1 | 0           | 0 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 0 | 1  | 6.82E-022 | 5.41E-022 | 26%  |
| 8784.63620                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1  | 3.75E-025 | 2.17E-025 | 73%  |
| 8785.79920                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5  | 2.31E-025 | 1.43E-025 | 62%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A  |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|----|-----------|-----------|------|
| 8786.68750                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 2  | 3.48E-024 | 3.16E-024 | 10%  |
| 8786.97340                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 4  | 1.15E-025 | 6.47E-026 | 78%  |
| 8787.17870                           | 1           | 3 | 0 | 4           | 4 | 0 | 0               | 0                     | 3  | 3.48E-026 | 4.14E-026 | -16% |
| 8787.17870                           | 1           | 2 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0               | 1                     | 1  | 6.66E-025 | 7.91E-025 | -16% |
| 8789.22260                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 2 | 7 | 0               | 0                     | 9  | 1.22E-024 | 1.06E-024 | 15%  |
| 8789.40020                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 5  | 4.21E-024 | 3.70E-024 | 14%  |
| 8789.65240                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 4  | 7.97E-023 | 6.95E-023 | 15%  |
| 8790.03150                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 2  | 1.29E-022 | 1.08E-022 | 19%  |
| 8790.29970                           | 0           | 6 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 5  | 1.82E-025 | 3.33E-025 | -45% |
| 8791.18360                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 6  | 2.19E-023 | 1.88E-023 | 16%  |
| 8791.52130                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 5 | 6 | 0               | 0                     | 10 | 1.99E-025 | 2.61E-025 | -24% |
| 8791.82680                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 5  | 1.07E-024 | 3.13E-024 | -66% |
| 8791.89330                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 5  | 1.89E-025 | 1.88E-025 | 1%   |
| 8792.40390                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 5 | 0               | 0                     | 8  | 1.99E-024 | 1.65E-024 | 21%  |
| 8792.40390                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 1  | 2.15E-024 | 1.77E-024 | 21%  |
| 8793.28320                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 1 | 3 | 0               | 1                     | 2  | 1.02E-024 | 1.21E-024 | -16% |
| 8793.45120                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 9  | 3.93E-025 | 4.64E-025 | -15% |
| 8794.30010                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 3  | 1.23E-024 | 1.14E-024 | 8%   |
| 8795.07270                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 5  | 2.13E-024 | 1.67E-024 | 28%  |
| 8795.43220                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 7  | 1.37E-025 | 7.18E-026 | 91%  |
| 8795.71160                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 6  | 3.40E-024 | 3.15E-024 | 8%   |
| 8796.17150                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 5  | 2.41E-024 | 2.21E-024 | 9%   |
| 8796.44400                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 3  | 7.74E-024 | 7.44E-024 | 4%   |
| 8796.75650                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 6 | 6 | 0               | 0                     | 11 | 1.02E-025 | 5.08E-026 | 101% |
| 8797.25490                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 0 | 3 | 0               | 1                     | 2  | 4.11E-025 | 4.57E-025 | -10% |
| 8797.99240                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 0 | 8 | 0               | 0                     | 9  | 1.35E-024 | 1.49E-024 | -9%  |
| 8798.12210                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 4  | 1.84E-024 | 1.73E-024 | 6%   |
| 8798.30390                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 2  | 2.78E-025 | 3.72E-025 | -25% |
| 8798.36910                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 9  | 3.89E-024 | 3.77E-024 | 3%   |
| 8799.07190                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 4  | 1.36E-024 | 1.37E-024 | -1%  |
| 8799.33020                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 4  | 4.48E-024 | 3.93E-024 | 14%  |
| 8799.64220                           | 2           | 1 | 0 | 1           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0  | 3.99E-024 | 3.25E-024 | 23%  |
| 8801.07650                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 5 | 0               | 0                     | 9  | 2.43E-024 | 2.43E-024 | 0%   |
| 8801.86510                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 3  | 5.83E-022 | 4.53E-022 | 29%  |
| 8802.16640                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 5  | 1.87E-022 | 1.62E-022 | 15%  |
| 8802.16640                           | 1           | 1 | 1 | 1           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 1  | 7.22E-022 | 6.24E-022 | 16%  |
| 8802.85300                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 7  | 2.89E-023 | 2.48E-023 | 17%  |
| 8803.18360                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 3  | 1.48E-023 | 1.30E-023 | 14%  |
| 8803.45580                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 6 | 4 | 0               | 0                     | 10 | 4.00E-025 | 3.10E-025 | 29%  |
| 8803.79990                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 2  | 1.99E-024 | 1.69E-024 | 18%  |
| 8803.91520                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 5  | 4.32E-025 | 4.01E-025 | 8%   |
| 8804.87560                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 9  | 8.14E-025 | 8.12E-025 | 0%   |
| 8805.19070                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 5  | 5.89E-024 | 5.28E-024 | 12%  |
| 8805.95910                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 4  | 1.09E-024 | 1.94E-024 | -44% |
| 8806.67350                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 8  | 2.68E-024 | 2.49E-024 | 8%   |
| 8807.38050                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 5  | 1.38E-023 | 1.46E-023 | -5%  |
| 8807.52320                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 2 | 0 | 0               | 0                     | 2  | 5.79E-024 | 5.02E-024 | 15%  |
| 8807.96750                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 8  | 2.88E-024 | 2.77E-024 | 4%   |
| 8808.46860                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 2  | 4.19E-022 | 3.39E-022 | 24%  |
| 8809.07560                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 8  | 8.72E-024 | 7.11E-024 | 23%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A         |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|-----------|-----------|------|
| 8809.20200                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 2 | 0 | 0 0 0           | 3 0 3                 | 5.59E-024 | 4.97E-024 | 12%  |
| 8809.28060                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 2 | 0 0 0           | 4 3 1                 | 1.47E-022 | 1.26E-022 | 17%  |
| 8809.53160                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 3 | 0 0 0           | 6 4 2                 | 2.23E-023 | 1.47E-023 | 52%  |
| 8809.55000                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 3 | 0 0 0           | 7 4 4                 | 7.71E-024 | 8.64E-024 | -11% |
| 8809.79300                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 6 | 4 | 0 0 0           | 9 6 3                 | 1.39E-024 | 1.35E-024 | 3%   |
| 8809.91690                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 1 | 4 | 0 1 0           | 3 1 3                 | 3.25E-025 | 4.14E-025 | -21% |
| 8810.18210                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 0 | 4 | 0 0 0           | 3 2 1                 | 7.86E-024 | 6.29E-024 | 25%  |
| 8810.18210                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 4 | 0 0 0           | 8 4 5                 | 9.69E-024 | 7.76E-024 | 25%  |
| 8810.39340                           | 1           | 2 | 1 | 3           | 1 | 2 | 0 1 0           | 2 1 1                 | 3.38E-025 | 3.73E-025 | -9%  |
| 8811.06300                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 2 | 0 | 0 0 0           | 2 2 1                 | 1.25E-021 | 1.03E-021 | 21%  |
| 8811.48440                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 2 | 0 0 0           | 6 4 3                 | 8.64E-023 | 7.15E-023 | 21%  |
| 8812.01430                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 1 | 0 0 0           | 4 3 2                 | 4.38E-022 | 3.70E-022 | 18%  |
| 8812.40490                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 2 | 0 0 0           | 5 3 3                 | 5.95E-023 | 5.21E-023 | 14%  |
| 8812.97720                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 1 | 0 0 0           | 3 3 0                 | 1.16E-021 | 9.01E-022 | 29%  |
| 8812.97720                           | 1           | 1 | 1 | 1           | 1 | 0 | 0 0 0           | 1 1 1                 | 1.07E-022 | 8.33E-023 | 28%  |
| 8813.38970                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 3 | 0 0 0           | 7 5 2                 | 2.61E-024 | 2.33E-024 | 12%  |
| 8813.38970                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 0 | 0 0 0           | 3 3 1                 | 3.36E-022 | 3.01E-022 | 12%  |
| 8813.63910                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 2 | 0 0 0           | 7 5 3                 | 8.27E-024 | 7.05E-024 | 17%  |
| 8813.87350                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 1 | 0 0 0           | 3 2 2                 | 1.96E-022 | 1.69E-022 | 16%  |
| 8814.02890                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 2 | 0 0 0           | 5 4 1                 | 2.14E-022 | 1.92E-022 | 11%  |
| 8814.43020                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 1 | 0 0 0           | 5 4 2                 | 6.91E-023 | 6.01E-023 | 15%  |
| 8814.53870                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 0 | 3 | 0 0 0           | 2 1 2                 | 1.03E-023 | 9.13E-024 | 13%  |
| 8814.79170                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 5 | 0 0 0           | 9 4 6                 | 9.20E-025 | 7.69E-025 | 20%  |
| 8815.17190                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 5 | 3 | 0 0 0           | 6 4 2                 | 3.05E-026 | 1.11E-025 | -73% |
| 8815.25390                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 5 | 1 | 0 0 0           | 5 3 2                 | 6.72E-025 | 6.46E-025 | 4%   |
| 8815.41600                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 6 | 2 | 0 0 0           | 8 6 3                 | 5.02E-024 | 4.19E-024 | 20%  |
| 8815.50400                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 6 | 3 | 0 0 0           | 8 6 2                 | 1.67E-024 | 1.44E-024 | 16%  |
| 8816.12810                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 3 | 0 0 0           | 6 3 4                 | 6.22E-023 | 5.20E-023 | 20%  |
| 8816.48160                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 1 | 2 | 0 0 0           | 1 0 1                 | 1.95E-023 | 1.63E-023 | 20%  |
| 8817.14290                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 4 | 0 0 0           | 4 3 1                 | 8.22E-025 | 8.95E-025 | -8%  |
| 8817.37110                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 4 | 1 | 0 0 0           | 4 4 0                 | 1.56E-022 | 1.37E-022 | 14%  |
| 8817.41460                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 4 | 0 | 0 0 0           | 4 4 1                 | 4.87E-022 | 4.45E-022 | 9%   |
| 8817.97040                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 2 | 0 0 0           | 6 5 1                 | 2.83E-023 | 2.21E-023 | 28%  |
| 8818.00800                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 1 | 0 0 0           | 6 5 2                 | 7.02E-023 | 5.91E-023 | 19%  |
| 8818.42150                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 2 | 6 | 0 0 0           | 7 0 7                 | 1.48E-025 | 1.44E-025 | 3%   |
| 8818.77180                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 6 | 0 0 0           | 8 5 3                 | 2.34E-025 | 2.43E-025 | -4%  |
| 8818.91050                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 6 | 2 | 0 0 0           | 7 7 1                 | 4.29E-025 | 3.96E-025 | 8%   |
| 8818.91050                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 6 | 1 | 0 0 0           | 7 7 0                 | 1.29E-024 | 1.19E-024 | 8%   |
| 8820.13720                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 5 | 0 | 0 0 0           | 5 3 3                 | 6.97E-025 | 6.87E-025 | 1%   |
| 8820.34030                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 2 | 1 | 0 0 0           | 2 1 2                 | 1.30E-022 | 1.08E-022 | 20%  |
| 8820.93630                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 6 | 1 | 0 0 0           | 7 6 2                 | 4.91E-024 | 3.38E-024 | 45%  |
| 8820.93630                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 6 | 2 | 0 0 0           | 7 6 1                 | 1.48E-023 | 1.02E-023 | 45%  |
| 8821.15730                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 2 | 0 0 0           | 4 2 3                 | 2.48E-022 | 2.04E-022 | 22%  |
| 8821.67740                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 1 | 0 0 0           | 6 3 4                 | 6.86E-024 | 5.60E-024 | 23%  |
| 8821.76360                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 2 | 0 0 0           | 7 3 5                 | 2.82E-024 | 2.50E-024 | 13%  |
| 8821.91960                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 5 | 0 | 0 0 0           | 5 5 1                 | 5.51E-023 | 4.97E-023 | 11%  |
| 8821.91960                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 5 | 1 | 0 0 0           | 5 5 0                 | 1.65E-022 | 1.49E-022 | 11%  |
| 8822.12660                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 3 | 0 0 0           | 4 3 2                 | 4.45E-026 | 4.07E-026 | 9%   |
| 8822.12660                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 2 | 0 0 0           | 4 3 1                 | 2.09E-024 | 1.91E-024 | 9%   |
| 8822.43760                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 1 | 7 | 0 0 0           | 8 0 8                 | 2.12E-024 | 1.87E-024 | 13%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 8822.73700                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 0 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8 | 7.95E-024 | 7.27E-024 | 9%   |
| 8823.11440                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 3.39E-025 | 2.18E-025 | 56%  |
| 8823.29090                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 9.10E-025 | 9.40E-025 | -3%  |
| 8823.34050                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 4 | 7 | 6.25E-025 | 5.65E-025 | 11%  |
| 8823.70760                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 0 | 8 | 4.04E-025 | 4.38E-025 | -8%  |
| 8824.00090                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2 | 2.98E-022 | 2.37E-022 | 26%  |
| 8824.60130                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6 | 1.12E-025 | 1.18E-025 | -5%  |
| 8825.18420                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 1 | 5 | 0               | 1                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 9.21E-025 | 1.04E-024 | -11% |
| 8825.82090                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6 | 1.32E-024 | 1.20E-024 | 10%  |
| 8826.10640                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 6 | 0 | 1.35E-023 | 1.17E-023 | 15%  |
| 8826.10640                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 6 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 6 | 1 | 4.07E-023 | 3.54E-023 | 15%  |
| 8826.72420                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 2.94E-025 | 3.00E-025 | -2%  |
| 8826.89790                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6 | 2.69E-025 | 2.85E-025 | -6%  |
| 8827.12090                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 2 | 1.37E-025 | 1.11E-025 | 23%  |
| 8827.16680                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 0 | 5 | 0               | 1                     | 0 | 4  | 0 | 4 | 3.21E-025 | 3.58E-025 | -10% |
| 8827.25560                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 3.69E-025 | 4.09E-025 | -10% |
| 8827.31730                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6 | 8.77E-025 | 8.60E-025 | 2%   |
| 8827.48120                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3 | 1.45E-024 | 1.31E-024 | 11%  |
| 8827.61470                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5 | 4.83E-024 | 4.36E-024 | 11%  |
| 8827.88890                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 2 | 3 | 0               | 1                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 3.79E-025 | 3.29E-025 | 15%  |
| 8828.56920                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3 | 7.23E-024 | 6.08E-024 | 19%  |
| 8828.81080                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 9.29E-025 | 8.11E-025 | 15%  |
| 8828.81080                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 2.06E-024 | 1.80E-024 | 14%  |
| 8829.08970                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4 | 4.25E-025 | 2.37E-025 | 79%  |
| 8829.95350                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2 | 6.85E-024 | 6.10E-024 | 12%  |
| 8830.23190                           | 1           | 1 | 1 | 1           | 0 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 0  | 0 | 0 | 2.49E-022 | 1.96E-022 | 27%  |
| 8830.40870                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2 | 8.19E-024 | 7.48E-024 | 9%   |
| 8832.16000                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2 | 2.77E-024 | 2.45E-024 | 13%  |
| 8832.31050                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1 | 1.47E-025 | 9.76E-026 | 51%  |
| 8833.03410                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 3.24E-023 | 2.75E-023 | 18%  |
| 8833.32890                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 7 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 7 | 3 | 1.41E-025 | 1.49E-025 | -5%  |
| 8833.32890                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 7 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 7 | 2 | 4.23E-025 | 4.46E-025 | -5%  |
| 8833.76350                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 0 | 9 | 8.36E-026 | 1.06E-025 | -21% |
| 8834.02390                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3 | 5.12E-024 | 4.51E-024 | 14%  |
| 8835.25980                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 1 | 3 | 0               | 1                     | 0 | 3  | 1 | 2 | 7.55E-025 | 8.16E-025 | -7%  |
| 8835.73820                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 7 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 1 | 6.98E-025 | 7.12E-025 | -2%  |
| 8835.73820                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 7 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 2 | 2.09E-024 | 2.14E-024 | -2%  |
| 8836.41210                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3 | 4.61E-025 | 4.40E-025 | 5%   |
| 8837.39610                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3 | 7.34E-023 | 6.61E-023 | 11%  |
| 8837.48080                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 7 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 7 | 0 | 6.84E-024 | 6.28E-024 | 9%   |
| 8837.48080                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 7 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 7 | 1 | 2.28E-024 | 2.10E-024 | 9%   |
| 8837.69090                           | 1           | 2 | 1 | 4           | 3 | 2 | 0               | 1                     | 0 | 3  | 3 | 1 | 6.24E-026 | 1.80E-025 | -65% |
| 8837.86720                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2 | 3.50E-024 | 3.35E-024 | 4%   |
| 8839.21720                           | 1           | 2 | 1 | 6           | 1 | 6 | 0               | 1                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 2.23E-025 | 3.02E-025 | -26% |
| 8840.27790                           | 1           | 2 | 1 | 6           | 0 | 6 | 0               | 1                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 7.45E-025 | 7.35E-025 | 1%   |
| 8840.41330                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6 | 6.13E-024 | 5.47E-024 | 12%  |
| 8840.83310                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 0 | 8 | 2.26E-025 | 1.11E-025 | 104% |
| 8841.01740                           | 1           | 3 | 0 | 5           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 1.43E-025 | 2.16E-025 | -34% |
| 8841.15600                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6 | 4.62E-024 | 4.18E-024 | 11%  |
| 8841.45040                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 6 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 1 | 9.22E-025 | 8.55E-025 | 8%   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |   |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|---|---|---|-----------|-----------|------|
| 8842.06490                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 6.81E-024 | 6.04E-024 | 13%  |
| 8842.46110                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 6 | 3 | 1.31E-025 | 5.25E-025 | -75% |
| 8842.81030                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 6 | 3 | 5.28E-025 | 5.71E-025 | -8%  |
| 8842.89650                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 0 | 3 | 2.57E-023 | 2.20E-023 | 17%  |
| 8843.32300                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 8 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 8 | 1 | 4.19E-024 | 3.66E-024 | 14%  |
| 8843.32300                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 8 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 8 | 2 | 1.40E-024 | 1.23E-024 | 14%  |
| 8843.32300                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 6.17E-024 | 5.40E-024 | 14%  |
| 8843.55830                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 6 | 2 | 1.53E-025 | 2.02E-025 | -24% |
| 8844.72480                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 6 | 2 | 4.63E-025 | 4.63E-025 | 0%   |
| 8844.92630                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 6 | 1 | 1.36E-024 | 1.26E-024 | 8%   |
| 8845.76800                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 2 | 1 | 1.12E-023 | 9.30E-024 | 20%  |
| 8846.03450                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 7 | 3.93E-024 | 3.77E-024 | 4%   |
| 8846.10030                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 6 | 1 | 2.14E-024 | 2.38E-024 | -10% |
| 8846.13940                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 6 | 0 | 8.80E-025 | 8.18E-025 | 8%   |
| 8846.73610                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 2 | 4 | 0               | 1                     | 0 | 4 | 2 | 3 | 4.96E-025 | 5.73E-025 | -13% |
| 8846.94560                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 5 | 8.82E-026 | 1.23E-025 | -28% |
| 8847.07950                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 1.02E-023 | 8.73E-024 | 17%  |
| 8847.26060                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 0 | 7 | 1.29E-023 | 1.17E-023 | 10%  |
| 8847.72990                           | 0           | 6 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 7.91E-024 | 6.84E-024 | 16%  |
| 8848.07050                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 1 | 1 | 1 | 3.15E-022 | 2.49E-022 | 27%  |
| 8850.42480                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 3 | 0 | 8.31E-024 | 7.04E-024 | 18%  |
| 8850.76560                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 1 | 4 | 1.80E-023 | 1.60E-023 | 13%  |
| 8851.01590                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 8 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 8 | 1 | 9.05E-025 | 8.65E-025 | 5%   |
| 8851.01590                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 8 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 8 | 0 | 3.01E-025 | 2.88E-025 | 5%   |
| 8851.51440                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 0 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 1 | 0 | 1 | 1.29E-021 | 1.04E-021 | 24%  |
| 8852.03470                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 2 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 3 | 1 | 2.80E-024 | 2.54E-024 | 10%  |
| 8852.24070                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 2 | 3 | 1.68E-023 | 1.44E-023 | 17%  |
| 8853.79710                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 2 | 3 | 1.65E-024 | 1.46E-024 | 13%  |
| 8854.87820                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 1 | 4 | 1.25E-022 | 1.03E-022 | 21%  |
| 8855.08760                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 2 | 4 | 5.53E-024 | 3.85E-024 | 44%  |
| 8855.12450                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 0 | 4 | 7.36E-024 | 4.94E-024 | 49%  |
| 8856.89410                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 2 | 6 | 2.93E-025 | 2.71E-025 | 8%   |
| 8857.02750                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 2 | 4 | 2.99E-024 | 2.72E-024 | 10%  |
| 8857.46500                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 1 | 1 | 0 | 4.36E-022 | 3.49E-022 | 25%  |
| 8858.16780                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 2 | 6 | 2.83E-025 | 2.67E-025 | 6%   |
| 8858.45850                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 3 | 7 | 4.35E-025 | 3.78E-025 | 15%  |
| 8858.86250                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 1 | 6 | 2.81E-025 | 2.43E-025 | 16%  |
| 8858.86250                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 3 | 3 | 0               | 1                     | 0 | 4 | 3 | 2 | 2.82E-025 | 2.44E-025 | 16%  |
| 8859.27680                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 2 | 5 | 1.16E-025 | 1.19E-025 | -3%  |
| 8861.12590                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 1 | 1 | 0 | 4.80E-022 | 3.79E-022 | 27%  |
| 8861.34330                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 1.95E-023 | 1.73E-023 | 13%  |
| 8862.19200                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 2 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 3 | 6 | 5.78E-026 | 6.25E-026 | -8%  |
| 8862.68490                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 0 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 6 | 3.92E-025 | 3.99E-025 | -2%  |
| 8862.74770                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 2 | 3 | 0               | 1                     | 0 | 4 | 2 | 2 | 1.53E-025 | 1.35E-025 | 13%  |
| 8862.83690                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 2 | 5 | 1.07E-024 | 9.89E-025 | 8%   |
| 8863.34140                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 2 | 6 | 8.65E-025 | 7.85E-025 | 10%  |
| 8863.74410                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 1 | 6 | 6.21E-025 | 6.04E-025 | 3%   |
| 8864.74940                           | 1           | 2 | 1 | 8           | 0 | 8 | 0               | 1                     | 0 | 7 | 0 | 7 | 2.70E-025 | 3.25E-025 | -17% |
| 8865.03600                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 5 | 3.68E-024 | 3.27E-024 | 13%  |
| 8865.03600                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 0 | 7 | 1.36E-024 | 1.21E-024 | 12%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 8865.56630                           | 0           | 5 | 0 | 6           | 6 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 2.74E-026 | 4.09E-026 | -33% |
| 8865.56630                           | 2           | 1 | 0 | 2           | 2 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 1 | 1.12E-025 | 1.67E-025 | -33% |
| 8865.70650                           | 1           | 2 | 1 | 5           | 4 | 2 | 0               | 1                     | 0 | 4  | 4 | 1 | 8.99E-026 | 2.75E-025 | -67% |
| 8866.16710                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2 | 1.34E-021 | 1.08E-021 | 24%  |
| 8867.29430                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 1.88E-023 | 1.60E-023 | 18%  |
| 8867.70810                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 2 | 2.86E-025 | 3.04E-025 | -6%  |
| 8868.73230                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 1.97E-024 | 1.85E-024 | 6%   |
| 8868.93880                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 1.78E-023 | 1.58E-023 | 13%  |
| 8869.18300                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 2 | 7.05E-026 | 1.68E-025 | -58% |
| 8869.87310                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 0 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2 | 5.10E-022 | 3.98E-022 | 28%  |
| 8870.39010                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6 | 6.29E-024 | 5.67E-024 | 11%  |
| 8872.14700                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 1.06E-023 | 9.00E-024 | 18%  |
| 8873.55760                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 1.86E-025 | 2.22E-025 | -16% |
| 8874.35980                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 2.31E-023 | 1.94E-023 | 19%  |
| 8874.54470                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2 | 6.88E-024 | 5.19E-024 | 33%  |
| 8874.54470                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 3 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 3 | 8 | 6.29E-024 | 4.75E-024 | 32%  |
| 8874.58400                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1 | 4.83E-023 | 4.15E-023 | 16%  |
| 8875.29090                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6 | 5.31E-024 | 4.79E-024 | 11%  |
| 8877.25980                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3 | 6.50E-023 | 5.37E-023 | 21%  |
| 8878.18620                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 0 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 1.28E-023 | 1.08E-023 | 19%  |
| 8878.41730                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6 | 5.61E-024 | 5.26E-024 | 7%   |
| 8879.11980                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1 | 6.40E-022 | 5.37E-022 | 19%  |
| 8880.03390                           | 1           | 2 | 1 | 7           | 2 | 6 | 0               | 1                     | 0 | 6  | 2 | 5 | 2.52E-025 | 2.41E-025 | 5%   |
| 8882.87260                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3 | 4.56E-022 | 3.76E-022 | 21%  |
| 8883.37920                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4 | 2.37E-023 | 1.97E-023 | 20%  |
| 8883.63260                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5 | 2.53E-025 | 3.84E-025 | -34% |
| 8884.01100                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 0 | 2.11E-022 | 1.74E-022 | 21%  |
| 8884.22170                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 2 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8 | 1.10E-025 | 2.15E-025 | -49% |
| 8884.49880                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 1 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1 | 3.61E-022 | 2.94E-022 | 23%  |
| 8885.57400                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3 | 1.43E-021 | 1.15E-021 | 24%  |
| 8887.78780                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2 | 6.62E-023 | 5.77E-023 | 15%  |
| 8888.27820                           | 1           | 2 | 1 | 6           | 4 | 2 | 0               | 1                     | 0 | 5  | 4 | 1 | 7.76E-026 | 1.00E-025 | -22% |
| 8888.86250                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 1 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 3.73E-024 | 3.34E-024 | 12%  |
| 8889.52740                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 7.96E-024 | 6.94E-024 | 15%  |
| 8889.60630                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 5.49E-025 | 5.23E-025 | 5%   |
| 8889.88950                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 0 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7 | 2.39E-024 | 2.45E-024 | -2%  |
| 8890.26280                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7 | 9.07E-024 | 8.04E-024 | 13%  |
| 8890.47830                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5 | 6.84E-025 | 6.32E-025 | 8%   |
| 8892.08640                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 4 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 3 | 8 | 5.05E-025 | 4.93E-025 | 2%   |
| 8892.69470                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 5.38E-023 | 4.50E-023 | 20%  |
| 8893.51200                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 2.34E-023 | 2.04E-023 | 15%  |
| 8893.60690                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7 | 8.22E-024 | 6.70E-024 | 23%  |
| 8893.72030                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 3.74E-023 | 3.20E-023 | 17%  |
| 8894.17700                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 4 | 5 | 3.45E-026 | 5.35E-025 | -94% |
| 8894.60000                           | 2           | 1 | 0 | 9           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 0 | 9 | 1.77E-025 | 1.85E-025 | -4%  |
| 8897.05300                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2 | 1.15E-024 | 1.08E-024 | 6%   |
| 8898.07020                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3 | 1.13E-023 | 1.02E-023 | 11%  |
| 8898.19430                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 1.16E-021 | 9.45E-022 | 23%  |
| 8898.75530                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4 | 6.62E-024 | 5.37E-024 | 23%  |
| 8899.13040                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 2.66E-022 | 2.23E-022 | 19%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A  |            |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|----|------------|-----------|------|
| 8899.69360                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 0 | 5  | 0               | 0                     | 4  | 3.92E-022  | 3.21E-022 | 22%  |
| 8899.92730                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 6  | 4.52E-025  | 4.82E-025 | -6%  |
| 8900.03690                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 6  | 5.18E-026  | 2.42E-025 | -79% |
| 8900.30620                           | 2           | 1 | 0 | 9           | 0 | 9  | 0               | 0                     | 8  | 5.88E-024  | 5.16E-024 | 14%  |
| 8900.75160                           | 2           | 1 | 0 | 9           | 1 | 9  | 0               | 0                     | 8  | 1.741E-024 | 1.55E-024 | 12%  |
| 8900.87430                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 5  | 2.51E-025  | 1.63E-025 | 54%  |
| 8901.03460                           | 0           | 1 | 2 | 1           | 1 | 1  | 0               | 0                     | 2  | 2.89E-024  | 2.56E-024 | 13%  |
| 8904.25290                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 6  | 1.11E-023  | 9.28E-024 | 20%  |
| 8905.24000                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 7  | 7.41E-025  | 6.68E-025 | 11%  |
| 8905.72580                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 7 | 2  | 0               | 0                     | 7  | 9.13E-026  | 8.69E-026 | 5%   |
| 8905.72580                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 7 | 1  | 0               | 0                     | 7  | 2.73E-025  | 2.60E-025 | 5%   |
| 8906.35100                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 3  | 1.09E-021  | 8.66E-022 | 26%  |
| 8906.66360                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 5  | 1.75E-023  | 1.46E-023 | 20%  |
| 8907.67510                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 5  | 1.44E-025  | 3.19E-025 | -55% |
| 8907.90400                           | 0           | 1 | 2 | 1           | 1 | 0  | 0               | 0                     | 2  | 4.91E-024  | 4.14E-024 | 19%  |
| 8907.90400                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 3  | 1.02E-022  | 8.60E-023 | 19%  |
| 8908.74400                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 0 | 3  | 0               | 0                     | 4  | 2.63E-023  | 2.18E-023 | 21%  |
| 8909.11250                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 3  | 3.11E-022  | 2.79E-022 | 11%  |
| 8909.36210                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 3  | 7.76E-022  | 6.58E-022 | 18%  |
| 8909.82680                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 6  | 5.52E-024  | 4.84E-024 | 14%  |
| 8909.95520                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 0 | 10 | 0               | 0                     | 9  | 9.87E-025  | 8.25E-025 | 20%  |
| 8910.67790                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 1 | 10 | 0               | 0                     | 9  | 2.98E-024  | 2.60E-024 | 15%  |
| 8911.48160                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 7  | 6.37E-024  | 5.62E-024 | 13%  |
| 8911.53790                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 5  | 2.14E-023  | 1.87E-023 | 14%  |
| 8911.73340                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 5  | 0               | 0                     | 7  | 1.13E-023  | 9.94E-024 | 14%  |
| 8912.25680                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 6  | 0               | 0                     | 5  | 8.53E-022  | 7.35E-022 | 16%  |
| 8912.59050                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 9  | 9.22E-025  | 8.95E-025 | 3%   |
| 8912.98340                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 0 | 6  | 0               | 0                     | 5  | 2.84E-022  | 2.45E-022 | 16%  |
| 8913.95020                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 7  | 2.81E-025  | 2.17E-025 | 29%  |
| 8915.05120                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 2 | 6  | 0               | 0                     | 6  | 3.09E-024  | 2.49E-024 | 24%  |
| 8915.69590                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 4  | 8.36E-025  | 7.74E-025 | 8%   |
| 8917.00600                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 4  | 3.74E-024  | 3.29E-024 | 14%  |
| 8917.00600                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 6  | 0               | 0                     | 7  | 1.83E-023  | 1.61E-023 | 14%  |
| 8917.51020                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 6  | 0               | 0                     | 8  | 1.99E-024  | 1.97E-024 | 1%   |
| 8917.68030                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 4  | 6.95E-022  | 5.73E-022 | 21%  |
| 8917.92020                           | 2           | 1 | 0 | 11          | 1 | 11 | 0               | 0                     | 10 | 3.54E-025  | 4.27E-025 | -17% |
| 8918.49750                           | 2           | 1 | 0 | 11          | 0 | 11 | 0               | 0                     | 10 | 8.99E-025  | 8.15E-025 | 10%  |
| 8918.49750                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 4  | 9.47E-025  | 8.59E-025 | 10%  |
| 8920.75700                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 3  | 1.95E-025  | 2.17E-025 | -10% |
| 8921.16240                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 3 | 0  | 0               | 0                     | 3  | 6.81E-025  | 6.24E-025 | 9%   |
| 8922.17040                           | 1           | 1 | 1 | 2           | 2 | 0  | 0               | 0                     | 1  | 2.31E-023  | 2.01E-023 | 15%  |
| 8922.89960                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 8  | 1.23E-025  | 7.43E-026 | 66%  |
| 8923.02200                           | 2           | 1 | 0 | 3           | 3 | 0  | 0               | 0                     | 2  | 2.64E-025  | 2.65E-025 | 0%   |
| 8924.17560                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 7  | 3.72E-024  | 3.19E-024 | 17%  |
| 8924.17560                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 3 | 8  | 0               | 0                     | 10 | 8.98E-025  | 7.68E-025 | 17%  |
| 8925.03190                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 3  | 7.71E-024  | 6.19E-024 | 25%  |
| 8925.22220                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 6  | 5.52E-022  | 4.87E-022 | 13%  |
| 8925.49360                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 1 | 4  | 0               | 0                     | 4  | 2.70E-022  | 1.76E-022 | 53%  |
| 8925.49360                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 0 | 7  | 0               | 0                     | 6  | 2.23E-022  | 1.46E-022 | 53%  |
| 8926.00080                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 7  | 0               | 0                     | 9  | 2.55E-024  | 2.39E-024 | 7%   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 8926.47290                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 0 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 7.66E-024 | 7.03E-024 | 9%   |
| 8927.05140                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 0  | 1.12E-024 | 1.02E-024 | 10%  |
| 8927.28500                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 8.65E-024 | 7.48E-024 | 16%  |
| 8928.47870                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 3.22E-022 | 2.73E-022 | 18%  |
| 8929.17440                           | 2           | 1 | 0 | 9           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7  | 1.49E-024 | 1.46E-024 | 2%   |
| 8930.15680                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 0 | 8  | 3.18E-024 | 2.94E-024 | 8%   |
| 8930.47310                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3  | 1.89E-024 | 1.72E-024 | 10%  |
| 8930.93380                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 0 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 3 | 1  | 1.67E-025 | 1.64E-025 | 2%   |
| 8931.15460                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 2 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 9  | 6.76E-025 | 6.52E-025 | 4%   |
| 8931.34200                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1  | 5.22E-025 | 4.89E-025 | 7%   |
| 8931.59370                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4  | 4.26E-025 | 4.53E-025 | -6%  |
| 8932.21880                           | 0           | 3 | 1 | 9           | 3 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 4.71E-024 | 4.21E-024 | 12%  |
| 8932.53030                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1  | 1.19E-022 | 1.02E-022 | 17%  |
| 8932.65130                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 4  | 5.63E-025 | 6.02E-025 | -6%  |
| 8932.76800                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 1.02E-024 | 9.46E-025 | 8%   |
| 8933.22120                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 8  | 1.28E-025 | 1.93E-025 | -34% |
| 8933.46330                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2  | 2.14E-022 | 1.72E-022 | 24%  |
| 8933.67430                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 0 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 2  | 2.67E-023 | 2.36E-023 | 13%  |
| 8933.88340                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4  | 6.61E-025 | 5.92E-025 | 12%  |
| 8934.05870                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 5  | 4.78E-026 | 1.24E-025 | -61% |
| 8934.74050                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4  | 1.66E-022 | 1.42E-022 | 17%  |
| 8934.91740                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 7  | 9.13E-025 | 9.26E-025 | -1%  |
| 8935.07580                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 2.05E-025 | 2.93E-025 | -30% |
| 8935.55010                           | 1           | 1 | 1 | 13          | 3 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 14 | 1 | 14 | 3.32E-025 | 3.10E-025 | 7%   |
| 8935.59220                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 4 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 2 | 9  | 1.67E-025 | 1.57E-025 | 6%   |
| 8935.87810                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2  | 1.60E-024 | 1.49E-024 | 7%   |
| 8936.00650                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 3 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 1 | 9  | 3.24E-025 | 3.53E-025 | -8%  |
| 8936.13280                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5  | 1.59E-025 | 3.29E-025 | -52% |
| 8936.26250                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1  | 1.23E-022 | 1.01E-022 | 22%  |
| 8936.41030                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 0  | 3.94E-023 | 3.39E-023 | 16%  |
| 8936.60810                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3  | 1.26E-024 | 1.22E-024 | 3%   |
| 8937.13170                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 7  | 1.13E-022 | 9.24E-023 | 22%  |
| 8937.23390                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 0 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7  | 3.22E-022 | 3.02E-022 | 7%   |
| 8937.63220                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 4.05E-025 | 4.80E-025 | -16% |
| 8940.26340                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 5 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1  | 1.86E-024 | 1.83E-024 | 2%   |
| 8940.44620                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1  | 4.66E-024 | 4.12E-024 | 13%  |
| 8940.65600                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 0 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3  | 1.29E-024 | 1.19E-024 | 8%   |
| 8940.85840                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 5  | 8.07E-026 | 1.63E-025 | -50% |
| 8941.27090                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6  | 8.13E-025 | 9.00E-025 | -10% |
| 8941.51530                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 1 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4  | 5.78E-022 | 4.88E-022 | 18%  |
| 8942.47440                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 2 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 2 | 10 | 1.02E-025 | 1.21E-025 | -16% |
| 8943.38130                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1  | 3.00E-024 | 2.81E-024 | 7%   |
| 8943.99400                           | 0           | 1 | 2 | 1           | 0 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2  | 1.86E-023 | 1.51E-023 | 23%  |
| 8944.29030                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 2 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 0 | 9  | 2.96E-024 | 2.85E-024 | 4%   |
| 8945.62040                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 2 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 1 | 8  | 1.06E-024 | 9.70E-025 | 9%   |
| 8946.53150                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 3 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 11 | 1 | 10 | 3.28E-025 | 2.68E-025 | 22%  |
| 8947.34490                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 2.57E-025 | 2.80E-025 | -8%  |
| 8948.14990                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 0 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 0 | 8  | 5.56E-023 | 5.16E-023 | 8%   |
| 8948.44170                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 1 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 8  | 1.68E-022 | 1.47E-022 | 14%  |
| 8948.76460                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3  | 8.93E-023 | 7.67E-023 | 16%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A         |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|-----------|-----------|------|
| 8949.73190                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 2  | 0 0 0           | 5 0 5                 | 9.16E-025 | 9.80E-025 | -7%  |
| 8949.99570                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 4 | 2  | 0 0 0           | 6 3 3                 | 1.41E-025 | 4.00E-025 | -65% |
| 8950.08380                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 2 | 1  | 0 0 0           | 2 0 2                 | 1.56E-023 | 1.37E-023 | 14%  |
| 8950.33470                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 6  | 0 0 0           | 6 2 5                 | 3.05E-022 | 2.62E-022 | 16%  |
| 8951.68070                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 4  | 0 0 0           | 7 2 5                 | 2.34E-024 | 2.11E-024 | 11%  |
| 8952.43160                           | 0           | 3 | 1 | 10          | 2 | 8  | 0 0 0           | 9 0 9                 | 1.53E-023 | 1.34E-023 | 14%  |
| 8953.48040                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 4  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 1.47E-022 | 1.22E-022 | 20%  |
| 8954.13100                           | 0           | 6 | 0 | 6           | 1 | 6  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 9.55E-023 | 8.51E-023 | 12%  |
| 8954.32980                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 1 | 9  | 0 0 0           | 10 1 10               | 1.38E-024 | 7.77E-025 | 78%  |
| 8955.05490                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 1 | 6  | 0 0 0           | 6 1 5                 | 1.08E-022 | 9.26E-023 | 17%  |
| 8955.31620                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 2  | 0 0 0           | 6 2 5                 | 5.04E-025 | 5.23E-025 | -4%  |
| 8955.51690                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 3  | 0 0 0           | 4 2 2                 | 8.41E-024 | 7.36E-024 | 14%  |
| 8955.72380                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 5 | 2  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 1.12E-022 | 9.72E-023 | 15%  |
| 8956.29460                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 3  | 0 0 0           | 5 3 2                 | 2.36E-022 | 1.97E-022 | 20%  |
| 8957.19100                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 3  | 0 0 0           | 5 4 2                 | 3.96E-023 | 5.21E-023 | -24% |
| 8957.45690                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 1 | 3  | 0 0 0           | 4 2 2                 | 2.38E-024 | 2.17E-024 | 10%  |
| 8957.60150                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 1 | 10 | 0 0 0           | 9 1 9                 | 2.65E-023 | 2.39E-023 | 11%  |
| 8957.86790                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 2  | 0 0 0           | 5 4 1                 | 1.20E-022 | 1.04E-022 | 15%  |
| 8958.63540                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 0 | 10 | 0 0 0           | 9 0 9                 | 5.61E-023 | 5.11E-023 | 10%  |
| 8959.00030                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 1 | 1  | 0 0 0           | 2 2 0                 | 1.93E-024 | 1.64E-024 | 18%  |
| 8960.21660                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 0 | 3  | 0 0 0           | 3 1 2                 | 8.79E-024 | 7.84E-024 | 12%  |
| 8960.35280                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 1 | 2  | 0 0 0           | 3 2 1                 | 8.29E-024 | 7.41E-024 | 12%  |
| 8961.84400                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 1  | 0 0 0           | 5 3 2                 | 3.21E-023 | 2.84E-023 | 13%  |
| 8962.47760                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 2 | 1  | 0 0 0           | 3 1 2                 | 2.78E-024 | 2.42E-024 | 15%  |
| 8962.82950                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 4 | 1  | 0 0 0           | 6 3 4                 | 3.52E-025 | 3.68E-025 | -4%  |
| 8962.99960                           | 0           | 1 | 2 | 0           | 0 | 0  | 0 0 0           | 1 1 1                 | 3.94E-024 | 3.50E-024 | 13%  |
| 8964.00810                           | 1           | 3 | 0 | 10          | 3 | 8  | 0 0 0           | 9 0 9                 | 8.23E-024 | 7.15E-024 | 15%  |
| 8964.53010                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 2  | 0 0 0           | 5 5 1                 | 1.21E-023 | 9.73E-024 | 24%  |
| 8964.53010                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 1  | 0 0 0           | 5 5 0                 | 3.65E-023 | 2.92E-023 | 25%  |
| 8964.61360                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 7  | 0 0 0           | 7 2 6                 | 5.43E-023 | 4.79E-023 | 13%  |
| 8964.99900                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 3 | 5  | 0 0 0           | 6 2 4                 | 1.03E-023 | 9.27E-024 | 11%  |
| 8965.24080                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 2 | 10 | 0 0 0           | 11 0 11               | 5.20E-025 | 5.36E-025 | -3%  |
| 8966.24310                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 2  | 0 0 0           | 5 3 3                 | 1.21E-024 | 1.12E-024 | 8%   |
| 8966.86560                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 1 | 11 | 0 0 0           | 10 1 10               | 3.32E-023 | 2.79E-023 | 19%  |
| 8966.91350                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 0 | 11 | 0 0 0           | 10 0 10               | 1.35E-023 | 6.60E-024 | 105% |
| 8966.96880                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 5  | 0 0 0           | 6 3 4                 | 1.61E-022 | 1.48E-022 | 9%   |
| 8967.10900                           | 0           | 1 | 2 | 1           | 1 | 1  | 0 0 0           | 2 0 2                 | 4.22E-024 | 2.25E-024 | 88%  |
| 8967.23330                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 1 | 7  | 0 0 0           | 7 1 6                 | 1.69E-022 | 1.51E-022 | 12%  |
| 8967.45480                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 1 | 10 | 0 0 0           | 11 1 11               | 1.50E-025 | 4.21E-025 | -64% |
| 8967.74430                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 3 | 4  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 8.25E-023 | 7.09E-023 | 16%  |
| 8968.43940                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 1  | 0 0 0           | 5 2 4                 | 3.49E-025 | 3.74E-025 | -7%  |
| 8969.69370                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 1  | 0 0 0           | 4 1 4                 | 3.19E-024 | 2.65E-024 | 20%  |
| 8970.17630                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 5 | 3  | 0 0 0           | 6 2 4                 | 1.94E-023 | 1.58E-023 | 23%  |
| 8971.42330                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 1  | 0 0 0           | 4 2 2                 | 2.57E-025 | 3.07E-025 | -16% |
| 8971.51900                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 3 | 6  | 0 0 0           | 7 2 5                 | 7.88E-024 | 7.14E-024 | 10%  |
| 8973.57550                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 0 | 2  | 0 0 0           | 2 1 1                 | 4.62E-024 | 3.84E-024 | 20%  |
| 8974.33750                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 1 | 12 | 0 0 0           | 11 1 11               | 4.43E-024 | 3.83E-024 | 16%  |
| 8974.40520                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 1 | 11 | 0 0 0           | 12 1 12               | 2.14E-025 | 1.51E-025 | 42%  |
| 8974.62970                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 0 | 12 | 0 0 0           | 11 0 11               | 1.33E-023 | 1.15E-023 | 16%  |
| 8974.71710                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 2  | 0 0 0           | 4 2 3                 | 1.82E-024 | 1.55E-024 | 17%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A         |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|-----------|-----------|------|
| 8976.90870                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 2  | 0 0 0           | 6 3 3                 | 1.61E-023 | 1.36E-023 | 18%  |
| 8977.36560                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 4  | 0 0 0           | 6 4 3                 | 8.14E-023 | 7.15E-023 | 14%  |
| 8977.86010                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 2  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 1.96E-024 | 1.79E-024 | 9%   |
| 8978.73950                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 1 | 8  | 0 0 0           | 8 1 7                 | 2.65E-023 | 2.32E-023 | 14%  |
| 8978.85830                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 2 | 8  | 0 0 0           | 8 2 7                 | 6.71E-023 | 5.91E-023 | 14%  |
| 8979.52970                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 3  | 0 0 0           | 6 4 2                 | 2.75E-023 | 2.31E-023 | 19%  |
| 8979.81310                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 2 | 3  | 0 0 0           | 4 1 4                 | 2.91E-025 | 3.66E-025 | -20% |
| 8980.92640                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 3 | 6  | 0 0 0           | 10 2 9                | 6.31E-025 | 5.75E-025 | 10%  |
| 8981.11880                           | 0           | 1 | 2 | 1           | 0 | 1  | 0 0 0           | 1 1 0                 | 1.39E-023 | 1.14E-023 | 22%  |
| 8981.94100                           | 1           | 1 | 1 | 13          | 0 | 13 | 0 0 0           | 12 0 12               | 1.57E-024 | 1.32E-024 | 19%  |
| 8981.94100                           | 1           | 1 | 1 | 13          | 1 | 13 | 0 0 0           | 12 1 12               | 4.71E-024 | 3.96E-024 | 19%  |
| 8982.12560                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 5  | 0 0 0           | 6 2 4                 | 5.21E-023 | 4.42E-023 | 18%  |
| 8982.59490                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 4 | 1  | 0 0 0           | 3 3 0                 | 9.04E-024 | 7.41E-024 | 22%  |
| 8982.76030                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 4  | 0 0 0           | 6 3 3                 | 3.72E-023 | 3.24E-023 | 15%  |
| 8983.70570                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 6  | 0 0 0           | 7 3 5                 | 2.94E-023 | 2.54E-023 | 16%  |
| 8984.62650                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 2  | 0 0 0           | 6 5 1                 | 7.66E-024 | 6.19E-024 | 24%  |
| 8984.62650                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 3  | 0 0 0           | 6 5 2                 | 2.30E-023 | 1.86E-023 | 24%  |
| 8984.75800                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 2 | 2  | 0 0 0           | 3 0 3                 | 4.14E-023 | 4.97E-023 | -17% |
| 8986.99340                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 6  | 0 0 0           | 5 2 3                 | 2.95E-024 | 2.76E-024 | 7%   |
| 8987.07640                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 0  | 0 0 0           | 4 2 3                 | 6.27E-025 | 6.96E-025 | -10% |
| 8987.63080                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 1  | 0 0 0           | 4 1 4                 | 9.61E-025 | 9.45E-025 | 2%   |
| 8987.69770                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 2 | 9  | 0 0 0           | 9 2 8                 | 1.12E-023 | 9.70E-024 | 15%  |
| 8988.22730                           | 1           | 1 | 1 | 14          | 1 | 14 | 0 0 0           | 13 1 13               | 4.15E-025 | 3.52E-025 | 18%  |
| 8988.22730                           | 1           | 1 | 1 | 14          | 0 | 14 | 0 0 0           | 13 0 13               | 1.25E-024 | 1.06E-024 | 18%  |
| 8988.47520                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 5 | 0  | 0 0 0           | 6 4 3                 | 6.47E-026 | 3.97E-026 | 63%  |
| 8988.55680                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 2  | 0 0 0           | 5 1 5                 | 1.48E-025 | 8.17E-026 | 81%  |
| 8989.80070                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 1 | 9  | 0 0 0           | 9 1 8                 | 3.36E-023 | 2.87E-023 | 17%  |
| 8991.07620                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 5 | 3  | 0 0 0           | 7 3 4                 | 6.83E-024 | 5.92E-024 | 15%  |
| 8991.54290                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 3  | 0 0 0           | 6 3 4                 | 2.76E-024 | 2.58E-024 | 7%   |
| 8992.07380                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 6 | 1  | 0 0 0           | 6 6 0                 | 1.65E-024 | 1.46E-024 | 13%  |
| 8992.07380                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 6 | 2  | 0 0 0           | 6 6 1                 | 4.96E-024 | 4.37E-024 | 14%  |
| 8993.55690                           | 1           | 1 | 1 | 15          | 1 | 15 | 0 0 0           | 14 1 14               | 4.38E-025 | 4.09E-025 | 7%   |
| 8993.55690                           | 1           | 1 | 1 | 15          | 0 | 15 | 0 0 0           | 14 0 14               | 1.46E-025 | 1.37E-025 | 7%   |
| 8994.97580                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 2 | 0  | 0 0 0           | 3 1 3                 | 3.65E-025 | 3.80E-025 | -4%  |
| 8995.45610                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 5  | 0 0 0           | 9 3 6                 | 1.25E-025 | 8.44E-026 | 48%  |
| 8996.43950                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 5  | 0 0 0           | 7 4 4                 | 1.52E-023 | 1.30E-023 | 17%  |
| 8996.79620                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 6  | 0 0 0           | 7 2 5                 | 9.93E-023 | 1.03E-022 | -4%  |
| 8997.43630                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 3  | 0 0 0           | 6 1 6                 | 1.11E-025 | 1.26E-025 | -12% |
| 8997.97190                           | 1           | 1 | 1 | 16          | 1 | 16 | 0 0 0           | 15 1 15               | 3.70E-026 | 3.14E-026 | 18%  |
| 8997.97190                           | 1           | 1 | 1 | 16          | 0 | 16 | 0 0 0           | 15 0 15               | 1.11E-025 | 9.37E-026 | 18%  |
| 8998.71660                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 2 | 10 | 0 0 0           | 10 2 9                | 1.32E-023 | 1.16E-023 | 14%  |
| 8998.96460                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 7  | 0 0 0           | 8 3 6                 | 4.04E-023 | 3.46E-023 | 17%  |
| 9001.47750                           | 1           | 1 | 1 | 17          | 1 | 17 | 0 0 0           | 16 1 16               | 3.72E-026 | 1.06E-025 | -65% |
| 9001.47750                           | 1           | 1 | 1 | 17          | 0 | 17 | 0 0 0           | 16 0 16               | 1.23E-026 | 3.51E-026 | -65% |
| 9001.56040                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 1 | 10 | 0 0 0           | 10 1 9                | 4.11E-024 | 3.60E-024 | 14%  |
| 9001.65550                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 4  | 0 0 0           | 7 4 3                 | 4.38E-023 | 3.85E-023 | 14%  |
| 9003.43360                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 0  | 0 0 0           | 2 1 1                 | 2.97E-024 | 2.62E-024 | 13%  |
| 9004.17270                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 5  | 0 0 0           | 7 3 4                 | 6.96E-023 | 6.32E-023 | 10%  |
| 9004.23140                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 4  | 0 0 0           | 7 5 3                 | 6.43E-024 | 5.84E-024 | 10%  |
| 9004.40700                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 3  | 0 0 0           | 7 5 2                 | 1.81E-023 | 1.54E-023 | 18%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |           |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|-----------|-----------|-----------|------|
| 9005.16070                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 4 | 0  | 0               | 0                     | 4 | 2  | 3 | 9.22E-025 | 8.59E-025 | 7%        |      |
| 9006.33050                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 2 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 5         | 4.13E-025 | 3.47E-025 | 19%  |
| 9007.40880                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 1 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 1 | 10        | 4.58E-024 | 4.04E-024 | 13%  |
| 9008.33560                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4         | 4.72E-025 | 4.88E-025 | -3%  |
| 9008.56840                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 2 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 2 | 10        | 1.57E-024 | 1.40E-024 | 12%  |
| 9009.28680                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 6 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 7 | 0         | 2.76E-025 | 2.48E-025 | 11%  |
| 9010.06470                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6         | 1.46E-023 | 1.26E-023 | 16%  |
| 9010.83300                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 6 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 1         | 5.02E-024 | 4.24E-024 | 18%  |
| 9010.95580                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 6 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 2         | 1.66E-024 | 1.55E-024 | 7%   |
| 9012.79290                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 3 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 7         | 5.57E-024 | 4.78E-024 | 17%  |
| 9014.13110                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 5         | 2.06E-023 | 1.79E-023 | 15%  |
| 9014.22990                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 0         | 3.47E-025 | 3.46E-025 | 0%   |
| 9015.01100                           | 1           | 1 | 1 | 13          | 2 | 12 | 0               | 0                     | 0 | 12 | 2 | 11        | 1.20E-024 | 1.12E-024 | 7%   |
| 9015.29780                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5         | 1.12E-024 | 1.03E-024 | 9%   |
| 9015.47680                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 5 | 1         | 1.30E-025 | 7.96E-026 | 63%  |
| 9015.84520                           | 2           | 1 | 0 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3         | 8.55E-025 | 7.86E-025 | 9%   |
| 9015.89890                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 3 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 7         | 6.26E-024 | 5.40E-024 | 16%  |
| 9016.06250                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 6 | 1         | 7.26E-025 | 6.98E-025 | 4%   |
| 9016.79140                           | 1           | 1 | 1 | 13          | 1 | 12 | 0               | 0                     | 0 | 12 | 1 | 11        | 4.90E-025 | 4.09E-025 | 20%  |
| 9017.85380                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6         | 6.32E-025 | 5.67E-025 | 11%  |
| 9018.90200                           | 1           | 1 | 1 | 3           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2         | 5.82E-024 | 4.85E-024 | 20%  |
| 9019.04140                           | 0           | 1 | 2 | 1           | 1 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 0 | 1         | 1.94E-023 | 1.58E-023 | 23%  |
| 9020.11770                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 4 | 1         | 1.28E-025 | 8.09E-026 | 58%  |
| 9021.16550                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2         | 1.91E-023 | 1.61E-023 | 19%  |
| 9022.86780                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 2 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 7         | 1.19E-023 | 1.02E-023 | 17%  |
| 9023.20750                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 5 | 4         | 8.84E-024 | 7.70E-024 | 15%  |
| 9023.40540                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6         | 8.23E-026 | 7.30E-026 | 13%  |
| 9023.90120                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 4         | 6.65E-024 | 5.81E-024 | 14%  |
| 9023.94440                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 5 | 3         | 3.01E-024 | 1.96E-024 | 54%  |
| 9024.53150                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 5         | 9.10E-024 | 7.75E-024 | 17%  |
| 9024.77180                           | 1           | 1 | 1 | 14          | 1 | 13 | 0               | 0                     | 0 | 13 | 1 | 12        | 4.50E-025 | 4.39E-025 | 3%   |
| 9025.07320                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 1 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2         | 7.62E-024 | 6.98E-024 | 9%   |
| 9025.25180                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 3 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 3 | 8         | 6.04E-024 | 5.70E-024 | 6%   |
| 9025.94570                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 2 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4         | 1.08E-024 | 9.44E-025 | 14%  |
| 9027.19010                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4         | 7.26E-024 | 6.58E-024 | 10%  |
| 9027.70330                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6         | 2.66E-025 | 3.26E-025 | -18% |
| 9029.18920                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 6 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 2         | 8.98E-025 | 8.37E-025 | 7%   |
| 9029.56510                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 6 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 3         | 2.77E-024 | 2.48E-024 | 12%  |
| 9029.64220                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 2 | 9  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 2 | 8         | 1.96E-024 | 1.79E-024 | 9%   |
| 9030.30480                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 4 | 6         | 2.77E-024 | 2.41E-024 | 15%  |
| 9030.86990                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4         | 2.29E-025 | 1.34E-025 | 71%  |
| 9031.61370                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 7 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 7 | 0         | 9.35E-025 | 8.80E-025 | 6%   |
| 9031.61370                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 7 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 7 | 1         | 3.10E-025 | 2.94E-025 | 5%   |
| 9031.61370                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 0 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 1         | 1.36E-024 | 1.28E-024 | 6%   |
| 9031.77200                           | 1           | 1 | 1 | 15          | 2 | 14 | 0               | 0                     | 0 | 14 | 2 | 13        | 1.20E-025 | 1.00E-025 | 20%  |
| 9034.90410                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 3 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 4 | 1         | 2.82E-025 | 2.88E-025 | -2%  |
| 9035.74790                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3         | 1.82E-023 | 1.50E-023 | 21%  |
| 9036.44470                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 3 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 3 | 9         | 6.00E-025 | 5.98E-025 | 0%   |
| 9036.55690                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2         | 5.48E-025 | 5.24E-025 | 5%   |
| 9037.19810                           | 0           | 1 | 2 | 1           | 1 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 0  | 0 | 0         | 4.16E-024 | 3.52E-024 | 18%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |    | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |    |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|----|-----------------|-----------------------|---|----|---|----|-----------|-----------|------|
| 9037.60920                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 2 | 1  | 6.23E-025 | 5.37E-025 | 16%  |
| 9037.76660                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 3 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 6  | 6.64E-024 | 5.76E-024 | 15%  |
| 9038.22600                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 1  | 7.17E-025 | 6.13E-025 | 17%  |
| 9038.77910                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 8.51E-025 | 7.95E-025 | 7%   |
| 9039.01750                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 6 | 2  | 2.21E-025 | 3.20E-025 | -31% |
| 9039.10500                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 2  | 1.77E-023 | 1.48E-023 | 20%  |
| 9039.68680                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3  | 5.20E-024 | 4.51E-024 | 15%  |
| 9040.41420                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 5 | 2  | 2.24E-025 | 1.97E-025 | 14%  |
| 9040.41420                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 2 | 10 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 2 | 9  | 2.05E-024 | 1.79E-024 | 15%  |
| 9040.87570                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3  | 7.96E-024 | 6.56E-024 | 21%  |
| 9041.24680                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 5 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 5 | 5  | 1.27E-024 | 1.10E-024 | 15%  |
| 9042.07840                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 2 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 1  | 4.18E-024 | 3.57E-024 | 17%  |
| 9043.42030                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 5 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 5 | 4  | 3.72E-024 | 3.41E-024 | 9%   |
| 9044.44160                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 4 | 5  | 6.99E-024 | 6.00E-024 | 17%  |
| 9044.92080                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 4 | 8  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 4 | 7  | 2.96E-024 | 2.54E-024 | 17%  |
| 9045.05510                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3  | 3.76E-024 | 3.23E-024 | 16%  |
| 9045.23330                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4  | 1.05E-023 | 9.19E-024 | 14%  |
| 9046.54980                           | 1           | 1 | 1 | 13          | 3 | 11 | 0               | 0                     | 0 | 12 | 3 | 10 | 5.91E-025 | 5.51E-025 | 7%   |
| 9047.04650                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 6 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 6 | 3  | 1.19E-024 | 1.09E-024 | 9%   |
| 9047.29330                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 7  | 1.92E-025 | 2.17E-025 | -12% |
| 9048.61020                           | 0           | 3 | 1 | 5           | 5 | 0  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 3  | 8.75E-026 | 4.92E-026 | 78%  |
| 9049.24600                           | 2           | 1 | 0 | 5           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4  | 2.81E-025 | 3.37E-025 | -17% |
| 9050.84460                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 2.69E-024 | 2.44E-024 | 10%  |
| 9051.18370                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4  | 4.04E-024 | 3.63E-024 | 11%  |
| 9053.22640                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 7 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 1  | 1.44E-025 | 1.23E-025 | 17%  |
| 9053.22640                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 7 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 7 | 2  | 4.32E-025 | 3.67E-025 | 18%  |
| 9054.08500                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 0 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2  | 7.80E-024 | 7.06E-024 | 10%  |
| 9054.48890                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 1 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 1  | 0 | 1  | 1.33E-023 | 1.13E-023 | 18%  |
| 9054.81310                           | 1           | 1 | 1 | 14          | 2 | 12 | 0               | 0                     | 0 | 13 | 2 | 11 | 1.49E-025 | 1.59E-025 | -6%  |
| 9055.18820                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 5 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2  | 1.40E-025 | 1.25E-025 | 12%  |
| 9055.29440                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 4 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 6  | 5.27E-024 | 4.56E-024 | 16%  |
| 9056.27580                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5  | 1.69E-024 | 1.69E-024 | 0%   |
| 9056.34690                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 2 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 1 | 2  | 9.18E-024 | 8.30E-024 | 11%  |
| 9057.16930                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 4 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 5 | 2  | 3.67E-025 | 3.62E-025 | 1%   |
| 9057.62550                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4  | 2.24E-025 | 3.00E-025 | -25% |
| 9058.01360                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 5 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 5 | 6  | 1.33E-024 | 1.23E-024 | 8%   |
| 9058.12560                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 3 | 6  | 1.07E-025 | 8.20E-026 | 30%  |
| 9059.84510                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 5 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 2  | 1.46E-025 | 7.99E-026 | 83%  |
| 9060.39860                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 5 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 5  | 1.31E-024 | 1.19E-024 | 10%  |
| 9061.71680                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 3  | 7.02E-024 | 6.08E-024 | 15%  |
| 9062.24520                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 5 | 4  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 6 | 3  | 3.37E-025 | 3.54E-025 | -5%  |
| 9062.38850                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 3 | 5  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 2 | 6  | 3.70E-025 | 3.49E-025 | 6%   |
| 9063.69100                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 2  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3  | 3.86E-024 | 3.40E-024 | 14%  |
| 9064.13450                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 3 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 7  | 4 | 3  | 2.51E-025 | 3.10E-025 | -19% |
| 9065.64940                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4  | 1.79E-023 | 1.49E-023 | 20%  |
| 9065.83320                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 6 | 6  | 0               | 0                     | 0 | 10 | 6 | 5  | 4.74E-025 | 4.07E-025 | 16%  |
| 9066.93450                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2  | 3.28E-025 | 3.09E-025 | 6%   |
| 9068.87120                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 1  | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 2  | 2.88E-024 | 2.52E-024 | 14%  |
| 9068.97950                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 1 | 3  | 0               | 0                     | 0 | 2  | 0 | 2  | 3.98E-024 | 3.76E-024 | 6%   |
| 9069.25020                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 3 | 7  | 0               | 0                     | 0 | 8  | 4 | 4  | 1.04E-025 | 7.76E-026 | 34%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |    |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|----|---|---|-----------|-----------|------|
| 9069.62830                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 7.52E-024 | 6.13E-024 | 23%  |
| 9070.11040                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 4 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 3 | 6 | 2.63E-025 | 2.23E-025 | 18%  |
| 9071.19830                           | 0           | 3 | 1 | 6           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 4 | 1.79E-024 | 1.65E-024 | 8%   |
| 9072.02680                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 1 | 6 | 2.65E-024 | 2.37E-024 | 12%  |
| 9072.64600                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 2 | 7 | 3.64E-025 | 3.32E-025 | 10%  |
| 9073.37430                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 9.83E-024 | 8.63E-024 | 14%  |
| 9073.87450                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 0 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 1 | 3 | 2.52E-024 | 2.19E-024 | 15%  |
| 9073.97260                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 7 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 7 | 2 | 2.11E-025 | 1.72E-025 | 23%  |
| 9073.97260                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 7 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 7 | 3 | 7.04E-026 | 5.75E-026 | 22%  |
| 9074.39430                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 3 | 9 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 3 | 8 | 9.77E-025 | 8.86E-025 | 10%  |
| 9074.64340                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 3.63E-024 | 3.11E-024 | 17%  |
| 9075.28410                           | 0           | 6 | 0 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 1.09E-024 | 9.39E-025 | 16%  |
| 9075.28410                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1 | 7.56E-024 | 6.46E-024 | 17%  |
| 9076.88710                           | 1           | 3 | 0 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 2.64E-024 | 2.58E-024 | 2%   |
| 9079.89090                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 5 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 5 | 6 | 3.09E-025 | 3.41E-025 | -9%  |
| 9080.90420                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 2.32E-024 | 2.16E-024 | 7%   |
| 9082.09820                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 0 | 3 | 9.01E-024 | 7.86E-024 | 15%  |
| 9082.49000                           | 1           | 1 | 1 | 12          | 4 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 11 | 4 | 7 | 6.29E-025 | 5.53E-025 | 14%  |
| 9082.75610                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 7.81E-024 | 6.51E-024 | 20%  |
| 9085.01260                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 2.32E-024 | 2.08E-024 | 12%  |
| 9086.08420                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 4 | 3 | 3.92E-025 | 3.69E-025 | 6%   |
| 9086.15710                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 4.40E-024 | 4.03E-024 | 9%   |
| 9086.49200                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 2 | 4 | 2.01E-024 | 1.91E-024 | 5%   |
| 9086.66010                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 3 | 4 | 1.45E-024 | 1.23E-024 | 18%  |
| 9088.73280                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 0 | 6 | 1.22E-024 | 1.18E-024 | 3%   |
| 9088.90610                           | 2           | 1 | 0 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 1.35E-024 | 1.19E-024 | 13%  |
| 9090.23260                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8  | 1 | 7 | 3.78E-025 | 3.83E-025 | -1%  |
| 9091.35290                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 0 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 1 | 4 | 8.18E-024 | 6.74E-024 | 21%  |
| 9091.63990                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 8 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 8 | 1 | 6.12E-026 | 8.49E-026 | -28% |
| 9091.63990                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 8 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 9  | 8 | 2 | 2.10E-026 | 2.84E-026 | -26% |
| 9092.33530                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 2 | 5 | 4.00E-024 | 3.52E-024 | 14%  |
| 9093.36680                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 4 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 1 | 3.76E-024 | 3.00E-024 | 25%  |
| 9093.47200                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 0 | 1.54E-023 | 1.26E-023 | 22%  |
| 9094.48870                           | 1           | 1 | 1 | 11          | 7 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 10 | 7 | 4 | 7.02E-026 | 1.02E-025 | -31% |
| 9094.61430                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 1 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 2 | 3 | 9.34E-025 | 8.72E-025 | 7%   |
| 9095.03380                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 0 | 4 | 1.90E-024 | 1.69E-024 | 12%  |
| 9095.55200                           | 0           | 3 | 1 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 1.29E-024 | 1.28E-024 | 1%   |
| 9096.00030                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 3 | 8.12E-025 | 7.31E-025 | 11%  |
| 9098.11760                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 6 | 4.39E-024 | 3.78E-024 | 16%  |
| 9099.02160                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 0 | 5 | 1.22E-025 | 7.76E-026 | 57%  |
| 9099.20230                           | 1           | 1 | 1 | 4           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 3  | 2 | 2 | 1.21E-024 | 1.15E-024 | 5%   |
| 9100.11770                           | 0           | 1 | 2 | 2           | 2 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 1  | 1 | 1 | 4.94E-024 | 4.16E-024 | 19%  |
| 9100.20340                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 2 | 6 | 5.88E-025 | 6.37E-025 | -8%  |
| 9101.40360                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 1 | 5 | 2.20E-024 | 1.97E-024 | 12%  |
| 9102.99720                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 2 | 3.33E-024 | 3.05E-024 | 9%   |
| 9105.88930                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 0 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 1 | 5 | 5.77E-025 | 5.72E-025 | 1%   |
| 9106.03000                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7  | 0 | 7 | 2.32E-024 | 2.16E-024 | 7%   |
| 9107.14320                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 4 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 4  | 3 | 1 | 1.01E-024 | 9.08E-025 | 11%  |
| 9107.33080                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6  | 3 | 4 | 2.66E-024 | 2.39E-024 | 11%  |
| 9107.56920                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5  | 3 | 3 | 1.12E-024 | 1.04E-024 | 8%   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |   |   |   |           |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|---|---|---|-----------|-----------|------|
| 9108.15600                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 0 | 5 | 3.36E-024 | 3.02E-024 | 11%  |
| 9108.29380                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 3 | 5 | 4.83E-025 | 6.33E-025 | -24% |
| 9108.33350                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 2 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 1 | 8 | 4.75E-025 | 4.67E-025 | 2%   |
| 9108.43680                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 3 | 2 | 3.09E-024 | 2.81E-024 | 10%  |
| 9108.76510                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 2 | 2 | 1.86E-024 | 1.71E-024 | 9%   |
| 9109.77420                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 3 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 2 | 7 | 1.02E-024 | 9.17E-025 | 11%  |
| 9110.79330                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 1 | 1 | 3.72E-024 | 3.12E-024 | 19%  |
| 9110.88970                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 4 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 3 | 6 | 6.96E-025 | 7.04E-025 | -1%  |
| 9113.62550                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 4 | 5 | 1.90E-025 | 1.83E-025 | 4%   |
| 9113.84840                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 7 | 6.05E-025 | 5.46E-025 | 11%  |
| 9119.21840                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 1 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 2 | 4 | 1.65E-025 | 1.95E-025 | -15% |
| 9119.64610                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 0 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 1 | 6 | 7.60E-025 | 7.30E-025 | 4%   |
| 9119.80270                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 1 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 0 | 6 | 2.40E-025 | 3.08E-025 | -22% |
| 9120.63640                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 3 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 2 | 8 | 1.16E-025 | 1.01E-025 | 15%  |
| 9121.69900                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 2 | 3 | 6.17E-024 | 5.19E-024 | 19%  |
| 9123.41990                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 4 | 4 | 1.16E-025 | 7.37E-026 | 57%  |
| 9124.00820                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 4 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 2 | 3 | 5.16E-024 | 4.62E-024 | 12%  |
| 9124.13940                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 2 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 1 | 8 | 1.05E-024 | 9.92E-025 | 6%   |
| 9124.84680                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 1 | 2 | 7.94E-024 | 6.56E-024 | 21%  |
| 9126.10750                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 5 | 2.00E-024 | 1.79E-024 | 12%  |
| 9126.24910                           | 1           | 3 | 0 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 0 | 6 | 4.17E-025 | 4.87E-025 | -14% |
| 9126.41870                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 6 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 4 | 3 | 1.08E-025 | 2.05E-025 | -47% |
| 9129.21840                           | 0           | 3 | 1 | 8           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 6 | 6.23E-025 | 5.90E-025 | 6%   |
| 9129.88380                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 4 | 3 | 7.17E-025 | 6.72E-025 | 7%   |
| 9131.71340                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 0 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 7 | 1.62E-025 | 1.61E-025 | 1%   |
| 9131.71340                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 8 | 4 | 5 | 2.74E-025 | 2.71E-025 | 1%   |
| 9132.29590                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 0 | 7 | 2.22E-025 | 2.93E-025 | -24% |
| 9132.97420                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 2 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 1 | 2 | 7.83E-024 | 7.06E-024 | 11%  |
| 9133.17110                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 4 | 4 | 2.36E-025 | 2.16E-025 | 9%   |
| 9133.41700                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 2 | 3.41E-025 | 3.86E-025 | -12% |
| 9134.43300                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 3 | 1.07E-024 | 1.03E-024 | 4%   |
| 9134.53590                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 4 | 1.82E-024 | 1.73E-024 | 5%   |
| 9134.85860                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 5 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 4 | 1 | 1.05E-024 | 9.46E-025 | 11%  |
| 9135.07870                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 4 | 2 | 3.58E-025 | 3.49E-025 | 3%   |
| 9136.14120                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 1 | 3 | 1.58E-024 | 1.43E-024 | 10%  |
| 9136.27300                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 2 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 1 | 9 | 1.56E-025 | 2.60E-025 | -40% |
| 9136.59500                           | 0           | 1 | 2 | 9           | 1 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 0 | 9 | 5.37E-025 | 4.63E-025 | 16%  |
| 9138.20220                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 0 | 6 | 1.02E-024 | 9.08E-025 | 12%  |
| 9139.36030                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 1 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 2.75E-025 | 2.66E-025 | 3%   |
| 9142.31550                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 6 | 3.43E-024 | 3.16E-024 | 9%   |
| 9145.91260                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 1 | 4 | 2.60E-024 | 2.35E-024 | 11%  |
| 9150.48060                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 2 | 5 | 3.55E-024 | 4.44E-024 | -20% |
| 9150.67650                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 3 | 0 | 3 | 1.51E-025 | 2.44E-025 | -38% |
| 9151.04200                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 2 | 0 | 5.11E-024 | 4.97E-024 | 3%   |
| 9151.10340                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 2 | 4 | 1.36E-024 | 1.46E-024 | -7%  |
| 9152.53660                           | 0           | 1 | 2 | 3           | 3 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 2 | 2 | 1 | 1.63E-023 | 1.41E-023 | 16%  |
| 9153.88980                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 5 | 2 | 1.77E-025 | 1.17E-025 | 51%  |
| 9157.42330                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 6 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 1 | 5 | 3.16E-025 | 3.91E-025 | -19% |
| 9158.92200                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 5 | 2 | 2.88E-025 | 2.32E-025 | 24%  |
| 9164.08910                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 2 | 7 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 1 | 6 | 5.42E-025 | 5.18E-025 | 5%   |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A         |           |      |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|-----------|-----------|------|
| 9167.68420                           | 2           | 1 | 0 | 8           | 3 | 6 | 0 0 0           | 7 0 7                 | 1.58E-025 | 2.09E-025 | -24% |
| 9168.69510                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 3 | 5 | 0 0 0           | 6 1 6                 | 3.15E-024 | 2.91E-024 | 8%   |
| 9170.96120                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 2 | 0 0 0           | 3 2 1                 | 1.01E-023 | 8.73E-024 | 16%  |
| 9172.76650                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 5 | 0 0 0           | 8 2 6                 | 5.62E-025 | 5.48E-025 | 3%   |
| 9172.90510                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 2 | 2 | 0 0 0           | 3 1 3                 | 1.28E-024 | 1.19E-024 | 8%   |
| 9178.34880                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 1 | 0 0 0           | 3 2 2                 | 3.34E-024 | 2.85E-024 | 17%  |
| 9180.15210                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 5 | 0 | 0 0 0           | 4 3 1                 | 3.57E-025 | 3.26E-025 | 10%  |
| 9181.17890                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 4 | 4 | 0 0 0           | 6 2 5                 | 3.47E-024 | 2.90E-024 | 20%  |
| 9181.47910                           | 1           | 1 | 1 | 5           | 5 | 1 | 0 0 0           | 4 3 2                 | 1.08E-024 | 9.40E-025 | 15%  |
| 9182.88020                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 2 | 0 0 0           | 5 0 5                 | 2.25E-025 | 2.53E-025 | -11% |
| 9186.92180                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 3 | 0 0 0           | 4 2 2                 | 1.85E-024 | 1.72E-024 | 8%   |
| 9191.79850                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 6 | 0 0 0           | 8 1 7                 | 4.17E-025 | 2.36E-025 | 77%  |
| 9192.96390                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 2 | 6 | 0 0 0           | 7 0 7                 | 1.46E-024 | 1.41E-024 | 4%   |
| 9197.79470                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 1 | 0 0 0           | 5 3 2                 | 1.51E-024 | 1.37E-024 | 10%  |
| 9198.73630                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 3 | 4 | 0 0 0           | 5 2 3                 | 2.74E-024 | 2.54E-024 | 8%   |
| 9202.63350                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 5 | 2 | 0 0 0           | 5 3 3                 | 5.23E-025 | 4.72E-025 | 11%  |
| 9202.75570                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 4 | 6 | 0 0 0           | 9 2 7                 | 5.60E-025 | 4.82E-025 | 16%  |
| 9205.53520                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 4 | 1 | 0 0 0           | 3 3 0                 | 1.15E-023 | 9.63E-024 | 19%  |
| 9205.76640                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 4 | 0 | 0 0 0           | 3 3 1                 | 3.83E-024 | 3.47E-024 | 10%  |
| 9207.03620                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 3 | 5 | 0 0 0           | 6 2 4                 | 3.93E-025 | 4.01E-025 | -2%  |
| 9207.86540                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 2 | 0 0 0           | 4 2 3                 | 5.31E-024 | 4.82E-024 | 10%  |
| 9211.73460                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 2 | 0 0 0           | 6 3 3                 | 4.53E-025 | 4.00E-025 | 13%  |
| 9212.96640                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 3 | 6 | 0 0 0           | 7 2 5                 | 4.92E-025 | 4.76E-025 | 3%   |
| 9213.92090                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 3 | 6 | 0 0 0           | 7 1 7                 | 5.18E-025 | 4.90E-025 | 6%   |
| 9214.57560                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 4 | 5 | 0 0 0           | 7 2 6                 | 5.99E-025 | 6.09E-025 | -2%  |
| 9219.85200                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 2 | 3 | 0 0 0           | 4 1 4                 | 1.76E-024 | 1.58E-024 | 11%  |
| 9221.88550                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 3 | 0 0 0           | 7 3 4                 | 9.63E-025 | 8.53E-025 | 13%  |
| 9224.24650                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 5 | 3 | 0 0 0           | 6 3 4                 | 1.36E-024 | 1.25E-024 | 9%   |
| 9224.80320                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 3 | 0 0 0           | 7 1 6                 | 9.20E-026 | 5.58E-026 | 65%  |
| 9227.69520                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 4 | 2 | 0 0 0           | 4 3 1                 | 2.26E-024 | 2.01E-024 | 12%  |
| 9229.29230                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 4 | 1 | 0 0 0           | 4 3 2                 | 6.85E-024 | 5.94E-024 | 15%  |
| 9229.69630                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 4 | 0 0 0           | 8 3 5                 | 1.93E-025 | 1.64E-025 | 18%  |
| 9237.79750                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 5 | 5 | 0 0 0           | 9 3 6                 | 2.86E-025 | 2.54E-025 | 13%  |
| 9241.60790                           | 1           | 1 | 1 | 10          | 3 | 7 | 0 0 0           | 9 1 8                 | 1.36E-025 | 1.52E-025 | -11% |
| 9241.60790                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 3 | 3 | 0 0 0           | 5 2 4                 | 1.43E-025 | 1.59E-025 | -10% |
| 9242.85970                           | 1           | 1 | 1 | 6           | 4 | 2 | 0 0 0           | 5 0 5                 | 2.47E-025 | 1.81E-025 | 36%  |
| 9246.35440                           | 0           | 1 | 2 | 4           | 3 | 2 | 0 0 0           | 3 0 3                 | 4.07E-025 | 3.76E-025 | 8%   |
| 9247.18440                           | 1           | 1 | 1 | 8           | 5 | 4 | 0 0 0           | 7 3 5                 | 3.13E-025 | 3.05E-025 | 3%   |
| 9247.49690                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 3 | 0 0 0           | 5 3 2                 | 3.54E-024 | 3.12E-024 | 13%  |
| 9248.91190                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 2 | 7 | 0 0 0           | 8 0 8                 | 2.06E-025 | 1.24E-025 | 66%  |
| 9251.23910                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 4 | 6 | 0 0 0           | 8 2 7                 | 8.81E-025 | 7.88E-025 | 12%  |
| 9253.58250                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 4 | 2 | 0 0 0           | 5 3 3                 | 1.20E-024 | 1.11E-024 | 8%   |
| 9257.09170                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 5 | 0 | 0 0 0           | 4 4 1                 | 4.13E-024 | 3.94E-024 | 5%   |
| 9257.09170                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 5 | 1 | 0 0 0           | 4 4 0                 | 1.38E-024 | 1.32E-024 | 5%   |
| 9259.13440                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 4 | 7 | 0 0 0           | 9 1 8                 | 1.23E-025 | 1.36E-025 | -10% |
| 9260.91810                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 3 | 7 | 0 0 0           | 8 1 8                 | 6.82E-025 | 6.08E-025 | 12%  |
| 9263.43510                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 4 | 0 0 0           | 6 3 3                 | 5.42E-025 | 5.19E-025 | 4%   |
| 9272.25820                           | 1           | 1 | 1 | 9           | 5 | 5 | 0 0 0           | 8 3 6                 | 5.33E-025 | 4.96E-025 | 7%   |
| 9272.55790                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 2 | 4 | 0 0 0           | 5 1 5                 | 2.67E-025 | 3.15E-025 | -15% |
| 9274.64820                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 4 | 5 | 0 0 0           | 7 3 4                 | 6.49E-025 | 5.88E-025 | 10%  |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Upper state |   |   | Lower state |   |   | S(Obs)<br>[116] | S(HITRAN2008)<br>[15] | A |   |   |   |           |           |     |
|--------------------------------------|-------------|---|---|-------------|---|---|-----------------|-----------------------|---|---|---|---|-----------|-----------|-----|
| 9280.03880                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 4 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 3 | 4 | 1.67E-024 | 1.52E-024 | 10% |
| 9280.40740                           | 1           | 1 | 1 | 7           | 6 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 3 | 1.22E-025 | 7.95E-026 | 53% |
| 9280.64870                           | 0           | 1 | 2 | 5           | 3 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 4 | 0 | 4 | 1.75E-025 | 1.11E-025 | 58% |
| 9280.81670                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 4 | 1 | 3.26E-024 | 2.88E-024 | 13% |
| 9281.08250                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 5 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 4 | 2 | 1.09E-024 | 1.01E-024 | 8%  |
| 9283.56610                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 4.80E-025 | 4.26E-025 | 13% |
| 9289.89570                           | 2           | 1 | 0 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 2 | 5 | 4.93E-025 | 4.59E-025 | 7%  |
| 9297.65540                           | 2           | 1 | 0 | 10          | 3 | 8 | 0               | 0                     | 0 | 9 | 0 | 9 | 1.18E-025 | 1.10E-025 | 7%  |
| 9303.13470                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 2 | 5.69E-025 | 5.08E-025 | 12% |
| 9304.39620                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 5 | 2 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 4 | 3 | 1.70E-024 | 1.56E-024 | 9%  |
| 9305.44290                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 6 | 0 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 5 | 1 | 6.68E-025 | 5.92E-025 | 13% |
| 9305.44290                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 6 | 1 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 5 | 0 | 2.00E-024 | 1.78E-024 | 12% |
| 9319.89800                           | 0           | 1 | 2 | 6           | 3 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 5 | 0 | 5 | 4.11E-025 | 3.94E-025 | 4%  |
| 9323.18330                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 4 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 4 | 3 | 8.16E-025 | 7.07E-025 | 15% |
| 9327.45670                           | 0           | 1 | 2 | 8           | 5 | 3 | 0               | 0                     | 0 | 7 | 4 | 4 | 3.28E-025 | 2.62E-025 | 25% |
| 9328.98810                           | 0           | 1 | 2 | 7           | 2 | 5 | 0               | 0                     | 0 | 6 | 1 | 6 | 3.57E-025 | 3.22E-025 | 11% |



### **3 $H_2^{16}O - 8000 - 9400 \text{ cm}^{-1} : \text{Coefficients d'auto-élargissement}$**

Matériel supplémentaire à l'article :

---

Intensity measurements of  $H_2^{16}O$  lines in the spectral region 8000 – 9350  $\text{cm}^{-1}$ .

C. Oudot, Le Wang, X. Thomas, P. Von der Heyden, L. Daumont, L. Régalia.

J. Mol. Spectrosc., 2010, 262 : 22-29

---

Comparaison des coefficients d'élargissement obtenus expérimentalement avec HITRAN2008 et R.N. Tolchenov et J. Tennyson, pour la région spectrale de 8000 à 9350

$\text{cm}^{-1}$ . Les résultats présentés regroupent les transitions listées et attribuées dans HITRAN2008 dans la gamme spectrale de  $5 \times 10^{-25}$  à  $5 \times 10^{-24}$   $\text{cm}/\text{molec}$  pour  $H_2^{16}O$ .

- Position : position reprises d'HITRAN2008 données en  $\text{cm}^{-1}$
- Coefficients d'auto-élargissements donnés à 296 K ( $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ ).
- $A = \frac{\gamma(\text{Obs}) - \gamma(\text{HITRAN2008})}{\gamma(\text{HITRAN2008})}$  (%)
- $B = \frac{\gamma(\text{Obs}) - \gamma(\text{Tolchenov})}{\gamma(\text{Tolchenov})}$  (%)

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8085.8669                                  | 0.301                      | 0.247                | 0.258                     | 22%      | 5%       |
| 8107.6913                                  | 0.328                      | 0.322                | 0.317                     | 2%       | 1%       |
| 8109.8198                                  | 0.328                      | 0.283                | 0.306                     | 16%      | 8%       |
| 8111.4537                                  | 0.429                      | 0.361                | 0.370                     | 19%      | 3%       |
| 8112.6824                                  | 0.423                      | 0.357                | 0.376                     | 19%      | 5%       |
| 8118.1438                                  | 0.328                      | 0.382                | 0.363                     | 14%      | 5%       |
| 8129.5008                                  | 0.384                      | 0.287                | 0.320                     | 34%      | 11%      |
| 8133.1624                                  | 0.384                      | 0.331                | 0.335                     | 16%      | 1%       |
| 8137.1955                                  | 0.423                      | 0.395                | 0.407                     | 7%       | 3%       |
| 8143.4786                                  | 0.439                      | 0.363                | 0.366                     | 21%      | 1%       |
| 8146.1894                                  | 0.429                      | 0.303                | 0.297                     | 41%      | 2%       |
| 8147.6885                                  | 0.429                      | 0.393                | 0.376                     | 9%       | 4%       |
| 8149.0759                                  | 0.429                      | 0.396                | 0.393                     | 8%       | 1%       |
| 8149.6062                                  | 0.439                      | 0.430                | 0.415                     | 2%       | 4%       |
| 8151.9023                                  | 0.466                      | 0.420                | 0.423                     | 11%      | 1%       |
| 8156.0952                                  | 0.423                      | 0.325                | 0.334                     | 30%      | 3%       |
| 8160.4064                                  | 0.439                      | 0.395                | 0.411                     | 11%      | 4%       |
| 8162.9289                                  | 0.282                      | 0.222                | 0.221                     | 27%      | 0%       |
| 8166.4940                                  | 0.423                      | 0.376                | 0.378                     | 13%      | 1%       |
| 8166.7727                                  | 0.384                      | 0.339                | 0.336                     | 13%      | 1%       |
| 8168.0400                                  | 0.429                      | 0.393                | 0.402                     | 9%       | 2%       |
| 8171.5331                                  | 0.466                      | 0.371                | 0.377                     | 26%      | 2%       |
| 8172.5114                                  | 0.439                      | 0.287                | 0.266                     | 53%      | 7%       |
| 8172.5470                                  | 0.466                      | 0.315                | 0.329                     | 48%      | 4%       |
| 8172.6293                                  | 0.439                      | 0.275                | 0.274                     | 60%      | 0%       |
| 8175.9416                                  | 0.466                      | 0.399                | 0.400                     | 17%      | 0%       |
| 8186.5397                                  | 0.301                      | 0.247                | 0.281                     | 22%      | 14%      |
| 8187.0075                                  | 0.301                      | 0.283                | 0.296                     | 6%       | 4%       |
| 8187.1298                                  | 0.464                      | 0.410                | 0.412                     | 13%      | 0%       |
| 8187.3713                                  | 0.429                      | 0.333                | 0.293                     | 29%      | 12%      |
| 8192.1746                                  | 0.423                      | 0.451                | 0.423                     | 6%       | 6%       |
| 8194.4656                                  | 0.464                      | 0.430                | 0.442                     | 8%       | 3%       |
| 8197.4381                                  | 0.429                      | 0.420                | 0.434                     | 2%       | 3%       |
| 8200.9037                                  | 0.466                      | 0.387                | 0.409                     | 21%      | 6%       |
| 8202.5400                                  | 0.439                      | 0.379                | 0.396                     | 16%      | 4%       |
| 8202.5548                                  | 0.439                      | 0.379                | 0.396                     | 16%      | 4%       |
| 8202.7438                                  | 0.301                      | 0.331                | 0.342                     | 9%       | 3%       |
| 8204.0087                                  | 0.439                      | 0.409                | 0.424                     | 7%       | 4%       |
| 8209.1102                                  | 0.301                      | 0.246                | 0.251                     | 23%      | 2%       |
| 8209.3622                                  | 0.328                      | 0.311                | 0.315                     | 6%       | 1%       |
| 8218.3059                                  | 0.466                      | 0.386                | 0.400                     | 21%      | 4%       |
| 8219.1689                                  | 0.439                      | 0.418                | 0.428                     | 5%       | 2%       |
| 8220.8081                                  | 0.429                      | 0.384                | 0.398                     | 12%      | 4%       |
| 8221.3363                                  | 0.384                      | 0.401                | 0.406                     | 4%       | 1%       |
| 8222.0079                                  | 0.423                      | 0.359                | 0.457                     | 18%      | 27%      |
| 8222.0399                                  | 0.328                      | 0.320                | 0.268                     | 3%       | 16%      |
| 8229.1574                                  | 0.464                      | 0.434                | 0.432                     | 7%       | 0%       |
| 8231.4920                                  | 0.466                      | 0.425                | 0.434                     | 10%      | 2%       |
| 8231.6639                                  | 0.384                      | 0.388                | 0.384                     | 1%       | 1%       |
| 8233.1848                                  | 0.384                      | 0.333                | 0.343                     | 15%      | 3%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8236.8388                                  | 0.444                      | 0.434                | 0.442                     | 2%       | 2%       |
| 8237.7487                                  | 0.439                      | 0.273                | 0.347                     | 61%      | 27%      |
| 8237.9941                                  | 0.328                      | 0.267                | 0.266                     | 23%      | 0%       |
| 8238.6605                                  | 0.384                      | 0.380                | 0.391                     | 1%       | 3%       |
| 8243.5963                                  | 0.429                      | 0.385                | 0.398                     | 12%      | 3%       |
| 8246.0790                                  | 0.464                      | 0.403                | 0.417                     | 15%      | 3%       |
| 8246.7046                                  | 0.466                      | 0.362                | 0.364                     | 29%      | 1%       |
| 8248.0059                                  | 0.464                      | 0.452                | 0.384                     | 3%       | 15%      |
| 8248.1063                                  | 0.439                      | 0.466                | 0.518                     | 6%       | 11%      |
| 8248.6123                                  | 0.466                      | 0.381                | 0.406                     | 22%      | 7%       |
| 8252.8489                                  | 0.429                      | 0.339                | 0.347                     | 27%      | 3%       |
| 8253.2028                                  | 0.464                      | 0.398                | 0.396                     | 17%      | 1%       |
| 8255.8271                                  | 0.423                      | 0.406                | 0.418                     | 4%       | 3%       |
| 8257.1833                                  | 0.384                      | 0.308                | 0.317                     | 25%      | 3%       |
| 8264.3332                                  | 0.423                      | 0.403                | 0.430                     | 5%       | 7%       |
| 8269.9326                                  | 0.328                      | 0.312                | 0.321                     | 5%       | 3%       |
| 8274.5245                                  | 0.384                      | 0.406                | 0.416                     | 5%       | 3%       |
| 8283.5861                                  | 0.466                      | 0.432                | 0.445                     | 8%       | 3%       |
| 8291.8500                                  | 0.384                      | 0.316                | 0.313                     | 22%      | 1%       |
| 8295.2244                                  | 0.439                      | 0.398                | 0.406                     | 10%      | 2%       |
| 8303.0249                                  | 0.429                      | 0.404                | 0.416                     | 6%       | 3%       |
| 8306.0440                                  | 0.468                      | 0.470                | 0.485                     | 0%       | 3%       |
| 8307.2851                                  | 0.439                      | 0.424                | 0.447                     | 4%       | 5%       |
| 8310.0210                                  | 0.429                      | 0.353                | 0.370                     | 21%      | 5%       |
| 8312.1521                                  | 0.464                      | 0.402                | 0.406                     | 16%      | 1%       |
| 8320.6816                                  | 0.328                      | 0.280                | 0.269                     | 17%      | 4%       |
| 8323.2930                                  | 0.444                      | 0.437                | 0.436                     | 2%       | 0%       |
| 8325.6755                                  | 0.423                      | 0.362                | 0.343                     | 17%      | 5%       |
| 8327.9936                                  | 0.439                      | 0.454                | 0.456                     | 3%       | 0%       |
| 8330.1072                                  | 0.464                      | 0.427                | 0.438                     | 9%       | 3%       |
| 8339.2740                                  | 0.429                      | 0.337                | 0.344                     | 27%      | 2%       |
| 8342.9108                                  | 0.384                      | 0.338                | 0.356                     | 14%      | 5%       |
| 8345.8833                                  | 0.384                      | 0.340                | 0.326                     | 13%      | 4%       |
| 8349.7438                                  | 0.466                      | 0.450                | 0.458                     | 4%       | 2%       |
| 8352.3871                                  | 0.466                      | 0.363                | 0.368                     | 28%      | 1%       |
| 8354.5167                                  | 0.464                      | 0.378                | 0.385                     | 23%      | 2%       |
| 8357.5985                                  | 0.439                      | 0.395                | 0.405                     | 11%      | 3%       |
| 8357.5985                                  | 0.466                      | 0.395                | 0.405                     | 18%      | 3%       |
| 8360.3750                                  | 0.439                      | 0.343                | 0.370                     | 28%      | 8%       |
| 8362.2035                                  | 0.429                      | 0.390                | 0.402                     | 10%      | 3%       |
| 8362.5899                                  | 0.464                      | 0.382                | 0.391                     | 22%      | 2%       |
| 8362.8057                                  | 0.439                      | 0.324                | 0.334                     | 35%      | 3%       |
| 8364.7593                                  | 0.429                      | 0.395                | 0.406                     | 9%       | 3%       |
| 8370.3123                                  | 0.423                      | 0.308                | 0.321                     | 37%      | 4%       |
| 8371.2333                                  | 0.423                      | 0.279                | 0.290                     | 52%      | 4%       |
| 8372.0569                                  | 0.439                      | 0.404                | 0.414                     | 9%       | 2%       |
| 8374.1877                                  | 0.423                      | 0.426                | 0.422                     | 1%       | 1%       |
| 8377.4554                                  | 0.464                      | 0.456                | 0.465                     | 2%       | 2%       |
| 8380.7385                                  | 0.439                      | 0.389                | 0.400                     | 13%      | 3%       |
| 8383.6629                                  | 0.429                      | 0.376                | 0.384                     | 14%      | 2%       |
| 8385.0429                                  | 0.466                      | 0.407                | 0.419                     | 14%      | 3%       |
| 8385.3544                                  | 0.328                      | 0.250                | 0.267                     | 31%      | 7%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8389.3545                                  | 0.429                      | 0.330                | 0.332                     | 30%      | 1%       |
| 8389.7449                                  | 0.439                      | 0.400                | 0.422                     | 10%      | 5%       |
| 8393.7164                                  | 0.384                      | 0.402                | 0.404                     | 4%       | 0%       |
| 8394.0579                                  | 0.429                      | 0.392                | 0.393                     | 9%       | 0%       |
| 8395.4275                                  | 0.439                      | 0.406                | 0.420                     | 8%       | 3%       |
| 8396.2620                                  | 0.429                      | 0.287                | 0.297                     | 49%      | 3%       |
| 8396.4773                                  | 0.429                      | 0.279                | 0.285                     | 54%      | 2%       |
| 8398.8310                                  | 0.439                      | 0.390                | 0.409                     | 13%      | 5%       |
| 8403.1261                                  | 0.429                      | 0.406                | 0.416                     | 6%       | 2%       |
| 8404.6017                                  | 0.423                      | 0.321                | 0.333                     | 32%      | 4%       |
| 8408.4552                                  | 0.429                      | 0.366                | 0.377                     | 17%      | 3%       |
| 8410.8202                                  | 0.384                      | 0.265                | 0.271                     | 45%      | 2%       |
| 8417.8658                                  | 0.466                      | 0.396                | 0.422                     | 18%      | 7%       |
| 8419.7965                                  | 0.384                      | 0.349                | 0.257                     | 10%      | 26%      |
| 8420.6298                                  | 0.468                      | 0.427                | 0.437                     | 10%      | 2%       |
| 8423.7347                                  | 0.423                      | 0.331                | 0.333                     | 28%      | 1%       |
| 8432.0765                                  | 0.429                      | 0.371                | 0.377                     | 16%      | 2%       |
| 8432.1451                                  | 0.464                      | 0.393                | 0.379                     | 18%      | 3%       |
| 8433.6920                                  | 0.384                      | 0.378                | 0.394                     | 2%       | 4%       |
| 8435.4683                                  | 0.423                      | 0.273                | 0.261                     | 55%      | 5%       |
| 8439.2671                                  | 0.439                      | 0.419                | 0.447                     | 5%       | 7%       |
| 8441.3615                                  | 0.439                      | 0.366                | 0.379                     | 20%      | 4%       |
| 8442.3920                                  | 0.429                      | 0.376                | 0.420                     | 14%      | 12%      |
| 8446.9002                                  | 0.466                      | 0.418                | 0.427                     | 12%      | 2%       |
| 8446.9970                                  | 0.423                      | 0.362                | 0.378                     | 17%      | 5%       |
| 8448.5810                                  | 0.466                      | 0.377                | 0.390                     | 24%      | 3%       |
| 8452.6268                                  | 0.464                      | 0.397                | 0.436                     | 17%      | 10%      |
| 8454.3447                                  | 0.466                      | 0.354                | 0.364                     | 31%      | 3%       |
| 8455.9214                                  | 0.384                      | 0.398                | 0.422                     | 4%       | 6%       |
| 8456.1687                                  | 0.439                      | 0.360                | 0.370                     | 22%      | 3%       |
| 8459.5839                                  | 0.439                      | 0.394                | 0.402                     | 12%      | 2%       |
| 8460.1385                                  | 0.429                      | 0.357                | 0.373                     | 20%      | 4%       |
| 8463.1294                                  | 0.429                      | 0.343                | 0.357                     | 25%      | 4%       |
| 8463.7638                                  | 0.384                      | 0.411                | 0.422                     | 7%       | 3%       |
| 8464.3825                                  | 0.429                      | 0.393                | 0.423                     | 9%       | 8%       |
| 8467.9027                                  | 0.423                      | 0.350                | 0.359                     | 21%      | 3%       |
| 8468.1586                                  | 0.423                      | 0.361                | 0.379                     | 17%      | 5%       |
| 8468.7538                                  | 0.384                      | 0.359                | 0.363                     | 7%       | 1%       |
| 8469.4039                                  | 0.384                      | 0.343                | 0.354                     | 12%      | 3%       |
| 8471.5293                                  | 0.429                      | 0.384                | 0.394                     | 12%      | 3%       |
| 8474.0541                                  | 0.423                      | 0.424                | 0.408                     | 0%       | 4%       |
| 8484.1910                                  | 0.466                      | 0.424                | 0.451                     | 10%      | 6%       |
| 8489.9475                                  | 0.214                      | 0.187                | 0.163                     | 14%      | 13%      |
| 8491.4314                                  | 0.423                      | 0.355                | 0.403                     | 19%      | 13%      |
| 8491.4627                                  | 0.423                      | 0.394                | 0.340                     | 7%       | 14%      |
| 8492.5581                                  | 0.439                      | 0.398                | 0.399                     | 10%      | 0%       |
| 8494.7836                                  | 0.214                      | 0.160                | 0.176                     | 34%      | 10%      |
| 8495.0694                                  | 0.214                      | 0.179                | 0.177                     | 20%      | 1%       |
| 8495.3170                                  | 0.429                      | 0.377                | 0.400                     | 14%      | 6%       |
| 8498.6169                                  | 0.384                      | 0.438                | 0.504                     | 12%      | 15%      |
| 8504.8256                                  | 0.429                      | 0.381                | 0.392                     | 13%      | 3%       |
| 8505.6678                                  | 0.260                      | 0.346                | 0.346                     | 25%      | 0%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8508.8724                                  | 0.237                      | 0.208                | 0.201                     | 14%      | 3%       |
| 8511.1781                                  | 0.429                      | 0.387                | 0.401                     | 11%      | 4%       |
| 8512.0191                                  | 0.423                      | 0.414                | 0.445                     | 2%       | 7%       |
| 8512.1529                                  | 0.384                      | 0.339                | 0.357                     | 13%      | 5%       |
| 8515.8462                                  | 0.423                      | 0.292                | 0.321                     | 45%      | 10%      |
| 8517.9782                                  | 0.429                      | 0.296                | 0.290                     | 45%      | 2%       |
| 8518.3547                                  | 0.423                      | 0.450                | 0.380                     | 6%       | 16%      |
| 8518.9747                                  | 0.423                      | 0.395                | 0.405                     | 7%       | 3%       |
| 8520.7200                                  | 0.429                      | 0.298                | 0.307                     | 44%      | 3%       |
| 8520.7380                                  | 0.384                      | 0.298                | 0.307                     | 29%      | 3%       |
| 8521.1833                                  | 0.429                      | 0.403                | 0.370                     | 7%       | 8%       |
| 8523.6006                                  | 0.237                      | 0.173                | 0.174                     | 37%      | 1%       |
| 8524.4881                                  | 0.464                      | 0.391                | 0.400                     | 19%      | 2%       |
| 8524.9904                                  | 0.260                      | 0.329                | 0.329                     | 21%      | 0%       |
| 8525.9128                                  | 0.439                      | 0.360                | 0.354                     | 22%      | 2%       |
| 8526.1610                                  | 0.384                      | 0.252                | 0.255                     | 53%      | 1%       |
| 8527.1566                                  | 0.260                      | 0.299                | 0.251                     | 13%      | 16%      |
| 8532.0402                                  | 0.439                      | 0.396                | 0.404                     | 11%      | 2%       |
| 8533.1463                                  | 0.328                      | 0.301                | 0.294                     | 9%       | 2%       |
| 8533.9548                                  | 0.260                      | 0.223                | 0.244                     | 17%      | 9%       |
| 8534.1246                                  | 0.260                      | 0.254                | 0.271                     | 2%       | 7%       |
| 8536.5400                                  | 0.282                      | 0.384                | 0.377                     | 26%      | 2%       |
| 8536.8225                                  | 0.439                      | 0.393                | 0.419                     | 12%      | 7%       |
| 8539.4360                                  | 0.423                      | 0.448                | 0.429                     | 6%       | 4%       |
| 8542.2612                                  | 0.429                      | 0.329                | 0.346                     | 30%      | 5%       |
| 8542.2800                                  | 0.429                      | 0.329                | 0.346                     | 30%      | 5%       |
| 8542.9468                                  | 0.260                      | 0.212                | 0.196                     | 23%      | 8%       |
| 8544.3744                                  | 0.466                      | 0.363                | 0.359                     | 28%      | 1%       |
| 8544.8329                                  | 0.301                      | 0.162                | 0.214                     | 86%      | 32%      |
| 8544.8746                                  | 0.301                      | 0.289                | 0.199                     | 4%       | 31%      |
| 8545.0348                                  | 0.423                      | 0.353                | 0.382                     | 20%      | 8%       |
| 8545.4903                                  | 0.260                      | 0.277                | 0.242                     | 6%       | 13%      |
| 8545.6121                                  | 0.439                      | 0.382                | 0.277                     | 15%      | 27%      |
| 8546.9288                                  | 0.439                      | 0.344                | 0.330                     | 28%      | 4%       |
| 8550.5136                                  | 0.301                      | 0.345                | 0.347                     | 13%      | 1%       |
| 8550.8389                                  | 0.466                      | 0.344                | 0.332                     | 35%      | 4%       |
| 8552.3411                                  | 0.429                      | 0.407                | 0.418                     | 5%       | 3%       |
| 8555.0075                                  | 0.282                      | 0.322                | 0.330                     | 12%      | 3%       |
| 8555.5063                                  | 0.282                      | 0.346                | 0.325                     | 19%      | 6%       |
| 8555.6689                                  | 0.423                      | 0.385                | 0.394                     | 10%      | 2%       |
| 8557.0662                                  | 0.260                      | 0.239                | 0.223                     | 9%       | 6%       |
| 8558.0228                                  | 0.466                      | 0.360                | 0.380                     | 29%      | 6%       |
| 8559.6552                                  | 0.282                      | 0.258                | 0.259                     | 9%       | 0%       |
| 8561.8313                                  | 0.282                      | 0.222                | 0.249                     | 27%      | 12%      |
| 8562.0252                                  | 0.423                      | 0.397                | 0.419                     | 7%       | 6%       |
| 8564.5968                                  | 0.429                      | 0.372                | 0.387                     | 15%      | 4%       |
| 8565.7586                                  | 0.260                      | 0.270                | 0.267                     | 4%       | 1%       |
| 8569.6334                                  | 0.439                      | 0.329                | 0.394                     | 33%      | 20%      |
| 8569.8159                                  | 0.439                      | 0.299                | 0.358                     | 47%      | 20%      |
| 8571.8342                                  | 0.384                      | 0.312                | 0.323                     | 23%      | 3%       |
| 8573.3892                                  | 0.429                      | 0.410                | 0.371                     | 5%       | 10%      |
| 8574.5595                                  | 0.429                      | 0.410                | 0.371                     | 5%       | 9%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8576.5073                                  | 0.423                      | 0.382                | 0.343                     | 11%      | 10%      |
| 8578.2660                                  | 0.328                      | 0.346                | 0.229                     | 5%       | 34%      |
| 8578.8108                                  | 0.384                      | 0.332                | 0.292                     | 16%      | 12%      |
| 8580.6857                                  | 0.384                      | 0.257                | 0.247                     | 49%      | 4%       |
| 8581.5787                                  | 0.423                      | 0.237                | 0.144                     | 79%      | 39%      |
| 8583.2984                                  | 0.301                      | 0.266                | 0.247                     | 13%      | 7%       |
| 8584.7199                                  | 0.439                      | 0.336                | 0.410                     | 31%      | 22%      |
| 8584.8602                                  | 0.328                      | 0.338                | 0.344                     | 3%       | 2%       |
| 8585.9171                                  | 0.439                      | 0.352                | 0.377                     | 25%      | 7%       |
| 8588.2999                                  | 0.328                      | 0.323                | 0.339                     | 2%       | 5%       |
| 8588.8987                                  | 0.301                      | 0.249                | 0.253                     | 21%      | 1%       |
| 8590.0379                                  | 0.328                      | 0.330                | 0.344                     | 1%       | 4%       |
| 8590.1717                                  | 0.384                      | 0.277                | 0.280                     | 38%      | 1%       |
| 8594.0327                                  | 0.439                      | 0.419                | 0.414                     | 5%       | 1%       |
| 8595.6440                                  | 0.301                      | 0.154                | 0.237                     | 96%      | 54%      |
| 8595.8324                                  | 0.439                      | 0.417                | 0.428                     | 5%       | 3%       |
| 8596.8958                                  | 0.423                      | 0.432                | 0.442                     | 2%       | 2%       |
| 8599.9865                                  | 0.466                      | 0.460                | 0.469                     | 1%       | 2%       |
| 8601.2481                                  | 0.423                      | 0.386                | 0.422                     | 10%      | 9%       |
| 8604.5773                                  | 0.429                      | 0.344                | 0.354                     | 25%      | 3%       |
| 8604.9583                                  | 0.328                      | 0.282                | 0.291                     | 16%      | 3%       |
| 8607.7008                                  | 0.429                      | 0.390                | 0.359                     | 10%      | 8%       |
| 8609.0865                                  | 0.328                      | 0.268                | 0.272                     | 23%      | 2%       |
| 8611.8285                                  | 0.301                      | 0.244                | 0.254                     | 23%      | 4%       |
| 8613.5255                                  | 0.301                      | 0.245                | 0.278                     | 23%      | 14%      |
| 8614.2202                                  | 0.429                      | 0.346                | 0.442                     | 24%      | 28%      |
| 8616.8185                                  | 0.429                      | 0.439                | 0.450                     | 2%       | 3%       |
| 8617.3744                                  | 0.328                      | 0.269                | 0.266                     | 22%      | 1%       |
| 8617.4771                                  | 0.466                      | 0.458                | 0.403                     | 2%       | 12%      |
| 8621.2246                                  | 0.384                      | 0.372                | 0.388                     | 3%       | 4%       |
| 8622.2559                                  | 0.384                      | 0.462                | 0.457                     | 17%      | 1%       |
| 8625.4630                                  | 0.328                      | 0.291                | 0.262                     | 13%      | 10%      |
| 8625.5191                                  | 0.328                      | 0.389                | 0.194                     | 16%      | 50%      |
| 8632.8041                                  | 0.439                      | 0.445                | 0.419                     | 1%       | 6%       |
| 8633.4115                                  | 0.439                      | 0.377                | 0.387                     | 16%      | 3%       |
| 8639.7290                                  | 0.423                      | 0.494                | 0.397                     | 14%      | 20%      |
| 8639.9579                                  | 0.439                      | 0.351                | 0.298                     | 25%      | 15%      |
| 8640.7199                                  | 0.328                      | 0.334                | 0.348                     | 2%       | 4%       |
| 8644.0273                                  | 0.466                      | 0.317                | 0.319                     | 47%      | 1%       |
| 8644.2343                                  | 0.466                      | 0.288                | 0.304                     | 62%      | 6%       |
| 8645.3976                                  | 0.301                      | 0.354                | 0.284                     | 15%      | 20%      |
| 8645.5092                                  | 0.423                      | 0.312                | 0.319                     | 36%      | 2%       |
| 8646.0348                                  | 0.328                      | 0.311                | 0.184                     | 5%       | 41%      |
| 8646.8882                                  | 0.429                      | 0.449                | 0.370                     | 4%       | 18%      |
| 8646.9514                                  | 0.384                      | 0.404                | 0.400                     | 5%       | 1%       |
| 8647.4431                                  | 0.423                      | 0.182                | 0.217                     | 132%     | 19%      |
| 8648.7506                                  | 0.423                      | 0.453                | 0.461                     | 7%       | 2%       |
| 8648.7506                                  | 0.439                      | 0.453                | 0.461                     | 3%       | 2%       |
| 8648.9573                                  | 0.384                      | 0.309                | 0.315                     | 24%      | 2%       |
| 8649.5095                                  | 0.328                      | 0.256                | 0.273                     | 28%      | 7%       |
| 8649.6772                                  | 0.429                      | 0.443                | 0.460                     | 3%       | 4%       |
| 8650.1698                                  | 0.328                      | 0.355                | 0.370                     | 8%       | 4%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8650.4769                                  | 0.466                      | 0.371                | 0.391                     | 26%      | 5%       |
| 8651.0946                                  | 0.384                      | 0.401                | 0.400                     | 4%       | 0%       |
| 8654.3099                                  | 0.429                      | 0.474                | 0.426                     | 9%       | 10%      |
| 8654.9706                                  | 0.384                      | 0.277                | 0.239                     | 39%      | 14%      |
| 8655.2726                                  | 0.466                      | 0.350                | 0.385                     | 33%      | 10%      |
| 8656.4993                                  | 0.328                      | 0.323                | 0.330                     | 2%       | 2%       |
| 8657.1444                                  | 0.423                      | 0.470                | 0.472                     | 10%      | 0%       |
| 8657.2900                                  | 0.384                      | 0.423                | 0.431                     | 9%       | 2%       |
| 8660.2447                                  | 0.466                      | 0.416                | 0.426                     | 12%      | 2%       |
| 8660.9726                                  | 0.429                      | 0.392                | 0.498                     | 10%      | 27%      |
| 8662.5973                                  | 0.384                      | 0.317                | 0.360                     | 21%      | 13%      |
| 8663.4776                                  | 0.464                      | 0.484                | 0.452                     | 4%       | 7%       |
| 8663.5126                                  | 0.429                      | 0.394                | 0.331                     | 9%       | 16%      |
| 8665.3293                                  | 0.328                      | 0.436                | 0.339                     | 25%      | 22%      |
| 8665.8690                                  | 0.423                      | 0.331                | 0.314                     | 28%      | 5%       |
| 8669.5990                                  | 0.429                      | 0.734                | 0.397                     | 42%      | 46%      |
| 8670.6790                                  | 0.466                      | 0.319                | 0.325                     | 46%      | 2%       |
| 8673.8502                                  | 0.328                      | 0.320                | 0.349                     | 2%       | 9%       |
| 8676.1470                                  | 0.429                      | 0.380                | 0.464                     | 13%      | 22%      |
| 8678.6366                                  | 0.439                      | 0.383                | 0.390                     | 15%      | 2%       |
| 8679.2964                                  | 0.439                      | 0.379                | 0.406                     | 16%      | 7%       |
| 8681.2656                                  | 0.384                      | 0.380                | 0.388                     | 1%       | 2%       |
| 8687.2511                                  | 0.466                      | 0.362                | 0.389                     | 29%      | 8%       |
| 8687.3834                                  | 0.423                      | 0.341                | 0.339                     | 24%      | 1%       |
| 8691.3096                                  | 0.328                      | 0.350                | 0.372                     | 6%       | 6%       |
| 8692.6552                                  | 0.464                      | 0.413                | 0.442                     | 12%      | 7%       |
| 8694.1974                                  | 0.466                      | 0.417                | 0.375                     | 12%      | 10%      |
| 8694.4552                                  | 0.466                      | 0.445                | 0.431                     | 5%       | 3%       |
| 8695.8368                                  | 0.429                      | 0.379                | 0.397                     | 13%      | 5%       |
| 8696.4737                                  | 0.384                      | 0.204                | 0.281                     | 88%      | 38%      |
| 8700.8020                                  | 0.439                      | 0.449                | 0.474                     | 2%       | 6%       |
| 8703.0132                                  | 0.384                      | 0.430                | 0.462                     | 11%      | 7%       |
| 8703.5140                                  | 0.466                      | 0.460                | 0.469                     | 1%       | 2%       |
| 8705.3744                                  | 0.464                      | 0.330                | 0.468                     | 41%      | 42%      |
| 8707.6484                                  | 0.429                      | 0.418                | 0.437                     | 3%       | 5%       |
| 8709.8507                                  | 0.328                      | 0.167                | 0.166                     | 97%      | 0%       |
| 8709.8507                                  | 0.328                      | 0.167                | 0.166                     | 97%      | 0%       |
| 8710.4497                                  | 0.384                      | 0.299                | 0.339                     | 29%      | 13%      |
| 8710.4923                                  | 0.384                      | 0.365                | 0.143                     | 5%       | 61%      |
| 8713.8968                                  | 0.423                      | 0.302                | 0.290                     | 40%      | 4%       |
| 8714.0093                                  | 0.384                      | 0.397                | 0.349                     | 3%       | 12%      |
| 8717.2475                                  | 0.439                      | 0.420                | 0.434                     | 4%       | 3%       |
| 8720.1000                                  | 0.328                      | 0.310                | 0.331                     | 6%       | 7%       |
| 8720.6148                                  | 0.464                      | 0.455                | 0.504                     | 2%       | 11%      |
| 8722.1664                                  | 0.301                      | 0.429                | 0.458                     | 30%      | 7%       |
| 8722.9047                                  | 0.423                      | 0.270                | 0.271                     | 57%      | 1%       |
| 8723.2103                                  | 0.423                      | 0.404                | 0.321                     | 5%       | 21%      |
| 8724.4451                                  | 0.444                      | 0.474                | 0.464                     | 6%       | 2%       |
| 8728.1404                                  | 0.429                      | 0.259                | 0.242                     | 66%      | 6%       |
| 8728.5793                                  | 0.429                      | 0.261                | 0.272                     | 65%      | 4%       |
| 8729.2107                                  | 0.468                      | 0.361                | 0.384                     | 30%      | 6%       |
| 8734.3537                                  | 0.464                      | 0.384                | 0.408                     | 21%      | 6%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8737.4381                                  | 0.429                      | 0.381                | 0.390                     | 13%      | 2%       |
| 8739.2476                                  | 0.464                      | 0.436                | 0.390                     | 6%       | 11%      |
| 8741.9880                                  | 0.439                      | 0.436                | 0.386                     | 1%       | 11%      |
| 8742.4159                                  | 0.466                      | 0.324                | 0.260                     | 44%      | 20%      |
| 8744.4460                                  | 0.429                      | 0.449                | 0.269                     | 4%       | 40%      |
| 8744.9211                                  | 0.423                      | 0.328                | 0.349                     | 29%      | 6%       |
| 8747.3524                                  | 0.260                      | 0.213                | 0.223                     | 22%      | 5%       |
| 8748.8769                                  | 0.429                      | 0.284                | 0.279                     | 51%      | 2%       |
| 8749.8257                                  | 0.423                      | 0.300                | 0.298                     | 41%      | 1%       |
| 8750.0883                                  | 0.423                      | 0.436                | 0.412                     | 3%       | 5%       |
| 8750.2426                                  | 0.328                      | 0.365                | 0.361                     | 10%      | 1%       |
| 8750.7319                                  | 0.429                      | 0.407                | 0.423                     | 5%       | 4%       |
| 8751.5023                                  | 0.423                      | 0.354                | 0.388                     | 20%      | 10%      |
| 8751.9225                                  | 0.423                      | 0.252                | 0.228                     | 68%      | 9%       |
| 8757.3956                                  | 0.423                      | 0.398                | 0.421                     | 6%       | 6%       |
| 8760.8926                                  | 0.384                      | 0.391                | 0.388                     | 2%       | 1%       |
| 8763.1293                                  | 0.282                      | 0.210                | 0.242                     | 35%      | 15%      |
| 8769.0855                                  | 0.439                      | 0.293                | 0.298                     | 50%      | 2%       |
| 8769.1303                                  | 0.439                      | 0.253                | 0.241                     | 74%      | 5%       |
| 8770.1243                                  | 0.328                      | 0.364                | 0.385                     | 10%      | 6%       |
| 8772.7765                                  | 0.429                      | 0.354                | 0.362                     | 21%      | 2%       |
| 8773.1125                                  | 0.282                      | 0.241                | 0.230                     | 17%      | 5%       |
| 8773.2186                                  | 0.282                      | 0.245                | 0.202                     | 15%      | 17%      |
| 8773.4680                                  | 0.423                      | 0.390                | 0.430                     | 8%       | 10%      |
| 8774.5355                                  | 0.429                      | 0.432                | 0.355                     | 1%       | 18%      |
| 8776.6044                                  | 0.301                      | 0.367                | 0.381                     | 18%      | 4%       |
| 8778.6577                                  | 0.468                      | 0.362                | 0.396                     | 29%      | 10%      |
| 8782.4875                                  | 0.384                      | 0.383                | 0.415                     | 0%       | 8%       |
| 8786.6875                                  | 0.464                      | 0.400                | 0.394                     | 16%      | 1%       |
| 8787.1787                                  | 0.468                      | 0.370                | 0.386                     | 26%      | 4%       |
| 8787.1787                                  | 0.466                      | 0.370                | 0.386                     | 26%      | 4%       |
| 8789.2226                                  | 0.301                      | 0.280                | 0.269                     | 7%       | 4%       |
| 8791.8268                                  | 0.429                      | 0.413                | 0.385                     | 4%       | 7%       |
| 8792.4039                                  | 0.328                      | 0.487                | 0.553                     | 33%      | 14%      |
| 8793.2832                                  | 0.464                      | 0.466                | 0.430                     | 0%       | 8%       |
| 8794.2800                                  | 0.429                      | 0.386                | 0.500                     | 11%      | 29%      |
| 8794.3001                                  | 0.466                      | 0.386                | 0.500                     | 21%      | 29%      |
| 8795.0727                                  | 0.429                      | 0.384                | 0.402                     | 12%      | 5%       |
| 8795.7100                                  | 0.423                      | 0.421                | 0.442                     | 0%       | 5%       |
| 8796.1715                                  | 0.429                      | 0.424                | 0.439                     | 1%       | 4%       |
| 8797.9924                                  | 0.301                      | 0.304                | 0.315                     | 1%       | 3%       |
| 8798.1221                                  | 0.439                      | 0.427                | 0.441                     | 3%       | 3%       |
| 8798.3691                                  | 0.301                      | 0.202                | 0.306                     | 49%      | 52%      |
| 8799.0719                                  | 0.439                      | 0.328                | 0.371                     | 34%      | 13%      |
| 8799.6422                                  | 0.444                      | 0.498                | 0.472                     | 11%      | 5%       |
| 8801.0765                                  | 0.301                      | 0.279                | 0.287                     | 8%       | 3%       |
| 8803.7999                                  | 0.464                      | 0.466                | 0.495                     | 0%       | 6%       |
| 8804.8756                                  | 0.301                      | 0.270                | 0.296                     | 12%      | 10%      |
| 8805.9591                                  | 0.439                      | 0.419                | 0.460                     | 5%       | 10%      |
| 8805.9600                                  | 0.429                      | 0.419                | 0.460                     | 2%       | 10%      |
| 8806.6735                                  | 0.328                      | 0.305                | 0.344                     | 8%       | 13%      |
| 8807.9675                                  | 0.328                      | 0.355                | 0.275                     | 8%       | 23%      |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8809.7930                                  | 0.301                      | 0.167                | 0.266                     | 80%      | 59%      |
| 8814.7917                                  | 0.301                      | 0.395                | 0.324                     | 24%      | 18%      |
| 8815.2539                                  | 0.429                      | 0.308                | 0.300                     | 39%      | 3%       |
| 8815.5040                                  | 0.328                      | 0.220                | 0.202                     | 49%      | 8%       |
| 8817.1429                                  | 0.439                      | 0.311                | 0.436                     | 41%      | 40%      |
| 8818.9105                                  | 0.384                      | 0.201                | 0.197                     | 91%      | 2%       |
| 8820.1372                                  | 0.429                      | 0.311                | 0.304                     | 38%      | 2%       |
| 8821.7636                                  | 0.384                      | 0.360                | 0.314                     | 7%       | 13%      |
| 8822.1266                                  | 0.439                      | 0.359                | 0.382                     | 22%      | 7%       |
| 8822.4376                                  | 0.328                      | 0.329                | 0.333                     | 0%       | 1%       |
| 8823.2909                                  | 0.439                      | 0.356                | 0.437                     | 23%      | 23%      |
| 8823.3405                                  | 0.282                      | 0.338                | 0.309                     | 17%      | 9%       |
| 8825.1842                                  | 0.439                      | 0.292                | 0.417                     | 50%      | 43%      |
| 8825.8209                                  | 0.384                      | 0.357                | 0.368                     | 8%       | 3%       |
| 8827.3173                                  | 0.328                      | 0.268                | 0.285                     | 22%      | 6%       |
| 8827.4812                                  | 0.466                      | 0.361                | 0.397                     | 29%      | 10%      |
| 8828.8108                                  | 0.429                      | 0.495                | 0.486                     | 13%      | 2%       |
| 8832.1600                                  | 0.429                      | 0.421                | 0.432                     | 2%       | 3%       |
| 8833.3289                                  | 0.301                      | 0.247                | 0.189                     | 22%      | 23%      |
| 8835.2598                                  | 0.466                      | 0.257                | 0.404                     | 81%      | 57%      |
| 8835.7382                                  | 0.328                      | 0.233                | 0.217                     | 41%      | 7%       |
| 8837.8672                                  | 0.439                      | 0.420                | 0.389                     | 5%       | 7%       |
| 8840.2779                                  | 0.429                      | 0.572                | 0.414                     | 25%      | 28%      |
| 8841.4504                                  | 0.384                      | 0.226                | 0.212                     | 70%      | 6%       |
| 8842.8103                                  | 0.328                      | 0.252                | 0.328                     | 30%      | 30%      |
| 8844.9263                                  | 0.384                      | 0.248                | 0.244                     | 55%      | 1%       |
| 8846.0345                                  | 0.384                      | 0.266                | 0.374                     | 44%      | 41%      |
| 8846.1003                                  | 0.423                      | 0.086                | 0.223                     | 390%     | 158%     |
| 8846.1394                                  | 0.423                      | 0.246                | 0.198                     | 72%      | 19%      |
| 8851.0159                                  | 0.328                      | 0.133                | 0.079                     | 146%     | 41%      |
| 8852.0347                                  | 0.466                      | 0.458                | 0.442                     | 2%       | 3%       |
| 8853.7971                                  | 0.439                      | 0.426                | 0.442                     | 3%       | 4%       |
| 8857.0275                                  | 0.429                      | 0.462                | 0.452                     | 7%       | 2%       |
| 8862.8369                                  | 0.384                      | 0.379                | 0.440                     | 1%       | 16%      |
| 8863.3414                                  | 0.384                      | 0.310                | 0.322                     | 24%      | 4%       |
| 8863.7441                                  | 0.423                      | 0.379                | 0.411                     | 12%      | 9%       |
| 8868.7323                                  | 0.423                      | 0.386                | 0.437                     | 10%      | 13%      |
| 8888.8625                                  | 0.466                      | 0.402                | 0.413                     | 16%      | 3%       |
| 8889.6063                                  | 0.423                      | 0.457                | 0.363                     | 7%       | 21%      |
| 8889.8895                                  | 0.384                      | 0.196                | 0.300                     | 96%      | 53%      |
| 8890.4783                                  | 0.423                      | 0.330                | 0.323                     | 28%      | 2%       |
| 8892.0864                                  | 0.282                      | 0.295                | 0.308                     | 4%       | 4%       |
| 8897.0530                                  | 0.464                      | 0.445                | 0.444                     | 4%       | 0%       |
| 8897.0600                                  | 0.423                      | 0.445                | 0.444                     | 5%       | 0%       |
| 8900.7516                                  | 0.328                      | 0.236                | 0.261                     | 39%      | 11%      |
| 8901.0346                                  | 0.464                      | 0.466                | 0.474                     | 0%       | 2%       |
| 8905.2400                                  | 0.384                      | 0.301                | 0.401                     | 28%      | 33%      |
| 8909.9552                                  | 0.301                      | 0.208                | 0.170                     | 45%      | 18%      |
| 8910.6779                                  | 0.301                      | 0.232                | 0.206                     | 30%      | 11%      |
| 8912.5905                                  | 0.301                      | 0.299                | 0.301                     | 1%       | 1%       |
| 8915.0512                                  | 0.423                      | 0.423                | 0.381                     | 0%       | 10%      |
| 8915.6959                                  | 0.439                      | 0.384                | 0.404                     | 14%      | 5%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 8918.4975                                  | 0.439                      | 0.395                | 0.406                     | 11%      | 3%       |
| 8918.4975                                  | 0.282                      | 0.395                | 0.406                     | 29%      | 3%       |
| 8921.1624                                  | 0.466                      | 0.437                | 0.471                     | 7%       | 8%       |
| 8926.0008                                  | 0.301                      | 0.274                | 0.302                     | 10%      | 10%      |
| 8927.0514                                  | 0.466                      | 0.423                | 0.436                     | 10%      | 3%       |
| 8929.1744                                  | 0.328                      | 0.194                | 0.271                     | 69%      | 40%      |
| 8930.1568                                  | 0.328                      | 0.252                | 0.306                     | 30%      | 21%      |
| 8930.4700                                  | 0.464                      | 0.470                | 0.505                     | 1%       | 7%       |
| 8930.4731                                  | 0.439                      | 0.470                | 0.505                     | 7%       | 7%       |
| 8931.1546                                  | 0.282                      | 0.231                | 0.255                     | 22%      | 10%      |
| 8931.3420                                  | 0.439                      | 0.371                | 0.400                     | 18%      | 8%       |
| 8932.6513                                  | 0.423                      | 0.396                | 0.539                     | 7%       | 36%      |
| 8932.7680                                  | 0.466                      | 0.417                | 0.297                     | 12%      | 29%      |
| 8933.8834                                  | 0.384                      | 0.416                | 0.428                     | 8%       | 3%       |
| 8933.8900                                  | 0.444                      | 0.416                | 0.428                     | 7%       | 3%       |
| 8934.9174                                  | 0.301                      | 0.325                | 0.291                     | 7%       | 10%      |
| 8935.8781                                  | 0.429                      | 0.386                | 0.377                     | 11%      | 2%       |
| 8936.6081                                  | 0.429                      | 0.324                | 0.412                     | 32%      | 27%      |
| 8940.2634                                  | 0.439                      | 0.237                | 0.298                     | 86%      | 26%      |
| 8940.6560                                  | 0.439                      | 0.448                | 0.474                     | 2%       | 6%       |
| 8941.2709                                  | 0.328                      | 0.255                | 0.328                     | 28%      | 28%      |
| 8943.3813                                  | 0.464                      | 0.447                | 0.510                     | 4%       | 14%      |
| 8944.2903                                  | 0.301                      | 0.222                | 0.237                     | 36%      | 7%       |
| 8945.6204                                  | 0.301                      | 0.249                | 0.254                     | 21%      | 2%       |
| 8949.7319                                  | 0.429                      | 0.255                | 0.392                     | 68%      | 54%      |
| 8951.6807                                  | 0.384                      | 0.370                | 0.381                     | 4%       | 3%       |
| 8954.3298                                  | 0.282                      | 0.217                | 0.234                     | 30%      | 8%       |
| 8955.3162                                  | 0.423                      | 0.233                | 0.387                     | 81%      | 66%      |
| 8957.4569                                  | 0.439                      | 0.436                | 0.449                     | 1%       | 3%       |
| 8959.0003                                  | 0.464                      | 0.441                | 0.419                     | 5%       | 5%       |
| 8962.4776                                  | 0.466                      | 0.466                | 0.509                     | 0%       | 9%       |
| 8962.9996                                  | 0.444                      | 0.457                | 0.499                     | 3%       | 9%       |
| 8965.2408                                  | 0.260                      | 0.200                | 0.220                     | 30%      | 10%      |
| 8966.2431                                  | 0.429                      | 0.307                | 0.311                     | 40%      | 1%       |
| 8969.6937                                  | 0.439                      | 0.411                | 0.425                     | 7%       | 3%       |
| 8974.7171                                  | 0.439                      | 0.373                | 0.353                     | 18%      | 5%       |
| 8977.8601                                  | 0.429                      | 0.363                | 0.386                     | 18%      | 6%       |
| 8980.9264                                  | 0.282                      | 0.312                | 0.296                     | 10%      | 5%       |
| 8981.9410                                  | 0.237                      | 0.253                | 0.237                     | 6%       | 6%       |
| 8986.9934                                  | 0.429                      | 0.421                | 0.418                     | 2%       | 1%       |
| 8987.0764                                  | 0.439                      | 0.359                | 0.436                     | 22%      | 21%      |
| 8987.6308                                  | 0.439                      | 0.472                | 0.494                     | 7%       | 5%       |
| 8988.2273                                  | 0.214                      | 0.208                | 0.211                     | 3%       | 1%       |
| 8991.5429                                  | 0.423                      | 0.321                | 0.326                     | 32%      | 1%       |
| 8993.5569                                  | 0.191                      | 0.151                | 0.170                     | 27%      | 13%      |
| 9003.4336                                  | 0.464                      | 0.396                | 0.403                     | 17%      | 2%       |
| 9005.1607                                  | 0.439                      | 0.369                | 0.377                     | 19%      | 2%       |
| 9008.5684                                  | 0.260                      | 0.168                | 0.182                     | 55%      | 8%       |
| 9010.9558                                  | 0.384                      | 0.195                | 0.213                     | 97%      | 9%       |
| 9015.0110                                  | 0.237                      | 0.188                | 0.156                     | 26%      | 17%      |
| 9015.2978                                  | 0.423                      | 0.350                | 0.382                     | 21%      | 9%       |
| 9015.8452                                  | 0.466                      | 0.485                | 0.499                     | 4%       | 3%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 9016.0625                                  | 0.423                      | 0.244                | 0.211                     | 73%      | 14%      |
| 9016.0700                                  | 0.301                      | 0.244                | 0.211                     | 23%      | 14%      |
| 9017.8538                                  | 0.423                      | 0.364                | 0.410                     | 16%      | 13%      |
| 9023.9444                                  | 0.328                      | 0.321                | 0.278                     | 2%       | 13%      |
| 9025.9457                                  | 0.384                      | 0.401                | 0.412                     | 4%       | 3%       |
| 9025.9500                                  | 0.464                      | 0.401                | 0.412                     | 16%      | 3%       |
| 9029.1892                                  | 0.328                      | 0.211                | 0.224                     | 56%      | 6%       |
| 9029.5651                                  | 0.328                      | 0.217                | 0.232                     | 52%      | 7%       |
| 9030.3048                                  | 0.301                      | 0.306                | 0.303                     | 2%       | 1%       |
| 9031.6137                                  | 0.468                      | 0.330                | 0.329                     | 42%      | 0%       |
| 9036.4447                                  | 0.260                      | 0.164                | 0.227                     | 59%      | 39%      |
| 9036.5569                                  | 0.429                      | 0.417                | 0.437                     | 3%       | 5%       |
| 9037.6092                                  | 0.464                      | 0.472                | 0.523                     | 2%       | 11%      |
| 9038.2260                                  | 0.384                      | 0.263                | 0.266                     | 46%      | 1%       |
| 9038.7791                                  | 0.423                      | 0.368                | 0.381                     | 15%      | 4%       |
| 9040.4142                                  | 0.260                      | 0.244                | 0.271                     | 7%       | 11%      |
| 9041.2468                                  | 0.301                      | 0.279                | 0.265                     | 8%       | 5%       |
| 9043.4203                                  | 0.301                      | 0.279                | 0.280                     | 8%       | 0%       |
| 9044.9208                                  | 0.282                      | 0.304                | 0.300                     | 7%       | 1%       |
| 9045.0551                                  | 0.423                      | 0.391                | 0.397                     | 8%       | 1%       |
| 9046.5498                                  | 0.237                      | 0.187                | 0.177                     | 27%      | 5%       |
| 9047.0465                                  | 0.301                      | 0.219                | 0.235                     | 37%      | 7%       |
| 9050.8446                                  | 0.466                      | 0.393                | 0.402                     | 19%      | 2%       |
| 9053.2264                                  | 0.328                      | 0.222                | 0.169                     | 48%      | 24%      |
| 9054.0850                                  | 0.464                      | 0.488                | 0.524                     | 5%       | 7%       |
| 9056.2758                                  | 0.423                      | 0.311                | 0.470                     | 36%      | 51%      |
| 9058.0136                                  | 0.282                      | 0.291                | 0.282                     | 3%       | 3%       |
| 9060.3986                                  | 0.384                      | 0.374                | 0.407                     | 3%       | 9%       |
| 9063.6910                                  | 0.466                      | 0.410                | 0.416                     | 14%      | 2%       |
| 9068.8712                                  | 0.439                      | 0.433                | 0.401                     | 1%       | 7%       |
| 9068.9795                                  | 0.464                      | 0.386                | 0.420                     | 20%      | 9%       |
| 9071.1800                                  | 0.439                      | 0.357                | 0.373                     | 23%      | 4%       |
| 9071.1983                                  | 0.429                      | 0.357                | 0.373                     | 20%      | 4%       |
| 9072.0268                                  | 0.384                      | 0.406                | 0.406                     | 5%       | 0%       |
| 9073.8745                                  | 0.466                      | 0.433                | 0.439                     | 8%       | 1%       |
| 9074.3943                                  | 0.260                      | 0.324                | 0.338                     | 20%      | 4%       |
| 9074.6434                                  | 0.429                      | 0.387                | 0.402                     | 11%      | 4%       |
| 9076.8871                                  | 0.429                      | 0.374                | 0.386                     | 15%      | 3%       |
| 9080.9042                                  | 0.466                      | 0.410                | 0.414                     | 14%      | 1%       |
| 9082.4900                                  | 0.260                      | 0.370                | 0.347                     | 30%      | 6%       |
| 9085.0126                                  | 0.429                      | 0.376                | 0.385                     | 14%      | 2%       |
| 9086.4920                                  | 0.429                      | 0.341                | 0.398                     | 26%      | 17%      |
| 9086.6601                                  | 0.384                      | 0.414                | 0.419                     | 7%       | 1%       |
| 9088.7328                                  | 0.423                      | 0.367                | 0.388                     | 15%      | 6%       |
| 9088.9061                                  | 0.429                      | 0.377                | 0.383                     | 14%      | 2%       |
| 9092.3353                                  | 0.423                      | 0.390                | 0.403                     | 8%       | 3%       |
| 9093.3668                                  | 0.466                      | 0.453                | 0.375                     | 3%       | 17%      |
| 9094.6143                                  | 0.439                      | 0.428                | 0.436                     | 3%       | 2%       |
| 9095.0338                                  | 0.439                      | 0.425                | 0.441                     | 3%       | 4%       |
| 9095.5520                                  | 0.423                      | 0.385                | 0.386                     | 10%      | 0%       |
| 9096.0003                                  | 0.423                      | 0.400                | 0.413                     | 6%       | 3%       |
| 9099.2023                                  | 0.466                      | 0.404                | 0.404                     | 15%      | 0%       |

**Coefficients d'auto-élargissement**

| <b>Position<br/>(cm<sup>-1</sup>) [15]</b> | <b>HITRAN2008<br/>[15]</b> | <b>Obs<br/>[116]</b> | <b>Tolchenov<br/>[98]</b> | <b>A</b> | <b>B</b> |
|--|----------------------------|----------------------|---------------------------|----------|----------|
| 9100.2034                                  | 0.384                      | 0.153                | 0.268                     | 151%     | 75%      |
| 9101.4036                                  | 0.423                      | 0.399                | 0.422                     | 6%       | 6%       |
| 9102.9972                                  | 0.429                      | 0.378                | 0.383                     | 13%      | 1%       |
| 9105.8893                                  | 0.429                      | 0.351                | 0.398                     | 22%      | 13%      |
| 9106.0300                                  | 0.384                      | 0.326                | 0.341                     | 18%      | 5%       |
| 9107.1432                                  | 0.439                      | 0.342                | 0.348                     | 28%      | 2%       |
| 9107.3308                                  | 0.423                      | 0.437                | 0.425                     | 3%       | 3%       |
| 9107.5692                                  | 0.429                      | 0.357                | 0.350                     | 20%      | 2%       |
| 9108.1560                                  | 0.429                      | 0.381                | 0.398                     | 13%      | 5%       |
| 9108.4368                                  | 0.439                      | 0.352                | 0.360                     | 25%      | 2%       |
| 9108.7651                                  | 0.439                      | 0.367                | 0.387                     | 20%      | 5%       |
| 9109.7742                                  | 0.328                      | 0.296                | 0.304                     | 11%      | 3%       |
| 9110.7933                                  | 0.464                      | 0.373                | 0.400                     | 24%      | 7%       |
| 9110.8897                                  | 0.328                      | 0.289                | 0.311                     | 14%      | 8%       |
| 9113.8484                                  | 0.384                      | 0.315                | 0.333                     | 22%      | 6%       |
| 9119.6461                                  | 0.423                      | 0.336                | 0.342                     | 26%      | 2%       |
| 9124.1394                                  | 0.328                      | 0.274                | 0.281                     | 20%      | 3%       |
| 9126.1075                                  | 0.429                      | 0.360                | 0.375                     | 19%      | 4%       |
| 9129.2184                                  | 0.384                      | 0.324                | 0.335                     | 19%      | 3%       |
| 9129.8838                                  | 0.384                      | 0.348                | 0.373                     | 10%      | 7%       |
| 9134.4330                                  | 0.423                      | 0.322                | 0.321                     | 31%      | 0%       |
| 9134.5359                                  | 0.423                      | 0.432                | 0.436                     | 2%       | 1%       |
| 9134.8586                                  | 0.429                      | 0.292                | 0.317                     | 47%      | 8%       |
| 9136.1412                                  | 0.439                      | 0.446                | 0.465                     | 2%       | 4%       |
| 9136.5950                                  | 0.301                      | 0.248                | 0.271                     | 21%      | 9%       |
| 9138.2022                                  | 0.423                      | 0.389                | 0.408                     | 9%       | 5%       |
| 9142.3155                                  | 0.384                      | 0.374                | 0.392                     | 3%       | 5%       |
| 9145.9126                                  | 0.429                      | 0.418                | 0.435                     | 3%       | 4%       |
| 9150.4806                                  | 0.384                      | 0.386                | 0.399                     | 0%       | 3%       |
| 9151.1034                                  | 0.429                      | 0.221                | 0.328                     | 94%      | 48%      |
| 9164.0891                                  | 0.384                      | 0.335                | 0.350                     | 15%      | 4%       |
| 9168.6951                                  | 0.423                      | 0.313                | 0.350                     | 35%      | 12%      |
| 9172.7665                                  | 0.328                      | 0.336                | 0.427                     | 2%       | 27%      |
| 9172.9051                                  | 0.466                      | 0.410                | 0.424                     | 14%      | 3%       |
| 9178.3488                                  | 0.466                      | 0.365                | 0.377                     | 28%      | 3%       |
| 9181.1789                                  | 0.423                      | 0.346                | 0.361                     | 22%      | 4%       |
| 9181.4791                                  | 0.439                      | 0.318                | 0.328                     | 38%      | 3%       |
| 9186.9218                                  | 0.439                      | 0.406                | 0.429                     | 8%       | 6%       |
| 9192.9639                                  | 0.384                      | 0.348                | 0.376                     | 10%      | 8%       |
| 9197.7947                                  | 0.429                      | 0.360                | 0.366                     | 19%      | 2%       |
| 9198.7363                                  | 0.429                      | 0.417                | 0.429                     | 3%       | 3%       |
| 9202.6335                                  | 0.429                      | 0.372                | 0.338                     | 15%      | 9%       |
| 9202.7557                                  | 0.301                      | 0.354                | 0.316                     | 15%      | 11%      |
| 9205.7664                                  | 0.466                      | 0.383                | 0.379                     | 22%      | 1%       |
| 9213.9209                                  | 0.384                      | 0.323                | 0.347                     | 19%      | 8%       |
| 9214.5756                                  | 0.384                      | 0.255                | 0.354                     | 51%      | 39%      |
| 9219.8520                                  | 0.439                      | 0.453                | 0.463                     | 3%       | 2%       |
| 9221.8855                                  | 0.384                      | 0.368                | 0.392                     | 4%       | 7%       |
| 9224.2465                                  | 0.423                      | 0.352                | 0.371                     | 20%      | 5%       |
| 9227.6952                                  | 0.439                      | 0.346                | 0.356                     | 27%      | 3%       |
| 9247.4969                                  | 0.429                      | 0.367                | 0.380                     | 17%      | 3%       |
| 9251.2391                                  | 0.319                      | 0.284                | 0.313                     | 12%      | 10%      |

| Position<br>(cm <sup>-1</sup> ) [15] | Coefficients d'auto-élargissement |              |                   |     | A  | B |
|--------------------------------------|-----------------------------------|--------------|-------------------|-----|----|---|
|                                      | HITRAN2008<br>[15]                | Obs<br>[116] | Tolchenov<br>[98] |     |    |   |
| 9253.5825                            | 0.384                             | 0.351        | 0.368             | 9%  | 5% |   |
| 9260.9181                            | 0.245                             | 0.296        | 0.299             | 17% | 1% |   |
| 9263.4351                            | 0.402                             | 0.382        | 0.408             | 5%  | 7% |   |
| 9272.2582                            | 0.322                             | 0.301        | 0.310             | 7%  | 3% |   |
| 9274.6482                            | 0.425                             | 0.405        | 0.404             | 5%  | 0% |   |
| 9280.0388                            | 0.376                             | 0.350        | 0.364             | 8%  | 4% |   |
| 9280.8167                            | 0.342                             | 0.308        | 0.322             | 11% | 5% |   |
| 9281.0825                            | 0.329                             | 0.299        | 0.303             | 10% | 1% |   |
| 9303.1347                            | 0.343                             | 0.322        | 0.347             | 7%  | 8% |   |
| 9304.3962                            | 0.332                             | 0.299        | 0.313             | 11% | 5% |   |
| 9305.4429                            | 0.247                             | 0.227        | 0.235             | 9%  | 4% |   |
| 9323.1833                            | 0.360                             | 0.374        | 0.360             | 4%  | 4% |   |