

XX СИМПОЗИУМ ПО МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ (HIGHRUS-2023)

УДК 544.174.2

ДВУХТЕМПЕРАТУРНЫЙ АНАЛИЗ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ИНТЕНСИВНОСТЕЙ В РОВИБРОННЫХ СПЕКТРАХ РАДИКАЛА CN¹

© 2024 г. В. А. Терашкевич^a, *, Е. А. Пазюк^a

^aМосковский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия

*e-mail: terversik@yandex.ru

Поступила в редакцию 01.11.2023 г.

После доработки 01.11.2023 г.

Принята к публикации 20.11.2023 г.

На примере моделирования ровибронных переходов в $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ - и $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ -системах радикала CN показано влияние нарушения локального термодинамического равновесия (ЛТР) как на абсолютные величины интенсивностей, так и на распределение интенсивностей в колебательно-вращательной структуре. Обсуждается возможность применения двухтемпературного приближения для оптической диагностики высокотемпературных газоплазменных сред на основании эмиссионных спектров CN в отсутствии локального термодинамического равновесия.

Ключевые слова: радикал CN, мультитемпературное распределение интенсивностей, ровибронные спектры, нарушение локального термодинамического равновесия

DOI: 10.31857/S0044453724050138, **EDN:** PJDZON

ВВЕДЕНИЕ

Молекулярная спектроскопия – безальтернативный инструмент оптической диагностики высокоскоростных газоплазменных сред, экспериментальное обнаружение и изучение которых является приоритетным направлением как в фундаментальных задачах астрофизики и астрохимии, так и в различных промышленных приложениях. Так, например, все большую актуальность и практическую значимость приобретают вопросы конвективного и радиационного переноса энергии в неравновесно нагретых газовых средах. Особенно остро эта проблема встает при попытке количественного аэротермодинамического анализа образующихся сверхзвуковых потоков [1], которые окружают космические объекты во время их проникновения в плотные слои атмосферы планет Солнечной системы [2]. Поиск оптимальной тепловой защиты управляемых космических аппаратов, многократно входящих в верхние слои планетарной атмосферы, очевидно, требует создания специализированных баз данных, содержащих радиационные и теплофизические характеристики молекул при высоких температурах.

Очевидная уникальность (как по диапазону измеренных длин волн, так и по температуре и давлению) имеющихся экспериментальных данных, полученных из спектральных наблюдений реальных

объектов, вызывает неизбежные трудности в их однозначной интерпретации, тем самым ограничивая их практическое использование в диагностических целях. Только систематический расчет частот и абсолютных интенсивностей молекулярных линий испускания и поглощения в широком диапазоне длин волн, температур и давлений способен обеспечить потребности современной оптической диагностики. В подавляющем большинстве случаев моделирование молекулярных спектров основывается на адиабатическом приближении при расчете энергетических (энергий уровней и частот ровибронных переходов) и радиационных (сил линий, сечений поглощения и т.д.) характеристик изолированных молекул, а также монотемпературной модели (приближение локального термодинамического равновесия, ЛТР) для определения концентрационных параметров анализируемой среды. Однако, именно сейчас появились веские экспериментальные доказательства необходимости выхода за рамки этих, традиционных для прикладной молекулярной спектроскопии, приближений при количественном решении задач радиационного переноса в высокотемпературных газоплазменных средах. В частности, отсутствие ЛТР наблюдается в плотных молекулярных облаках межзвездной среды [3], а также в верхних слоях звездных и планетарных атмосфер. Фотохимические процессы, индуцированные мощным УФ-излучением, приводят к образованию «горячих» молекул в атмосферах планет, поэтому корректное моделирование и анализ состава таких

¹ Иркутская обл., пос. Чара, 3–7 июля 2023 года.

атмосфер требует температурно-зависимого расчета соответствующих сечений поглощения [4]. При нарушении ЛТР предположение о том, что заселенности дискретных энергетических уровней могут быть описаны распределением Больцмана с одной температурой, становится некорректным. Необходимость перехода к мультитемпературному подходу, т.е. использование различных температур для оценки вкладов разных видов движения (поступательного, электронного, колебательного и вращательного) при расчете термодинамических свойств высоконагретых ($T > 25000$ К) двухатомных газов N_2 , O_2 и NO была показана еще в работе [5], представленной на конференции AIAA 22nd Thermophysics Conference. Фундаментальная трудность, возникающая при таком подходе, состоит в необходимости разделения полной энергии молекулы на независимые составляющие. Например, из-за очевидной невозможности строгого разделения колебательного и вращательного видов внутреннего движения молекулы формальное введение двух различных температур (T_{vib} и T_{rot}) в расчеты статистических сумм не является однозначной математической процедурой несмотря на то, что физически это разделение часто хорошо обосновано, благодаря существенно различным скоростям соответствующих столкновительных процессов колебательной и вращательной релаксации. Очевидно, что появление двух различных температур в колебательной и вращательной сумме по состояниям существенным образом меняет оценки термодинамических функций при высоких температурах. Как показал расчет сечений поглощения молекул (H_2O , CH_4 , TiO и CO) [6], в условиях нарушения ЛТР использование двухтемпературной модели является ключевым звеном при анализе атмосфер экзопланет.

Радикал CN является очень распространенной в высокотемпературных объектах двухатомной молекулой, присутствие которой обнаружено, например, в лазерной плазме [7–9]; космических объектах [10, 11]. Надежная спектроскопическая информация об этом радикале необходима для изучения процессов формирования звезд, количественного определения содержания азота и изотопов ^{12}C и ^{13}C [11, 12], для определения температуры реликтового излучения [13].

Для оптической диагностики радикала CN обычно используются ровибронные переходы, принадлежащие к красной ($A^2\Pi-X^2\Sigma^+$) и фиолетовой ($B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$) системам. Прецизионные энергетические и радиационные характеристики обеих систем были получены при анализе внутримолекулярных взаимодействий между тремя ($B^2\Sigma^+ \sim A^2\Pi \sim X^2\Sigma^+$) низколежащими электронными состояниями путем итерационного решения обратной спектроскопической задачи в рамках строгой неадиабатической модели связанных колебательных каналов [14,15]. Однако, для использования этих данных

в количественном анализе реальных объектов необходима оценка влияния нарушения условий ЛТР на перераспределение интенсивностей ровибронных переходов как в колебательной, так и во вращательной структуре спектра. В данной работе, в рамках простейшего двухтемпературного приближения, исследовано влияние нарушения ЛТР на вариации осцилляционной структуры распределения относительных интенсивностей вращательных линий, наблюдаемых в колебательных полосах $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ и $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ -переходов радикала CN.

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ В РОВИБРОННОЙ СТРУКТУРЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПОЛОС ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ В ДВУХТЕМПЕРАТУРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Интенсивность линии поглощения $I(f \leftarrow i)$ (см/молекула) из начального состояния (i) в конечное (f) определяется как [16]:

$$I(f \leftarrow i) = \frac{A_{if}}{8\pi c \tilde{\nu}_{if}^2} F_{v,J}(T) \left(1 - e^{-\frac{c_2 \tilde{\nu}_{if}}{T}} \right),$$

где A_{if} – коэффициент Эйнштейна (s^{-1}), $\tilde{\nu}_{if}$ – волновое число $i \rightarrow f$ -перехода (cm^{-1}), $F_{v,J}(T)$ – заселенность начального ровибронного состояния при температуре $T(K)$, $c_2 = hc/k_B$ – вторая радиационная постоянная ($cm K^{-1}$). Множитель $\left(1 - e^{-\frac{c_2 \tilde{\nu}_{if}}{T}} \right)$

представляет собой поправку, связанную с процессами вынужденного испускания при заселении возбужденного (f) состояния.

Интенсивность линии испускания $I(i \rightarrow f)$ (В/(молекула·ср)) выражается как:

$$I(i \rightarrow f) = \frac{A_{if} \cdot \tilde{\nu}_{if}}{4\pi} F_{v,J}(T).$$

Наиболее часто в спектроскопии, в частности, атмосферной, используются внесистемные единицы измерения интенсивностей – эрг/(с·молек·ср) [16, 17].

Заселенность ровибронного уровня энергии в случае ЛТР определяется распределением Больцмана и при заданной температуре (T) имеет вид:

$$F_{v,J}(T) = \frac{g_{v,J}^{tot} \cdot e^{-\frac{c_2 \tilde{E}_{v,J}}{T}}}{Q(T)},$$

где $g_{v,J}^{tot} = g_v^{ns} (2J + 1)$ – общая вырожденность начального ровибронного уровня энергии (основного

уровня в случае поглощения и возбужденного — в случае испускания) с колебательным квантовым числом v и вращательным квантовым числом J , g_v^{ns} — вырожденность данного уровня по ядерному спину, $\tilde{E}_{v,J} = \frac{E_{v,J}}{hc}$ — энергия ровибронного уровня (см^{-1}), $Q(T)$ — статистическая сумма по всем (n) связанным состояниям, определяемая согласно следующему выражению:

$$Q(T) = \sum_n g_{v,J}^{\text{tot}} e^{-\frac{c_2 \tilde{E}_{v,J}}{T}}.$$

При переходе к двухтемпературному приближению (введении двух независимых температур T_{vib} и T_{rot}), заселенность уровня будет иметь вид:

$$F_{v,J}(T_{\text{vib}}, T_{\text{rot}}) = \frac{g_{v,J}^{\text{tot}} e^{-\frac{c_2 \tilde{E}_v^{\text{vib}}}{T_{\text{vib}}}} e^{-\frac{c_2 \tilde{E}_J^{\text{v,rot}}}{T_{\text{rot}}}}}{Q(T_{\text{vib}}, T_{\text{rot}})}.$$

Полная энергия ровибронного уровня ($\tilde{E}_{v,J}$) факторизована суммой: $\tilde{E}_{v,J} = \tilde{E}_v^{\text{vib}} + \tilde{E}_J^{\text{v,rot}}$. Энергия колебательного (вибронного) уровня v , отвечает минимальному вращательному возбуждению (минимальному значению J данного колебательного уровня), вращательный вклад может быть получен как разность: $\tilde{E}_J^{\text{v,rot}} = \tilde{E}_{v,J} - \tilde{E}_v^{\text{vib}}$. Эффективный учет неравновесных условий в статистической сумме по состояниям проводится введением двух сомножителей:

$$Q(T) = \sum_n g_{v,J}^{\text{tot}} e^{-\frac{c_2 \tilde{E}_v^{\text{vib}}}{T_{\text{vib}}}} e^{-\frac{c_2 \tilde{E}_J^{\text{v,rot}}}{T_{\text{rot}}}}.$$

Такой подход для учета нарушения ЛТР реализован в программном комплексе ExoCross [17]. Использование различных вариантов для расчета заселенностей ровибронных уровней энергии (3) и (5) позволяет получить величины интенсивностей молекулярных линий (1) и (2) как в рамках одно-температурного, так и двухтемпературного приближений.

При моделировании спектров испускания реальных объектов от интенсивностей отдельных молекулярных линий, как правило, переходят к значениям сечений испускания — σ (в системе СИ: $\text{В}/(\text{молекула} \cdot \text{ср} \cdot \text{м}^{-1})$), когда суммируются все возможные переходы m , попадающие в исследуемый спектральный интервал с учетом контура спектральных линий [18]: $\sigma = \sum_m \sigma_m$, где сечение индивидуальной линии может быть определено в виде [17]:

$$\sigma = \alpha f(\tilde{\nu}).$$

В данных обозначениях $f(\tilde{\nu})$ — профиль спектральной линии, являющийся функцией от волнового числа $\tilde{\nu}$, соответствующего центру линии; α — величина полуширины пика на половине высоты (см^{-1}). В данной работе расчет сечений σ ($\text{эрг}/(\text{с} \cdot \text{молекула} \cdot \text{ср} \cdot \text{м}^{-1})$) [17] проводился на сетке волновых чисел, с шагом $\Delta\tilde{\nu}$, определяемым числом точек N , а также выбранным интервалом волновых чисел от ν_{min} до ν_{max} :

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{\nu_{\text{max}} - \nu_{\text{min}}}{N - 1}.$$

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для моделирования ровибронных спектров радикала CN были использованы данные о электронно-колебательно-вращательных уровнях энергии и вероятностях переходов в диапазоне от 0 до 60000 см^{-1} для трех электронных состояний $\text{B}^2\Sigma^+$, $\text{A}^2\Pi$ и $\text{X}^2\Sigma^+$, полученные в ходе итерационного решения обратной спектроскопической задачи в рамках редуцированного метода связанных колебательных каналов [14, 15] и воспроизводящие известные ровибронные уровни энергии [19] на экспериментальном уровне точности. Вся информация представлена в формате базы данных ExoMol [20] в файлах, являющихся исходными данными для программы ExoCross [17]. При расчете сечений испускания для описания уширения спектральных линий ($f(\tilde{\nu})$) был использован профиль Лоренца с величиной $\alpha = 0.01 \text{ см}^{-1}$. Абсолютные интенсивности ровибронных переходов (2) были рассчитаны как в условиях ЛТР (3), так и в рамках двухтемпературного подхода (5).

На рис. 1 представлены результаты моделирования распределения интенсивностей в $\text{B}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Sigma^+$ -системе в области прогрессии с $\Delta v = 0$ в интервале волновых чисел $\tilde{\nu}_{\text{min}} = 25730.0 \text{ см}^{-1}$, $\tilde{\nu}_{\text{max}} = 26030.0 \text{ см}^{-1}$, с числом точек $N = 1500$ (8) при $T = 6500 \text{ К}$ (приближение ЛТР, рис. 1а) и в рамках двухтемпературного подхода: $T_{\text{vib}} = 1000 \text{ К}$, $T_{\text{rot}} = 6500 \text{ К}$ (рис. 1б) и $T_{\text{vib}} = 6500 \text{ К}$, $T_{\text{rot}} = 1000 \text{ К}$ (рис. 1в). Учитывая диагональный характер $\text{B}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Sigma^+$ -системы в данном спектральном диапазоне наиболее интенсивными будут только ровибронные переходы колебательных полос с $\Delta v = 0$. При $T = 6500 \text{ К}$ (рис. 1а) в колебательной структуре четко видны только (0,0), (1,1) и (2,2) полосы, при больших значениях ($\tilde{\nu}_{\text{min}} > 25880 \text{ см}^{-1}$), соответствующих переходам с уровней с более высокими значениями v , колебательная структура практически пропадает.

При снижении T_{vib} (рис. 1б) колебательная структура в спектре исчезает, т. к. уменьшается

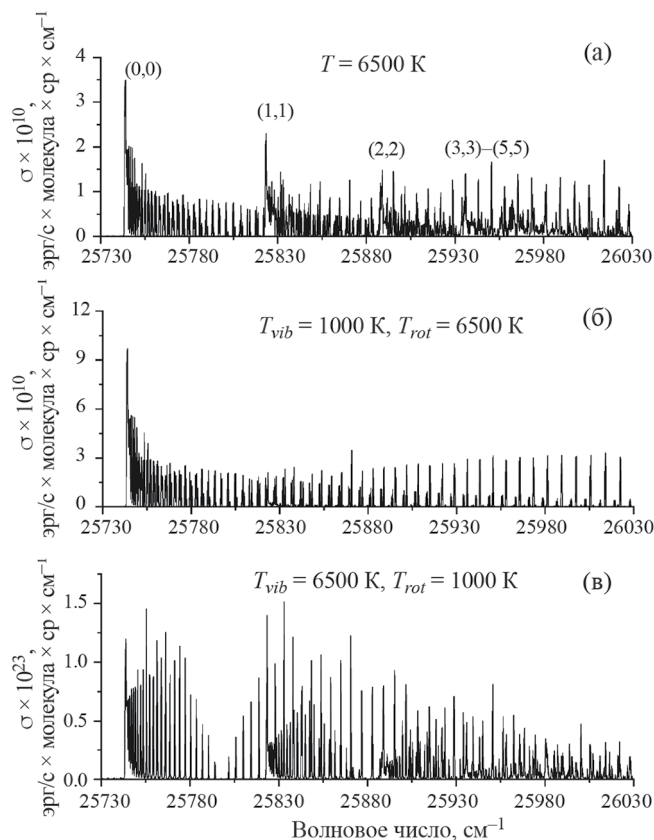


Рис. 1. Теоретические спектры испускания системы $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ (прогрессия $\Delta v = 0$), рассчитанные в однотемпературном (а) и двухтемпературном (б и в) приближении. На рис. 1а отмечены начала колебательных полос прогрессии. Для описания уширения спектральных линий использован профиль Лоренца с величиной $\alpha = 0.01 \text{ см}^{-1}$.

заселенность уровней с $v > 0$. В спектре наблюдается хорошо разрешенная вращательная структура (0,0) полосы вплоть до $J = 70$, а величины сечений испускания увеличиваются в 2–3 раза.

Уменьшение вращательной температуры (рис. 1в) даже при высокой колебательной температуре приводит к существенному (~ 13 порядков) снижению величин сечений испускания.

При анализе спектров высокого разрешения важным является распределение интенсивности во вращательной структуре и величины абсолютных интенсивностей ровибронных переходов. Для $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ -системы с учетом спин-вращательного расщепления в каждой колебательной полосе возможно образование шести вращательных ветвей: основных — R_{11} , R_{22} , P_{11} , P_{22} и сателлитных Q_{12} , Q_{21} , причем наиболее интенсивными будут переходы, соответствующие Р и R ветвям.

На рис. 2, в качестве примера, представлено распределение интенсивности испускания во

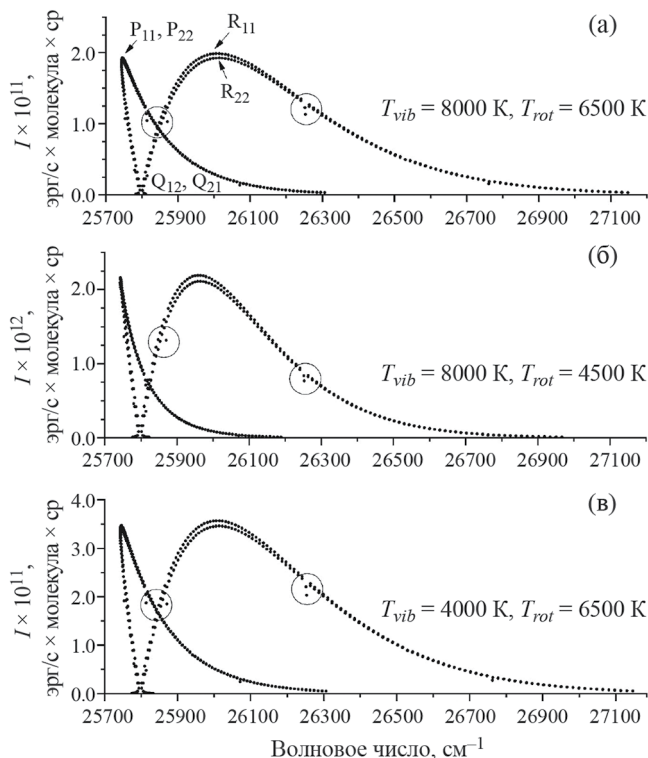


Рис. 2. Абсолютные интенсивности ровибронных переходов (2), (5) системы $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ полосы (0,0). Кругами выделены ровибронные переходы, для которых наблюдается отклонение величин абсолютных интенсивностей от гладкого поведения.

вращательной структуре (0,0) полосы системы $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$, полученное в двухтемпературном приближении: $T_{\text{vib}} = 8000 \text{ K}$, $T_{\text{rot}} = 6500 \text{ K}$ (рис. 2а), $T_{\text{vib}} = 8000 \text{ K}$, $T_{\text{rot}} = 4500 \text{ K}$ (рис. 2б) и $T_{\text{vib}} = 4000 \text{ K}$, $T_{\text{rot}} = 6500 \text{ K}$ (рис. 2в). Абсолютные интенсивности ровибронных переходов рассчитывались по (2). Как видно, колебательная полоса состоит из двух интенсивных пиков, соответствующих Р- и R-ветвям, причем образующие кант полосы Р-ветви дают узкий интенсивный пик, а для R-ветвей наблюдается более широкая форма. Переходы, относящиеся к Q-ветвям, имеют очень слабую интенсивность и их вкладом при моделировании реальных спектров можно пренебречь. При уменьшении T_{rot} абсолютные интенсивности ровибронных переходов уменьшаются практически на порядок, а положения максимумов сдвигаются в сторону меньших волновых чисел, т. к., очевидно, меняется заселенность вращательных уровней энергии. При более низких T_{rot} становится заметной разница в интенсивностях линий R_{11} - и R_{22} -ветвей. При уменьшении T_{vib} (рис. 2в) абсолютные интенсивности немного увеличиваются (~ 1.5 раза) за счет уменьшения статистических сумм (6), а положения максимумов пиков интенсивностей не меняются.

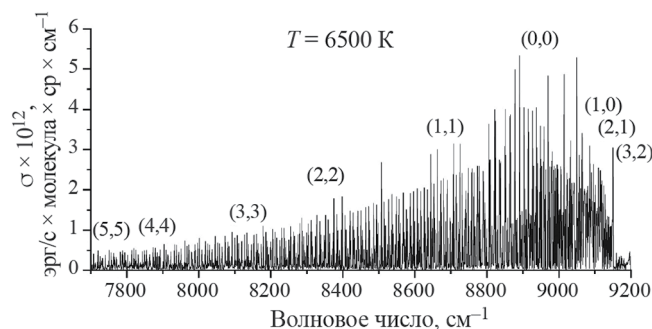


Рис. 3. Теоретический спектр испускания системы $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ (прогрессия $\Delta v = 0$), рассчитанный в однотемпературном приближении. Для описания уширения спектральных линий использован профиль Лоренца с величиной $\alpha = 0.01 \text{ см}^{-1}$.

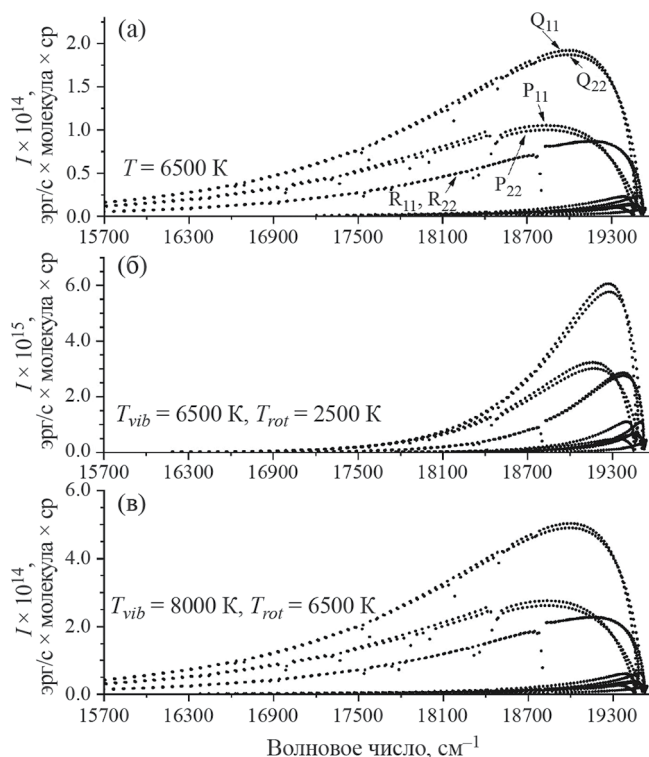


Рис. 4. Абсолютные интенсивности ровибронных переходов красной системы $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ полоса (15,7): а) однотемпературное приближение (2), (3); б, в) двухтемпературное приближение (2), (5).

Для некоторых ровибронных переходов наблюдается отклонение величин абсолютных интенсивностей от гладкого поведения (выделенные области на рис. 2а–в). Эти нарушения связаны с проявлением эффектов неадиабатического поведения в ровибронной структуре [14], абсолютная величина которых растет с ростом вращательного квантового

числа, а значит наиболее заметна при достаточно высоких вращательных температурах (рис. 2а, в).

Спектры $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ -системы радикала CN имеют более сложную структуру: спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению электронного состояния $A^2\Pi$ на компоненты $A^2\Pi_{1/2}$ и $A^2\Pi_{3/2}$ и, следовательно, к удвоению числа вращательных ветвей, по сравнению с $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ -системой. Согласно правилам отбора для $\Pi-\Sigma$ переходов наиболее интенсивными являются Q-ветви. Кроме того, $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ -система не является диагональной, поэтому полосы различных прогрессий (например, $\Delta v = 0$ и $\Delta v = 1$) могут иметь сопоставимую интенсивность.

На рис. 3 представлен результат моделирования сечений испускания $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ -системы в однотемпературном режиме при $T = 6500 \text{ К}$ в области волновых чисел $7700\text{--}9200 \text{ см}^{-1}$, что соответствует прогрессии $\Delta v = 0$. Однако, как видно, в этой же области спектра проявляются и интенсивные переходы прогрессии с $\Delta v = 1$. В отличие от спектра $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ -системы (рис. 1а), в данном случае даже в однотемпературном приближении контуры отдельных колебательных полос не визуализируются, что связано как с усложнением их вращательной структуры, так и с перекрыванием отдельных ровибронных линий.

Для красной системы радикала CN зарегистрированы и идентифицированы многочисленные ровибронные переходы, соответствующие широкому диапазону колебательных и вращательных квантовых чисел. Так, в работе [21] были зарегистрированы спектры 27 полос с $v' = 8\text{--}21$, $v'' = 1\text{--}11$. На рис. 4 представлены результаты моделирования абсолютных интенсивностей испускания вращательных переходов в колебательной полосе (15,7), полученные в однотемпературном (рис. 4а) и двухтемпературном (рис. 4б, в) приближениях. В случае $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ -системы во вращательной структуре присутствует один широкий пик, соответствующий наложению всех интенсивных вращательных ветвей. В область 19500 см^{-1} (начало колебательной полосы, соответствующее ровибронным переходам с малыми значениями вращательных квантовых чисел) попадает и кант полосы, образованный в данном случае R-ветвями. В целом, изменение колебательных и вращательных температур при использовании двухтемпературного приближения приводит, как и в случае $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ -системы, к уменьшению абсолютных интенсивностей, смещению максимума интенсивности в сторону больших значений волновых чисел и сужению пика при уменьшении T_{rot} (рис. 4б). Увеличение T_{vib} несущественно изменяет распределение абсолютных интенсивностей ровибронных переходов. Для данной полосы наблюдается много областей с нарушением адиабатического характера интенсивностей отдельных вращательных линий, которые, скорее всего, сложно

зарегистрировать экспериментально из-за наложения частот различных ровибронных переходов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено моделирование спектров красной и фиолетовой систем радикала CN в одно- и двухтемпературном приближениях. На примере расчета абсолютных интенсивностей линий вращательных ветвей в полосе $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ (0,0) и $A^2\Pi - X^2\Sigma^+$ (15,7) показано, что переход от однотемпературного режима к разделению температур на T_{vib} и T_{rot} приводит как к изменению величин абсолютных интенсивностей ровибронных переходов, так и к изменению контура полос. Благодаря этому, использование двухтемпературного подхода может быть действенным инструментом для оптической диагностики высокотемпературных газоплазменных сред на основании эмиссионных спектров CN в отсутствии локального термодинамического равновесия.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00272.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Grinstead J.H., Wright M.J., Bogdanoff D.W., Allen G.A. // J. Thermophys. Heat Trans. 2009. V. 23(2). P. 249.
2. Panesi M., Magin T., Bourdon A., Bultel A., Chazot O. // Ibid. 2009. V. 23(2). P. 236.
3. Lique F., van der Tak F.F.S., Klos J. et al. // Astron. Astrophys. 2009. V. 493. P. 557.
4. Pezzella M., Yurchenko S., Tennyson J. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2021. V. 23. P. 16390.
5. Jaffe R.L. AIAA 22nd Thermophysics Conference. June 8–10, 1987. Honolulu, Hawaii.
6. Wright S.O.M., Waldmann I., Yurchenko S.N. // Mon. Notices Royal Astron. Soc. 2022. V. 512(2). P. 2911.
7. Harilal S.S., Issac R.C., Bindhu C.V. et al. // Prama-na – J. Phys. 1996. V. 46. P. 145.
8. Abdelli-Messaci S., Kerdja T., Bendib A., Malek S. // Spectrochim. Acta Part B. 2005. V. 60. P. 955.
9. Hornkohl J.O., Parigger C., Lewis J.W.L. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 1991. V. 46(5). P. 405.
10. Uitenbroek H., Tritschler A. // Astron. Astrophys. 2007. V. 462. P. 1157.
11. Ritchey A.M., Federman S.R., Lambert D.L. // Astrophys. J. 2011. V. 728. P. 36.
12. Smith V.V., Hinkle K.H., Cunha K. et al. // Astrophys. J. 2002. V. 124. P. 3241.
13. Leach S. // Mon. Notices Royal Astron. Soc. 2012. V. 421(2). P. 1325.
14. Terashkevich V., Pazyuk E., Stolyarov A., Yurchenko S. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2022. V. 292. P. 108366.
15. Kozlov S.V., Terashkevich V.A., Pazyuk E.A. et al. [To be published] // Mon. Notices Royal Astron. Soc.
16. Bernath P.F. Spectra of Atoms and Molecules. Second edition. Oxford University Press, 2005. 439.
17. Yurchenko S.N., Al-Refaie A.F., Tennyson J. // Astron. Astrophys. V. 2018. V. 614. A131.
18. Hill C., Yurchenko S.N., Tennyson J. // Icarus. 2013. V. 226(2). P. 1673–1677.
19. Syme A.-M., McKemmish L.K. // Mon. Notices Royal Astron. Soc. 2020. V. 499(1). P. 25.
20. Tennyson J., Yurchenko S.N., Al-Refaie A.F. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2020. V. 255. P. 107228.
21. Prasad C.V., Bernath P.F., // J. Mol. Spectrosc. 1992. V. 156. P. 327.