

С.Т. Суржиков || Оптические свойства газов и плазмы

С.Т. Суржиков

КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ ФИЗИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

С.Т. Суржиков

Оптические
свойства
газов и плазмы

Российская академия наук
Институт проблем механики

КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ ФИЗИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Оптические свойства газов и плазмы

Редакционная коллегия:

академик **Д.М. Климов**
академик **А.С. Коротеев**
профессор **С.А. Медин**
профессор **Г.Э. Норман**
член-кор. РАН **Ю.В. Полежаев**
профессор **С.Т. Суржигов**
член-кор. РАН **И.Б. Федоров**
академик **В.Е. Фортгов**
академик **Г.Г. Черный**

Москва
Издательство МГТУ имени Н.Э. Баумана
2004

Российская академия наук
Институт проблем механики

С.Т. Суржиков

Оптические свойства газов и плазмы

Москва
Издательство МГТУ имени Н.Э. Баумана
2004

УДК 533
ББК 22.365
С 90

Отделение энергетики, машиностроения, механики
и процессов управления

Программа фундаментальных исследований

Рецензенты: *д-р физ.-мат. наук, проф. С.А. Лосев,*
д-р физ.-мат. наук, проф. Ю.П. Райзер

Суржиков С.Т.

С 90 Оптические свойства газов и плазмы. – М.: Изд-во МГТУ
им. Н.Э. Баумана, –2004. –576 с.: 230 ил. (Компьютерные
модели физической механики).

ISBN 5-7038-2605-5 (Ч.2)

ISBN 5-7038-2604-7

Рассмотрены методы компьютерного моделирования спектральных и групповых оптических моделей нагретых газов и низкотемпературной плазмы, которые используются в задачах физической механики, радиационной газо- и плазмодинамики, теплообмена излучением, аэрофизики и при создании авиационно-космической техники. Обсуждаются проблемы автоматизации расчета спектральных оптических свойств. Приведены спектральные оптические свойства газовых смесей, представляющих практический интерес для аэрокосмических приложений.

Для научных сотрудников и инженеров в области теплообмена излучением, физической газовой динамики и физики низкотемпературной плазмы, а также для студентов и аспирантов физико-технических специальностей университетов.

УДК 533
ББК 22.365

ISBN 5-7038-2605-5 (Ч.2)

ISBN 5-7038-2604-7

© С.Т. Суржиков, 2004

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	9
Глава 1. Проблемы компьютерного построения оптических моделей	13
1.1. Классификация оптических моделей	14
1.2. Уровни приближения оптических моделей	25
1.3. Номенклатура элементарных радиационных процессов	30
1.4. Коэффициенты поглощения в непрерывном спектре	39
1.4.1. Расчет спектральных коэффициентов поглощения	39
1.4.2. Групповые модели коэффициента поглощения в непрерывном спектре	43
1.4.3. Среднеинтегральные коэффициенты поглощения	49
1.5. Коэффициенты поглощения в спектральных линиях	52
1.5.1. Расчет коэффициентов поглощения в атомных линиях	52
1.5.2. Расчет коэффициентов поглощения в молекулярных линиях	65
1.6. Расчет излучательных способностей в условиях локального термодинамического равновесия	67
Глава 2. Простейшие вычислительные модели элементарных радиационных процессов	72
2.1. Расчет сечений поглощения в непрерывном спектре с участием атомных частиц	72
2.1.1. Приближенные аналитические методы расчета сечений фотоионизация атомов и ионов	73
2.1.2. Полуэмпирическая модель поглощения в непрерывном спектре, обусловленного фотоионизацией и тормозными процессами в поле остаточного иона	84
2.1.3. Методы квантового дефекта	87
2.1.4. Полуэмпирическая модель поглощения в непрерывном спектре при неравновесной заселенности возбужденных состояний атомных частиц	100

2.1.5. Сечение непрерывного поглощения в полях ионов H ⁺ , N ⁺ , O ⁻ и C ⁻	111
2.2. Общие замечания относительно использования различных моделей применительно к расчету спектра непрерывного поглощения.....	112
2.3. Фотоионизация молекул	114
2.4. Фотодиссоциация молекул	117
2.5. Свободно-свободные переходы в полях нейтральных частиц..	118
2.6. Поглощение молекул NO ₂ и C ₃	119
Глава 3. Методы расчета сечений поглощения в электронных полосах двухатомных молекул	121
3.1. Начальные сведения об электронно-колебательно- вращательных спектрах двухатомных молекул	121
3.2. Расчет сил электронных переходов S_e	135
3.3. Расчет вероятностей вращательных переходов. Факторы Хенля – Лондона	139
3.4. Расчет вероятностей колебательных переходов. Факторы Франка – Кондона	141
3.5. Приближенный расчет факторов Франка – Кондона для низколежащих колебательных уровней	141
3.6. Расчет факторов Франка – Кондона для высоколежащих колебательных уровней	142
3.7. Коэффициенты поглощения электронных переходов двухатомных молекул, усредненные по вращательной структуре	143
3.7.1. Интегральные коэффициенты поглощения вращательных линий	145
3.7.2. Модели расчета спектральных коэффициентов поглощения	149
3.8. О необходимости проведения методических вычислительных экспериментов	167
3.9. Базы данных спектральных коэффициентов поглощения двухатомных молекул, усредненных по вращательной структуре	170
3.10. Сечения поглощения двухатомных молекул, усредненные по колебательной структуре	180

Глава 4. Сечения поглощения при колебательно-вращательных переходах в молекулах	182
4.1. Проблемы построения моделей поглощения колебательных полос	182
4.2. «Стандартные» модели поглощения	186
Глава 5. Оптические характеристики конденсированной фазы газовых течений	196
5.1. Проблемы построения оптических моделей конденсированной фазы газовых течений	196
5.2. Влияние фазовых переходов на оптические свойства конденсированной фазы газовых течений	205
Глава 6. Автоматизированный компьютерный расчет параметров атомных линий и процессов фотоионизации	207
6.1. Строение атомных частиц и классификация их спектров	209
6.1.1. Систематика состояний электронов в атомных частицах...	209
6.1.2. Систематика состояний атомных частиц	211
6.1.3. Приближение центрального поля	213
6.1.4. Векторная модель атома	217
6.2. Электронная база данных уровней энергии атомных частиц ..	220
6.2.1. Главная база данных уровней энергии атомных частиц	221
6.2.2. Локальная база данных для расчета сечений фотоионизации	222
6.3. Расчет параметров атомных линий	223
6.3.1. Формирование локальной базы данных термов	224
6.3.2. Расчет радиальных интегралов	224
6.3.3. Сортировка термов по признаку принадлежности спектральной серии	226
6.3.4. Расчет признаков атомных линий	226
6.3.5. Расчет сил мультиплетов	228
6.3.6. Расчет приведенной силы линий компонентов мультиплетов	231
6.3.7. Расчет полуширины компонентов мультиплета	232

6.3.8. Базы данных параметров атомных линий	235
Глава 7. Численные методы решения задач расчета элементарных радиационных характеристик горячих газов	236
7.1. Численные и аналитические решения уравнения Шредингера для нахождения радиальной части волновой функции	237
7.1.1. Аналитическое решение уравнения Шредингера для кулоновского потенциала	238
7.1.2. Численное решение уравнения Шредингера для произвольного потенциала	244
7.2. Решение уравнения Шредингера для определения волновой функции колебательного состояния двухатомной молекулы методом установления	248
Приложение	253
Список литературы	558
Предметный указатель	572

ПРЕДИСЛОВИЕ

Проблема расчета спектральных оптических свойств горячих газов и низкотемпературной плазмы является одной из основополагающих в физической механике и теории тепломассообмена. Решение современных задач аэрофизики, атмосферной оптики и геофизики, теплоэнергетики и термоядерной энергетики будущего, создание новых образцов аэрокосмической техники, космических аппаратов для исследования Земли и планет Солнечной системы немислимо без достоверной информации по радиационным свойствам веществ.

Основополагающие достижения физики элементарных радиационных процессов были достигнуты в середине двадцатого века, в основном, в работах над ядерными и космическими проектами. Созданные в 60-х и 70-х годах расчетно-теоретические модели и базы данных спектральных оптических характеристик нагретых газов и низкотемпературной плазмы (Armstrong В.Н., et al., 1961, Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971) определили на многие годы вперед направления развития теории переноса теплового излучения в самых разнообразных инженерных приложениях, в особенности в указанных выше областях.

Все основные достижения в теории расчета спектральных радиационных свойств горячих газов и плазмы пришлось на начальный период развития вычислительной техники (60-е – 70-е годы), что в значительной степени ограничивало возможности практического применения развитых теорий. Например, упомянутые базы данных спектральных оптических свойств были созданы на твердых носителях и опубликованы в книгах в табличном виде. Лишь некоторые научные группы в области физической газовой динамики имели доступ к указанным базам данных в виде перфокарт.

На рубеже 90-х годов прошлого века произошли революционные изменения в компьютерной технике, в способах хранения и

обработки компьютерной информации, а главное – в способах ее передачи по всему миру без принципиальных ограничений. Попытка анализа возникающих при этом проблем была отражена в одной из работ автора более десяти лет назад (Суржиков С.Т., 1992).

Имеется несколько веских причин в повторном издании подобной книги. За прошедшее десятилетие возникли новые модели и методы расчета спектральных оптических свойств, выполнено большое число работ по анализу и тестированию этих и разработанных ранее спектральных моделей. В практику компьютерных методов исследований вошли методы хранения информации в форме электронных баз данных и новые технологии их передачи. Создание высокопроизводительных вычислительных комплексов, в первую очередь основанных на современных компьютерных технологиях распараллеливания вычислений позволило пересмотреть серьезные ограничения, предъявляемые ранее к расчетным моделям квантовой механики и квазиклассической физики. Те из них, которые ранее невозможно было использовать в задачах физической механики, в настоящее время стали вполне реализуемыми.

Вместе с этим, на повестку дня современной физической механики, вышли новые проблемы создания и исследования компьютерных моделей элементарных радиационных процессов. К ним следует отнести необходимость проведения очень подробных спектральных расчетов (так называемых *line-by-line* расчетов), в которых разрешалась бы не только линейчатая структура атомного спектра, но и вращательная линейчатая структура электронно-колебательных и колебательно-вращательных полос. При этом многократно апробированная вычислительная технология предварительного расчета спектральных оптических свойств с последующим их табулированием и использованием в задачах физической механики становится практически бесполезной (или, по крайней мере, нереализуемой), поскольку наиболее актуальными являются задачи переноса неравновесного излучения. Не утратили актуальность также традиционные задачи теории элементарных радиационных процессов, а именно: повышение достоверности

предсказания их характеристик в так называемых *ab-initio* расчетах. В последнем случае задача предсказания спектральных оптических свойств молекулярных и атомарных газов и плазмы решается исходя из «первичных принципов» квантовой механики и квантовой электродинамики, т.е. без использования каких либо эмпирических данных по вероятностям элементарных квантовых переходов и структуре энергетических уровней атомов и ионов.

Многолетняя работа автора книги в области теории радиационных процессов и переноса спектрального теплового излучения, радиационной газовой динамики и их приложений в аэрокосмической технике, а также опыт преподавания в Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана и в Московском физико-техническом институте, оказал влияние на подбор материала книги и принцип его изложения. Основное внимание сосредоточено на описание достаточно простых моделей прикладной квантовой механики и квазиклассической физики. Здесь пришлось, подчас, прибегать к непростым решениям ограничения изложения моделей достаточно хорошо развитых в физике радиационных процессов в газах и плазме. Однако, по мнению автора, большинство изложенных методов оказывается доступным для широкого круга научных сотрудников и инженеров в области теплообмена излучением, физической газовой динамики и физики низкотемпературной плазмы, а также для студентов и аспирантов физико-технических специальностей университетов. Автор надеется, что и специалисты в области атомной и молекулярной спектроскопии найдут в книге много полезного, по крайней мере, в той ее части, которая касается способов использования методов вычислительной квантовой механики в задачах прикладной физической механики.

Особо следует обратить внимание на обширный графический материал по спектральным коэффициентам поглощения чистых газов и газовых смесей, приведенных в приложении книги. Представленные здесь спектральные и групповые оптические свойства получены с использованием специализированной компьютерной системы. Для проведения указанных расчетов требовалось ввести исходные данные по составу исследуемой смеси

газов хотя бы в одной термодинамической точке, диапазон изменения температур и давлений, а также некоторые параметры расчетной сетки по частоте электромагнитного излучения и дополнительную информацию о требуемой подробности спектральных расчетов. Представленные данные могут представлять практический интерес для анализа особенностей поглощательных и излучательных характеристик атмосферных газов, а также для проведения методических исследований в области создания и совершенствования компьютерных моделей спектральных оптических свойств.

Автор выражает глубокую благодарность академикам Д.М. Климову, Г.Г. Черному, чл.-корр. РАН Ю.В. Полежаеву и профессору С.А. Лосеву за многолетнюю поддержку работ в области создания методов и компьютерных технологий расчета спектральных оптических свойств, применительно к физической механике, радиационной газовой динамике и теории теплообмена излучением.

Автор признателен своим учителям и коллегам А.П. Буднику, В.А. Горелову, В.В. Горскому, А.Ю. Кирееву, Л.А. Кузнецовой, В.М. Николаеву, Ю.А. Пластинину, Ю.П. Райзеру, Б.А. Хмелинину за плодотворную совместную работу.

Автор выражает благодарность сотрудникам издательства МГТУ им. Н.Э. Баумана: директору Т.И. Попенченко и Г.А. Ниловой, внесшим большой вклад в создании этой книги. Особенно, автор благодарит Т.А. Суржикову, выполнившую компьютерную верстку и макетирование книги.

ГЛАВА 1

ПРОБЛЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ПОСТРОЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

При решении задач физической газовой динамики, радиационного и сложного теплообмена в газах и низкотемпературной плазме всегда приходится использовать те или иные модели переноса теплового излучения, составными элементами которых являются модели оптических свойств среды и радиационного переноса. Для того чтобы создать модель оптических свойств смесей газов и низкотемпературной плазмы сложного химического состава, необходимо иметь возможность определить состав смеси в каждой точке исследуемого объема, установить закон распределения частиц по возбужденным энергетическим состояниям (сформулировать термодинамическую модель среды), принять во внимание многообразие элементарных радиационных процессов, протекающих с участием каждой из частиц смеси, и определить вклад каждого из этих процессов в суммарное поглощение или испускание данного элементарного физического объема в выделенном спектральном диапазоне. Столь большое разнообразие задач делает проблему построения оптических моделей нагретых газов и низкотемпературной плазмы сложной многофакторной задачей.

В настоящее время в нашей стране и за рубежом особое внимание уделяется проблеме компьютерного построения оптических моделей смесей газов и плазмы, предназначенных для решения задач физической газовой динамики, и основанных на использовании квантово-механических и квазиклассических моделей элементарных радиационных процессов, учитываемых в таких моделях. Очевидно, что здесь кроется основное противоречие об-

суждаемой проблемы. С одной стороны, расчетные модели должны быть универсальными и теоретически обоснованными, чтобы можно было создавать оптические модели любой сложности для произвольных смесей газов и плазмы. С другой стороны, подробность описания спектральных оптических свойств должна быть адекватна решаемой задаче радиационного и сложного теплообмена, где не всегда требуется высокое спектральное разрешение.

1.1. Классификация оптических моделей

Основа теории и практики создания спектральных оптических моделей для радиационной газодинамики была заложена более 40 лет назад (Armstrong В.Н., et al., 1961; Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971). Эти модели широко используются в научных исследованиях (в первую очередь в аэрофизике) до настоящего времени. С использованием указанных моделей не только решено большое число задач в самых разнообразных областях физической газовой динамики, радиационной газо- и плазмодинамики, но также создана целая иерархия оптических моделей сред, куда входят простейшие эмпирические соотношения (Амбарцумян В.А. и др., 1952; Зельдович Я.Б. и др., 1966), упрощенные, но, в тоже самое время исключительно эффективные компьютерные модели оптических свойств, ориентированные на использование в задачах динамики излучающего газа (Стулов В.П., 1973; Стулов В.П. и др., 1995; Park Ch., 1990; Суржиков С.Т., 1992), а также достаточно сложные квантовомеханические и квантостатистические модели (Surzhikov S.T., 2000; Никифоров А.Ф. и др., 2000; Laux С.О.,1993). Повышение интереса к компьютерным методам создания оптических моделей сред связано не только с интенсивным развитием информационно-компьютерных технологий решения прикладных задач и неуклонным ростом мощности самих компьютеров, но также и с применением новых подходов к обработке информации. За последнее время произошел качественный скачок в способах обработки обширной информации, что всегда являлось критическим для обсуждаемой проблемы. Специалисты ведущих научных групп мира

в этой области знаний сходятся во мнении, что центральными проблемами сегодняшнего дня являются верификация и оптимизация используемых вычислительных моделей элементарных радиационных процессов, высококвалифицированная экспертная оценка исходной спектроскопической информации, а также систематизация компьютерных моделей, число которых быстро увеличивается с каждым годом.

Среди радиационных моделей простейшими являются приближения оптически тонкой и оптически толстой сред. Однако даже в этих случаях необходимо иметь в распоряжении интегральные по Планку или Росселанду коэффициенты поглощения, что для смесей газов произвольного химического состава является весьма трудоемкой задачей.

Если приближения оптически тонкой и оптически толстой сред использовать нельзя, что бывает в большинстве случаев, представляющих практический интерес для теории физической газовой динамики и сложного теплообмена, необходимо создавать адекватные исследуемому явлению оптические модели среды и соответствующие модели переноса теплового излучения (Суржиков С.Т., 2004 (б)). Разнообразие решаемых на практике задач определяет разнообразие моделей, которые можно сформулировать.

При построении компьютерных оптических моделей теории физической газодинамики, радиационного и сложного теплообмена удобно использовать следующую классификацию, предложенную в работе (Суржиков С.Т., 2004 (б)).

Оптической моделью среды называется совокупность спектральных, квазиспектральных, групповых и (или) комбинированных моделей спектральной зависимости коэффициента поглощения $\kappa_{\omega}(T, \varphi)$ (или коэффициента испускания), представленных в графической, табличной, аналитической формах или в виде компьютерной программы, позволяющей получить требуемое число по вводимым параметрам ω, T, φ . Здесь ω – волновое число излучения (используются также длина волны излучения λ и частота излучения ν); T – температура; φ – набор параметров, определяющих химический состав смеси газов (плотность или давление при исходном элементном составе и температуре, набор концен-

траций химических компонентов). При построении радиационных моделей неравновесных сред под температурой T следует понимать набор эффективных температур, а в набор параметров φ могут входить заселенности отдельных энергетических состояний атомных и молекулярных частиц.

Спектральная модель коэффициента поглощения – функция, построенная с учетом непрерывной и линейчатой структуры спектра без каких-либо усредняющих процедур. Пример спектральной модели показан на рис. 1.1.

Групповая модель $\kappa_{\Delta\omega}(T, \varphi)$ – совокупность значений коэффициентов поглощения, усредненных в пределах спектральных диапазонов $\Delta\omega$, где указанные функции считаются независимыми от волнового числа. На рис. 1.2 показан пример групповой модели коэффициентов поглощения смеси газов N_2 , O_2 , H_2O , CO_2 , Ar . В данном случае усреднение спектральных коэффициентов поглощения производилось в пределах ста спектральных групп.

При любом графическом или табличном представлении спектральной модели всегда используется групповая модель или дается процедура интерполяции по волновому числу между узловыми значениями. В практике решения задач радиационного переноса, как правило, используются групповые модели, основанные на квазиспектральных моделях.

Квазиспектральная модель – это такая модель, при получении которой использовалась та или иная процедура усреднения по тонкой (линейчатой) структуре спектра. Например, коэффициент поглощения в электронных спектрах двухатомных молекул обычно усредняют по вращательной структуре (рис. 1.3; полный спектральный диапазон $\Delta\Omega = 10000 \div 30000 \text{ см}^{-1}$, а диапазон усреднения – $\Delta\omega = 50 \text{ см}^{-1}$). Для сравнения, на рис. 1.4 представлена вращательная структура спектра поглощения узкого спектрального участка. В этом случае полный спектральный диапазон полагается $\Delta\Omega = 20100 \div 20200 \text{ см}^{-1}$, а диапазон усреднения $\Delta\omega = 0.01 \text{ см}^{-1}$. Хорошо видно, что при усреднении исчезает осцилляционная структура спектра на масштабах характерных для поперечных размеров вращательных линий, но зависимость от волнового числа на масштабах, характерных для колебательных полос спектра остается.

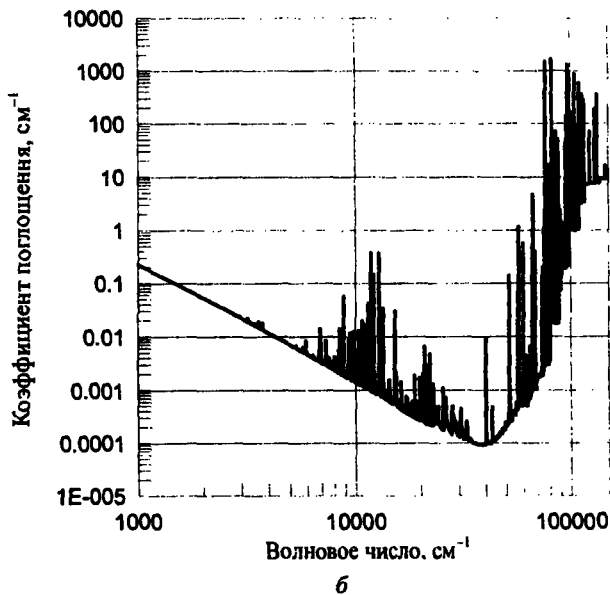
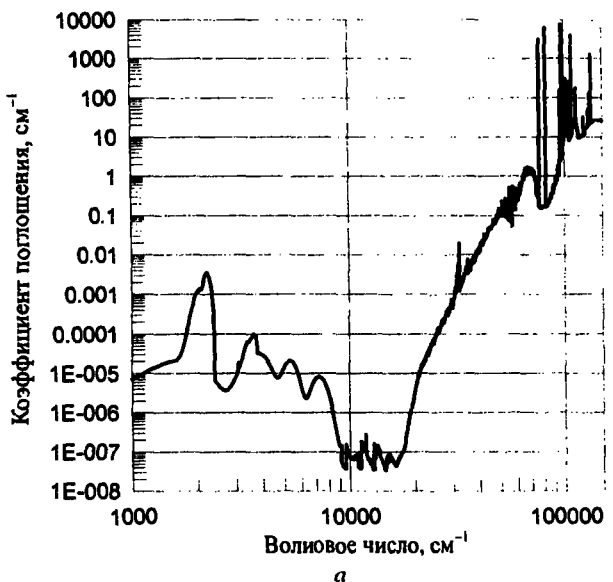


Рис. 1.1. Спектральный коэффициент поглощения смеси газов $\text{N}_2(50\%)$, $\text{O}_2(39\%)$, $\text{H}_2\text{O}(5\%)$, $\text{CO}_2(5\%)$, $\text{Ar}(1\%)$: а – при $T = 4000\text{ К}$ и $p = 1\text{ атм}$; б – при $T = 10000\text{ К}$ и $p = 1\text{ атм}$

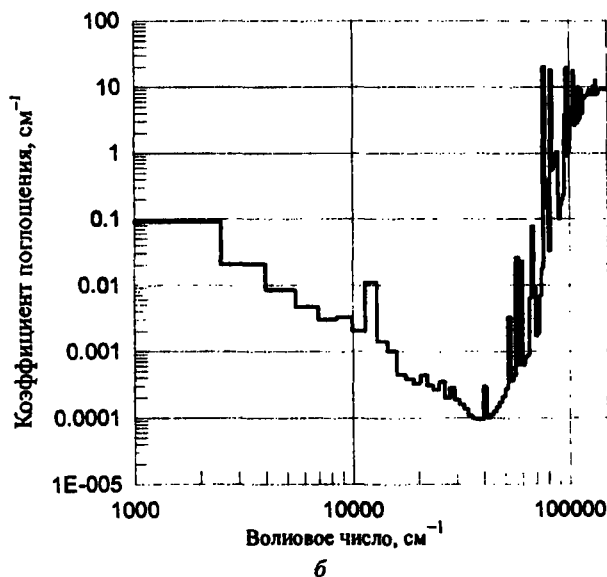
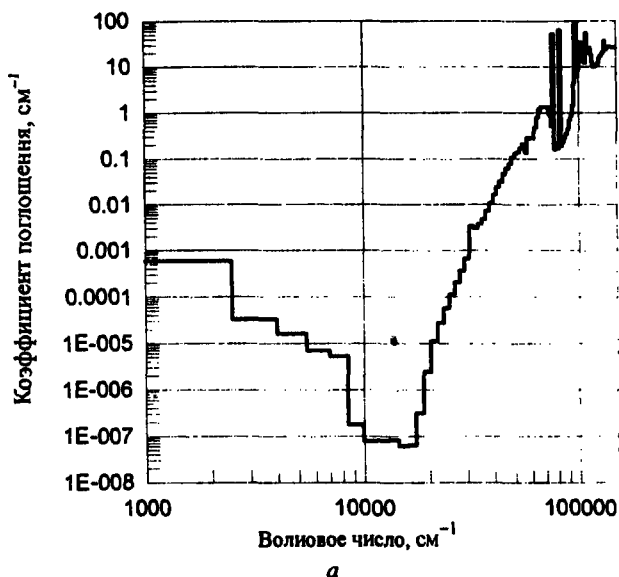


Рис. 1.2. Групповой коэффициент поглощения (100 групп) смеси газов N_2 (50%), O_2 (39%), H_2O (5%), CO_2 (5%), Ar (1%): *a* – при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм; *b* – при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

Очевидно, что шаг усреднения $\Delta\omega$ в квазинепрерывной модели должен заметно превосходить характерное значение полуширины линии $\gamma \sim 0.1 \div 1 \text{ см}^{-1}$, что в задачах радиационной газовой динамики обычно выполняется с большим запасом, так как при числе участков усреднения от 2–10 (простейшая групповая модель) до ~ 1000 (многогрупповая модель) в полном спектральном диапазоне $\Delta\Omega = 1000 \div 250000 \text{ см}^{-1}$ средний размер спектральной группы составляет $\sim 200 \div 10000 \text{ см}^{-1}$.

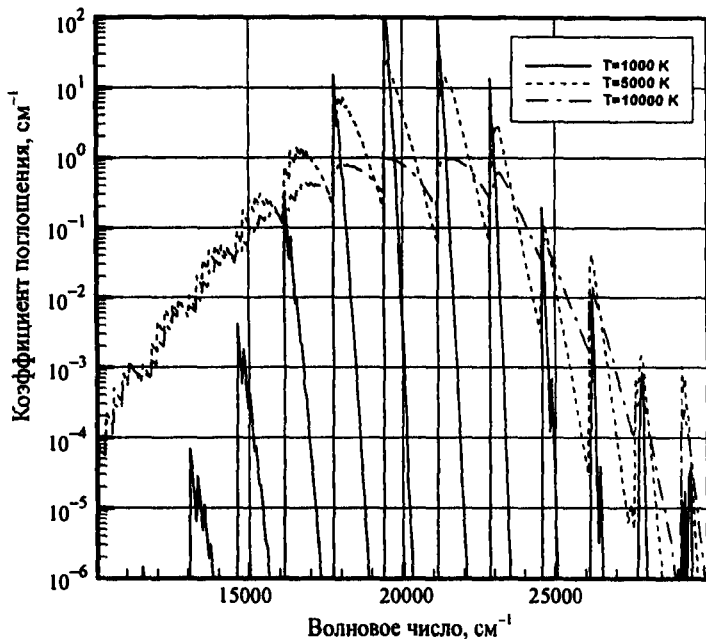


Рис. 1.3. Спектральный коэффициент поглощения, усредненный по вращательной структуре. Молекула C_2 , переход $d^3\Pi_g - a^2\Pi_u$ (система Свана)

Комбинированная оптическая модель — это модель линейчатого поглощения (атомного или молекулярного спектра) на фоне непрерывного или усредненного спектра (как правило, атомные линии на фоне групповой модели). Пример комбинированной модели показан на рис. 1.1.

Все перечисленные типы оптических моделей одинаково формулируются как в отношении спектральных коэффициентов поглощения, так и испускания. Связь между этими коэффициен-

тами проще всего устанавливается при локальном термодинамическом равновесии (ЛТР), когда термодинамическое состояние среды определяется единой температурой для всех частиц и их внутренних степеней свободы (см. также п. 1.6).

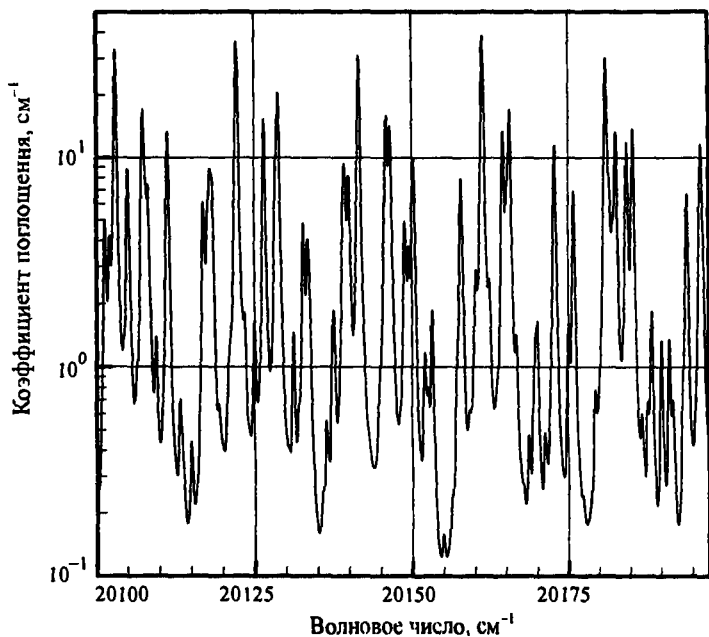


Рис. 1.4. Вращательный спектр коэффициента поглощения при $T = 10000$ К. Молекула C_2 , переход $d^3\Pi_g - a^2\Pi_u$ (система Свана)

При построении спектральных оптических моделей среды (коэффициентов поглощения и испускания) для неравновесных условий в целом можно использовать аналогичную классификацию, однако следует иметь в виду, что неотъемлемой составной частью таких моделей является кинетическая модель заселенностей возбужденных состояний атомных и молекулярных частиц. Проблемы, связанные с созданием оптических моделей неравновесных сред, обсуждаются в работе (Биберман Л.М. и др., 1982). Среди универсальных компьютерных реализаций оптических моделей неравновесных сред можно отметить программу Ч. Парка NEQAIR (Park Ch., 1990).

При решении задач лучистого переноса проблема построения оптической модели среды является лишь промежуточным этапом. Далее эту модель необходимо использовать при решении уравнения переноса с целью определения требуемых радиационных характеристик (интенсивности излучения, плотностей лучистых потоков и их дивергенций, излучательных и поглощательных способностей объемов и т.п.). При этом не всякая оптическая модель является приемлемой или реализуемой, что вызывает необходимость создания радиационной модели среды.

Радиационная модель среды – это совокупность оптической модели среды и модели радиационного переноса, позволяющая оптимальным образом решить задачу нахождения требуемых радиационных характеристик. Практическая трудность проблемы создания радиационной модели среды состоит в том, что невозможно формально сочетать любую оптическую модель с любым методом расчета переноса излучения. Приходится согласовывать эти модели со значительной вероятностью их модификации.

Наиболее простым способом компьютерного построения радиационных моделей сред в настоящее время является алгоритм пробных решений.

С использованием оптической модели можно рассчитать интегральные характеристики радиационного переноса, которые также широко используются в задачах радиационной газовой динамики. Перечислим основные интегральные характеристики:

1) среднепланковский коэффициент поглощения

$$\kappa_p = \frac{\int \kappa_\omega J_{b,\omega} d\omega}{\int J_{b,\omega} d\omega}, \quad (1.1)$$

где $J_{b,\omega}$ – спектральная функция Планка;

2) среднеросселандовский коэффициент поглощения

$$\kappa_R^{-1} = \frac{\int \kappa_\omega^{-1} (dJ_{b,\omega}/dT) d\omega}{\int (dJ_{b,\omega}/dT) d\omega}, \quad (1.2)$$

где T – температура;

3) среднеросселандовская длина свободного пробега фотонов

$$L_R = \frac{\pi}{4\tilde{\sigma}T^3} \int_0^{\infty} \frac{1}{\kappa_{\omega}} \frac{\partial J_{b,\omega}}{\partial T} d\omega, \quad (1.3)$$

где $\tilde{\sigma} = 5.67 \times 10^{-12}$ Вт/(см²·К⁴) – постоянная Стефана – Больцмана;

4) интегральная излучательная способность

$$Q_{em} = 4\kappa_p \tilde{\sigma} T^4; \quad (1.4)$$

5) коэффициент радиационной теплопроводности

$$\lambda_R = \frac{16}{3} \frac{1}{\kappa_R} \tilde{\sigma} T^3, \quad \kappa_R = \frac{1}{L_R}. \quad (1.5)$$

Используя аналогичные формулы, можно рассчитать соответствующие групповые функции, например, групповые средне-планковский и среднеросселандовский коэффициенты поглощения:

$$\kappa_{p,\Delta\omega} = \frac{\int \kappa_{\omega} J_{b,\omega} d\omega}{\int J_{b,\omega} d\omega}, \quad \kappa_{R,\Delta\omega}^{-1} = \frac{\int \kappa_{\omega}^{-1} (dJ_{b,\omega}/dT) d\omega}{\int (dJ_{b,\omega}/dT) d\omega}. \quad (1.6)$$

Это часто приходится делать по той причине, что в большинстве практически интересных расчетных случаев излучающие объемы газа являются оптически тонкими в одних спектральных диапазонах (как правило, в отдельных диапазонах видимой и инфракрасной областей спектра) и оптически толстыми – в других (как правило, в ультрафиолетовой части спектра).

Примеры расчетов указанных интегральных характеристик для смеси газов N₂ (77%), O₂ (22%) и Ar (1%) при разных давлениях представлены на рис. 1.5 – 1.8.

В заключение отметим, что везде в дальнейшем, кроме особо оговариваемых случаев, интегрирование по волновому числу в бесконечных пределах на практике выполняется в *полной спектральной области*, которая для задач, рассматриваемых в данной книге, составляет $\Delta\Omega = 1000 \div 250000$ см⁻¹.

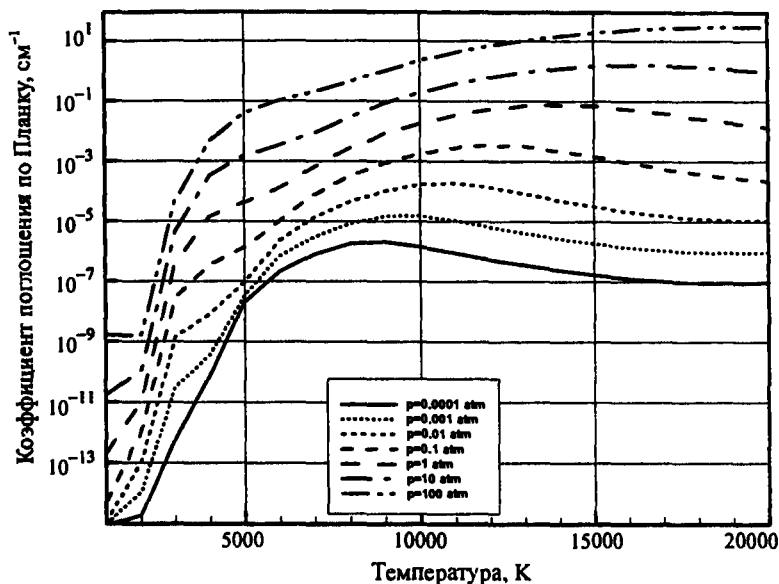


Рис. 1.5. Среднепланковский коэффициент поглощения смеси газов N_2 (77%), O_2 (22%) и Ar (1%)

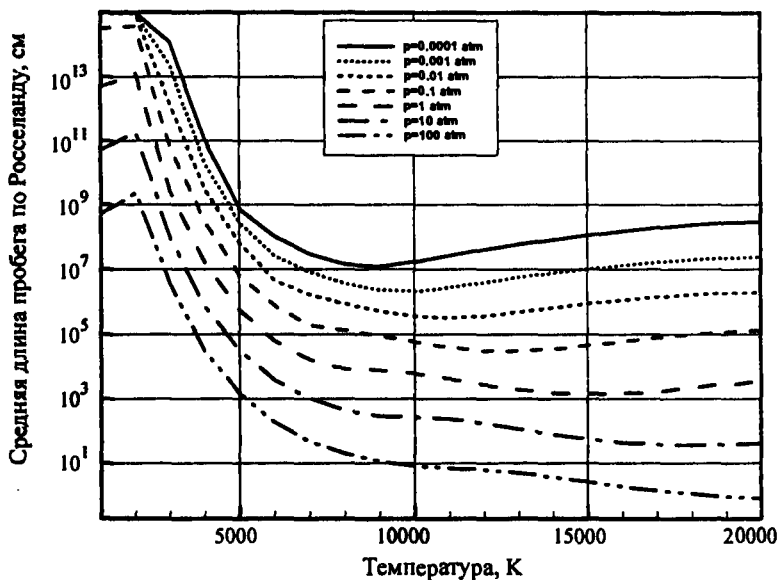


Рис. 1.6. Среднеросселандовская длина свободного пробега смеси газов N_2 (77%), O_2 (22%) и Ar (1%)

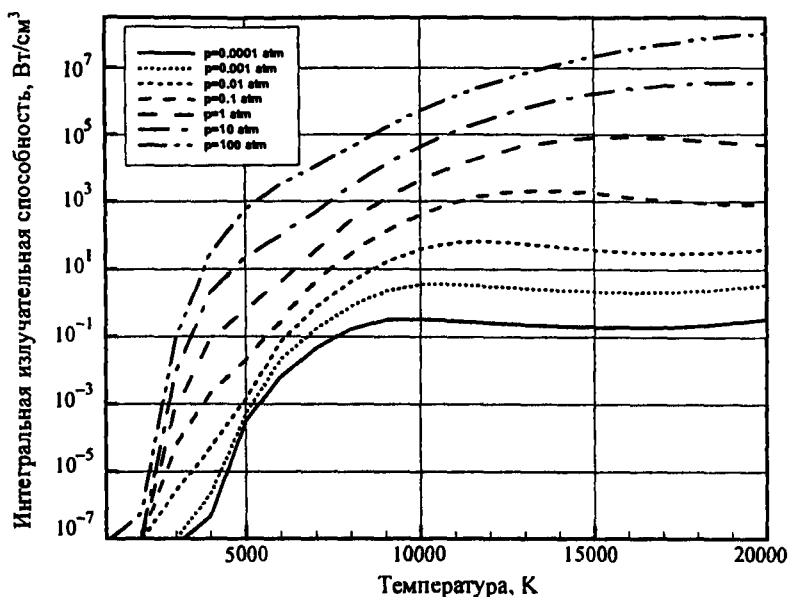


Рис. 1.7. Интегральная излучательная способность смеси газов N₂ (77%), O₂ (22%) и Ar (1%)

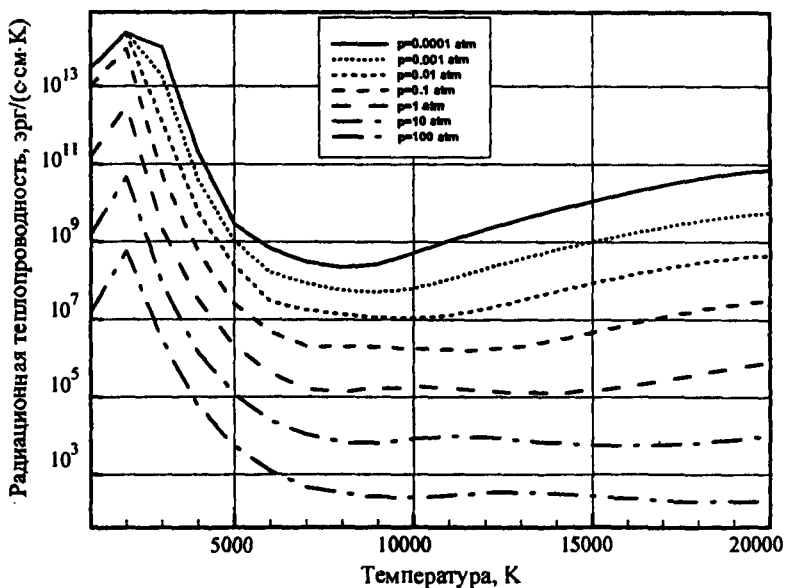


Рис. 1.8. Радиационная теплопроводность смеси газов N₂ (77%), O₂ (22%) и Ar (1%)

1.2. Уровни приближения оптических моделей

В процессе компьютерного создания оптических моделей решаются задачи не только предметного характера, т.е. непосредственно связанные с расчетом характеристик элементарных радиационных процессов, но в значительной степени – информационного и системного характера.

Информационные проблемы состоят в первую очередь в необходимости обработки больших объемов разнородной информации, получаемых даже для одного фиксированного радиационного процесса, и связанные с этим задачи ее интерпретации и хранения. Объемы обрабатываемой информации многократно возрастают при компьютерном анализе радиационных характеристик плазмы сложного химического состава. На информационном уровне решаются также задачи формирования номенклатуры радиационных процессов, которые необходимо учитывать при физических условиях, определенных в исходных данных. И, наконец, к проблемам информационного характера следует отнести выбор адекватных физических и математических моделей, описывающих каждый из учитываемых радиационных процессов.

Проблемы системного характера непосредственно связаны с компьютерной реализацией задач предметного и информационного характера на данном типе компьютера в фиксированной операционной среде. Вопросы системного программного обеспечения не будут анализироваться в данной книге.

При создании оптических моделей нагретых газов и плазмы с использованием компьютерных кодов необходимо учитывать специфику спектральных оптических свойств. Известно, что функции, описывающие спектральные свойства газов и плазмы, характеризуются сильной немонотонностью, а в некоторых областях спектра, и разрывами первого рода. Причем местоположение и размеры указанных немонотонностей и разрывов могут меняться в зависимости от локальных условий в низкотемпературной плазме. Поэтому даже в простейшем случае построения оптической модели среды с фиксированным элементным составом (например, $N_2(77\%) - O_2(22\%)$, $CO_2(97\%) - N_2(3\%)$, $H_2(87\%) - He(13\%)$, и

т.п.) в условиях локального термодинамического равновесия необходимо создавать многогрупповые модели, содержащие спектральную информацию в нескольких сотнях энергетических групп (спектральных диапазонах). Примером таких оптических моделей являются таблицы (Авилова И.В., 1970; Каменщиков В.А., 1971; Суржиков С.Т., 2004 (а)), где представлены многогрупповые модели коэффициента поглощения воздуха в диапазоне температур $T = 2000 \div 20000$ К. Спектральный коэффициент поглощения горячего воздуха, рассчитанный в работе (Авилова И.В. и др., 1970) показан на рис. 1.9, а в работе (Каменщиков В.А. и др., 1971) – на рис. 1.10.

Однако даже незначительное усложнение задачи создания оптической модели, состоящее, например, в переходе к химически равновесным смесям газов произвольного состава, а тем более – к рассмотрению химически неравновесных газовых смесей, делает подход табулирования оптических характеристик практически неприемлемым.

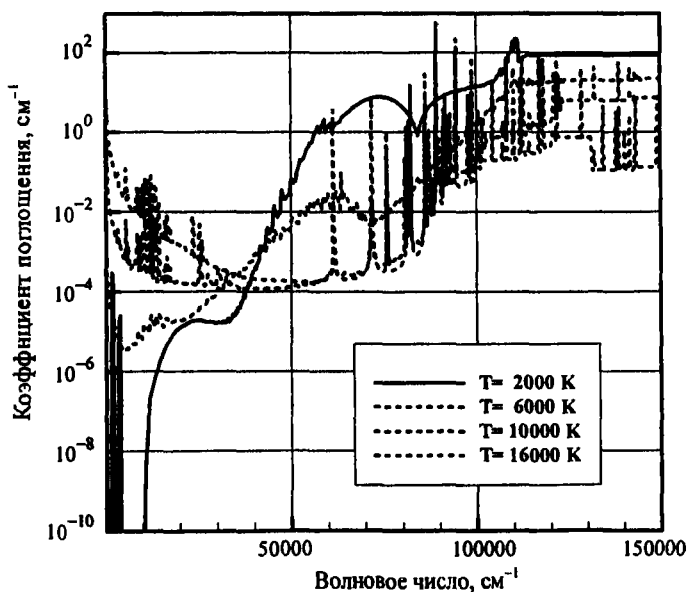


Рис. 1.9. Спектрально-групповой коэффициент поглощения высокотемпературного воздуха (Авилова И.В. и др., 1970)

Вместе с тем, хорошо известно, что для решения широкого круга задач физической механики и радиационной газовой динамики нет необходимости в использовании очень подробных спектральных оптических моделей. В работах (Бронин С.Я. и др., 1976; Олстэд В., 1971) показано, что задачи расчета лучисто-конвективного нагрева поверхности космических аппаратов, входящих в атмосферу Земли с 1-й или 2-й космической скоростями успешно могут быть решены с использованием 7- групповой оптической модели. В расчетах лазерных волн горения (Суржиков С.Т., 1990; Conrad R., et al., 1996) успешно использовалась 10-групповая оптическая модель, а в расчетах динамики огневых шаров (Surzhikov S.T., et al., 1996; Суржиков С.Т., 1997) – 18-групповая оптическая модель.

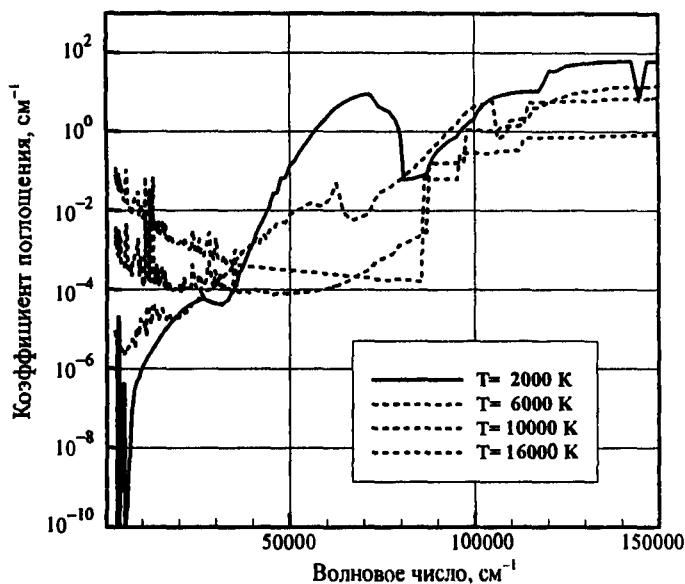


Рис. 1.10. Спектрально-групповой коэффициент поглощения высокотемпературного воздуха (Каменщиков В.А и др., 1971)

Учет особенностей каждой конкретной задачи составляет основную проблему построения оптимальных оптических моделей, т.е. таких моделей, которые достаточно корректно описывают оптические характеристики среды при минимальном количестве

спектральных диапазонов. Оптимальную спектральную модель нельзя построить, пользуясь только сведениями более подробной оптической модели. Это можно сделать только с учетом реального распределения температуры и концентраций в исследуемых газовых объемах, поскольку важное значение имеет поведение излучательной способности элементарных физических объемов.

Обычно процедура построения оптимальных оптических моделей горячих газов и низкотемпературной плазмы состоит из двух этапов. Сначала создается подробная оптическая модель спектральных коэффициентов, а затем, с целью решения заданного класса задач теплообмена излучением или динамики излучающего газа, эта модель упрощается. Целесообразным представляется подход, в соответствии с которым уже на этапе расчета сечений элементарных радиационных процессов отдельных компонентов смеси газов (атомов, молекул, ионов) учитываются требования, предъявляемые к конечной спектральной модели. При этом разумное и контролируемое физическое осреднение функций некоторого процесса является более предпочтительным, чем формальное осреднение суммарной функции по всем процессам. На этом пути возникают две проблемы. Первая – это проблема пробных решений, т.е. необходимости быстро и с минимальными дополнительными затратами получать решение задачи с использованием любой альтернативной концепции построения приближенной модели. Другими словами, необходимо иметь возможность получения пробных решений по относительно простым и экономичным алгоритмам. Вторая проблема – это задача нахождения метода расчета, наиболее полно удовлетворяющего требованиям оптимальности для определенной физической задачи. Так как понятие оптимальности определяется решаемой задачей, которых может быть множество, то всегда желательно иметь возможность выбора среди известного набора методов. Решение последней проблемы представляет также большой интерес в методическом плане, поскольку позволяет тестировать различные методы.

Большие возможности на указанном пути представляет разработка универсальных расчетных кодов, предназначенных для проведения расчетов оптических характеристик и построения оп-

тимальных спектральных моделей, в которых функции хранения, обработки и выдачи в удобном виде всей необходимой информации взяла бы на себя ЭВМ. Основная роль пользователя (физика, химика или инженера) свелась бы к выполнению экспертных оценок получаемых результатов. Очевидно, что помимо библиотек программных модулей, в которых реализованы различные физические модели и методы, баз данных, где хранится исходная спектроскопическая информация, промежуточная вспомогательная информация и конечные результаты расчетов, такие компьютерные коды должны содержать в себе библиотеки программных модулей с программными реализациями прообразов тех реальных физических задач, в которых будут использоваться спектральные модели.

Используемые расчетные методы и реализующие их программные коды целесообразно классифицировать по используемым *уровням приближений*. Уровень приближения может обозначаться признаком, принимающим целочисленные значения 0, 1, 2, ..., и указывающим на тот или иной расчетный метод. Метод нулевого уровня приближения является наиболее экономичным при проведении серийных расчетов. Соответствующий программный код нулевого уровня приближения должен позволять получать результат за 1 + 5 с. Как правило, такой расчетный код является наиболее простым. То, что алгоритмы нулевого уровня приближения являются наиболее простыми, не означает, что они дают наименее точные результаты. Часто простая эмпирическая формула, применяемая в контролируемых условиях, может давать существенно более точные результаты, чем сложный расчетно-теоретический подход. Для упрощения проведения методических исследований в универсальных расчетных кодах должен быть предусмотрен простой механизм изменения уровня приближения для любого программного модуля.

Кроме проблемы экономичности необходимо учитывать то, что модули различного уровня приближения используют для своей работы разное количество исходной информации. Целесообразно, чтобы метод нулевого уровня приближения требовал бы минимального количества информации.

Методы и алгоритмы расчета оптических свойств газов и плазмы, которые могут быть использованы при разработке компьютерных кодов различного уровня приближения, представлены в последующих главах книги. Особо обратим внимание на то, что выбор указанных методов определялся целесообразностью их использования при решении задач физической газовой динамики, радиационной газо- и плазмодинамики, сложного теплообмена.

1.3. Номенклатура элементарных радиационных процессов

Классификация элементарных радиационных процессов представлена ниже. Связанно-связанные переходы в атомах и молекулах (для краткости далее будем использовать понятие «частица», объединяющее атомы, молекулы и их ионы) приводят к образованию линейчатого спектра.

Классификатор моделей элементарных радиационных процессов

1. Модели связанно-связанных ($b-b$) элементарных радиационных процессов
 - 1.1. Модели вероятностей связанно-связанных переходов в атомах и ионах
 - 1.2. Модели вероятностей связанно-связанных переходов в молекулах и молекулярных ионах
 - 1.2.1. Модели разделения различных типов переходов (электронных, колебательных и вращательных)
 - 1.2.2. Модели вероятностей электронных переходов
 - 1.2.3. Модели вероятностей колебательных переходов
 - 1.2.4. Модели вероятностей вращательных переходов
 - 1.2.5. Модели вероятностей, учитывающие взаимные влияния различных типов переходов
2. Модели связанно-свободных ($b-f$) и свободно-связанных ($f-b$) элементарных радиационных процессов
 - 2.1. Модели фотоионизации атомов и ионов с дискретных энергетических состояний
 - 2.1.1. Модели фотоионизации водородоподобных атомов и ионов
 - 2.1.2. Модели фотоионизации неводородоподобных атомов и ионов
 - 2.1.2.1. Модели фотоионизации с основных состояний
 - 2.1.2.2. Модели фотоионизации с возбужденных состояний
 - 2.1.3. Модели фотоотрыва от отрицательных ионов

- 2.2. Модели фотоионизации молекул
- 2.3. Модели фотодиссоциации молекул
3. Модели свободно-свободных переходов ($f-f$)
 - 3.1. Модели тормозного излучения (поглощения) электронов в полях нейтральных частиц
 - 3.2. Модели тормозного излучения (поглощения) в полях ионов
4. Модели неидентифицированных радиационных процессов
5. Модели элементарных радиационных процессов при участии конденсированной фазы газовых течений
6. Модели волновых функций дискретных и непрерывных энергетических состояний атомов, молекул и их ионов
7. Модели потенциалов взаимодействия ядер двухатомных молекул

Особенностью спектра молекулярных линий является их большое число, измеряемое тысячами и десятками тысяч линий, наличие нескольких масштабов нерегулярностей, связанных с колебательной и вращательной структурой полос, сильная зависимость местоположения от типа перехода (вращательный, колебательно-вращательный, электронно-колебательно-вращательный переходы).

Спектр атомных линий характеризуется сериями спектральных линий и наличием мультиплетной структуры. Серии атомных линий сходятся к соответствующим порогам фотоионизации, так, что вблизи них происходит перекрытие линий, и пороги как бы сдвигаются в сторону длинноволнового спектра.

Связанно-связанные переходы в частицах происходят с изменением их внутренней энергии и не приводят к образованию или присоединению свободных электронов. Такой процесс условно изображается в виде формулы

$$A_m + \hbar \nu_{mn} = A_n, \quad (1.7)$$

где A_m – частица в нижнем энергетическом состоянии; A_n – в верхнем; \hbar – постоянная Планка; ν_{mn} – частота кванта энергии.

Связанно-свободные переходы происходят при фотоионизации атомов и молекул, фотодиссоциации молекул, фотоотрыве. Эти процессы приводят к образованию непрерывного спектра поглощения с резкими скачками при частотах излучения, соответст-

вующих порогам процессов. Связанно-свободные переходы приводят к образованию новых частиц: свободных электронов при фотоионизации и фотоотрыве и атомов при фотодиссоциации молекул. Условные формулы процессов имеют вид

$$A + \hbar\nu \rightarrow A^+ + e, \quad M + \hbar\nu \rightarrow A_1 + A_2, \quad A^- + \hbar\nu \rightarrow A + e. \quad (1.8)$$

Свободно-связанные переходы приводят к образованию непрерывного спектра испускания с резкими скачками на энергетических порогах процессов. Эти процессы происходят при столкновении электронов с частицами, а также при столкновениях частиц и образовании (ассоциации) молекул:

$$A^+ + e \rightarrow A + \hbar\nu, \quad A + e \rightarrow A^- + \hbar\nu, \quad A + B \rightarrow AB + \hbar\nu. \quad (1.9)$$

Свободно-свободные переходы характеризуются непрерывным спектром поглощения или испускания. Эти процессы происходят при взаимодействии свободных электронов с частицами:

$$A + e'' \leftrightarrow A + e' + \hbar\nu, \quad (1.10)$$

причем, кинетическая энергия электрона до столкновения e'' больше кинетической энергии электрона после столкновения e' .

В литературе приняты сокращенные обозначения типов состояний с использованием двух латинских букв: связанное состояние обозначается буквой b , а свободное – буквой f . Эти обозначения происходят от написания слов *bound* и *free*. Поэтому типы переходов обозначают: $f-f$ – свободно-свободные, $b-b$ – связанно-связанные, $b-f$ – связанно-свободные и $f-b$ – свободно-связанные. Эти же обозначения удобно использовать в идентификаторах имен подпрограмм, реализующих расчет соответствующих элементарных радиационных процессов.

Например, при создании оптической модели низкотемпературной плазмы заданного химического состава компьютерный код должен выполнить следующие действия:

- сформировать список имен химических компонентов, входящих в состав плазмы;
- сформировать список имен радиационных процессов, протекающих с участием каждой из компонент смеси;

- рассчитать спектральную зависимость сечений поглощения для каждого радиационного процесса. При этом будут использоваться лишь вполне определенные расчетные подпрограммы из имеющегося набора альтернативных подпрограмм;
- рассчитать суммарный спектральный коэффициент поглощения.

В табл. 1.1 представлен пример информационного описания учитываемых электронных полос двухатомных молекул. Первая колонка задает порядковый номер электронной полосы. Колонки 2 – 5 содержат идентификатор электронной полосы, имя молекулы, спектроскопическое обозначение электронного перехода и имя электронной полосы.

Таблица 1.1

**Компьютерное представление параметров электронных полос
двухатомных молекул**

N	Идентификатор	Молекула	Электронный переход	Имя полосы	Спектральный диапазон, $\Delta\omega$, см^{-1}
1	N21P	N_2	$\text{B}^3\Pi - \text{A}^3\Sigma$	First positive	13000+20000
2	N22P	N_2	$\text{C}^3\Pi - \text{B}^3\Pi$	Second positive	20000+36000
3	N2BX1	N_2	$\text{b}^1\Sigma_u^+ - \text{X}^1\Sigma_g^+$	Birge – Hopfield 1	21300+120500
4	N2LBX	N_2	$\text{a}^1\Pi_g - \text{X}^1\Sigma_g^+$	Lyman – Birge – Hopfield	38000+92000
5	N2BX2	N_2	$\text{b}^1\Pi_u - \text{X}^1\Sigma_g^+$	Birge – Hopfield 2	55000+120000
6	O2SR	O_2	$\text{B}^3\Sigma_u^+ - \text{X}^3\Sigma_g^-$	Schumann – Runge	22000+57200
7	NOBET	NO	$\text{B}^2\Sigma - \text{X}^2\Pi$	β	22000+59000
8	NOGAM	NO	$\text{A}^2\Sigma - \text{X}^2\Pi$	γ	33000+54000
9	NODEL	NO	$\text{C}^2\Pi - \text{X}^2\Pi$	δ	47000+55000
10	NOEPS	NO	$\text{D}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Pi$	ϵ	52000+60000
11	NOST	NO	$\text{B}^2\Delta - \text{X}^2\Pi_r$	β'	55000+80000
12	N2PM	N_2^+	$\text{A}^2\Pi - \text{X}^2\Sigma$	Meinel's Auroral	2000+20000
13	N2P1M	N_2^+	$\text{B}^2\Sigma - \text{X}^2\Sigma$	First negative	19000+33000
14	C2SVA	C_2	$\text{d}^3\Pi - \text{a}^3\Pi$	Swan	14000+23000

Окончание табл. 1.1

N	Идентификатор	Молекула	Электронный переход	Имя полосы	Спектральный диапазон, $\Delta\omega$, см^{-1}
15	C2MAL	C ₂	$D^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$	Mulliken	40000+50000
16	C2DEA	C ₂	$e^1\Pi_g - A^1\Pi_u$	Deslandres - D'Azambuja	22000+30000
17	C2FOG	C ₂	$e^3\Pi_g - a^3\Pi_u$	Fox - Herzberg	22000+40000
18	C2FRE	C ₂	$E^1\Sigma_g - A^1\Pi_u$	Freymark	40000+65000
19	CO4P	CO	$A^1\Pi - X^1\Sigma$	Fourth Positive	40000+80000
20	COAN	CO	$B^1\Sigma - A^1\Pi$	Angstrom	17000+25000
21	COPK	CO ⁺	$A^2\Pi - X^2\Pi$	Comet-tail	18000+31000
22	COP1M	CO ⁺	$B^2\Sigma - X^2\Sigma$	First negative	36000+50000
23	CNK	CN	$A^2\Pi - X^2\Sigma$	Red	6600+18000
24	CNF	CN	$B^2\Sigma - X^2\Sigma$	Violet	27000+29000
25	SIOF	SIO	$A^1\Pi - X^1\Sigma$	Violet	34000+48000
26	OHF	OH	$A^2\Sigma - X^2\Pi$	Violet or 3064 A	29000+36000
27	H2L	H ₂	$B^1\Sigma - X^1\Sigma$	Lyman	80000+120000
28	H2V	H ₂	$C^1\Pi - X^1\Sigma$	Verner	80000+120000

В колонке «спектральный диапазон» приведены границы спектральной области (в волновых числах ω , см^{-1}), в которой наблюдается данный радиационный переход. Конкретные значения величин $\Delta\omega$ в табл. 1.1 выбраны в соответствии с рекомендациями, содержащимися в работах (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971; Кузнецова Л.А. и др., 1980). Их следует рассматривать как оценочные. Следует учесть, что для проведения расчетов радиационных характеристик недостаточно информации, приведенной в табл. 1.1. В зависимости от уровня приближения используемых расчетных кодов могут понадобиться новые данные.

В табл. 1.2 даны примеры информационного описания радиационных процессов, приводящих к образованию непрерывного спектра поглощения. В указанной таблице объединены различные типы процессов: фотоионизация, фотоотрыв, фотодиссоциация, свободно-свободные переходы.

Таблица 1.2

**Компьютерное представление информации о непрерывных
радиационных процессах**

Идентификатор	Частица	Имя процесса	Спектральный диапазон, $\Delta\omega, \text{cm}^{-1}$
BFH	H	Фотоионизация	> 2500
BFHE	He	—"	—"
BFC	C	—"	—"
BFN	N	—"	—"
BFO	O	—"	—"
BFSI	Si	—"	—"
BFAR	Ar	—"	—"
BFNP	N ⁺	—"	—"
BFNEP	He ⁺	—"	—"
BFH2	H ₂	—"	124000÷500000
BFCO	CO	—"	114600÷500000
BFC2	C ₂	—"	96800÷500000
BFCN	CN	—"	117000÷500000
BFC3	C ₃	—"	93000÷500000
BFIO2	O ₂	—"	78000÷213000
BFIN2	N ₂	—"	100000÷500000
BFINO	NO	—"	70420÷500000
BFNM	N ⁻	Отлипание	9000÷90000
BFOM	O ⁻	—"	12000÷65000
BFCM	C ⁻	—"	11300÷24150
BFC3	C ₃	Фотоионизация и фотодиссоциация	21000÷34000
BFDNO	NO	Фотодиссоциация	> 52355
BFDO2	O ₂	—"	57140÷78616
BFDN2	N ₂	—"	> 78734
BFBN	N	Фотоионизация из основных состояний	88374÷500000
BFBO	O	—"	109840÷500000
BFBC	C	—"	69550÷500000
BFBAR	Ar	—"	93450÷500000
BFUN	N	Фотоионизация из возбужденных состоя- ний совместно с не- прерывными процес- сами в полях положи- тельных ионов	> 2500
BFUO	O	—"	> 2500
BFUC	C	—"	—"

Окончание табл. 1.2

Идентификатор	Частица	Имя процесса	Спектральный диапазон, $\Delta\omega, \text{см}^{-1}$
BFUAR	Ar	—"	—"
BFUNP	N ⁺	—"	—"
FFAH	H	Поглощение при свободно-свободных переходах	—"
FFAHE	He		—"
FFAHP	H ⁺	—"	—"
FFAHEP	He ⁺	—"	—"
FFAO2	O ₂	—"	—"
FFAN2	N ₂	—"	—"
FFAO	O	—"	—"
FFAN	N	—"	—"
FFAH2	H ₂	—"	—"
FFACO	CO	—"	—"
FFAH2O	H ₂ O	—"	—"
FFACO2	CO ₂	—"	—"
BFNO2	NO ₂	Поглощение в квази-непрерывном спектре	6660+34000

Удобно ввести информационные признаки, задающие комбинации радиационных процессов, например фотоионизация из возбужденных состояний совместно со свободно-свободными переходами в полях положительных ионов, и отдельные составляющие процессов, например, фотоионизация из основного состояния. Здесь же фиксируются не отождествленные спектры, например C₃, NO₂. Заметим, что ключом поиска информации в данном случае может являться только идентификатор атрибута. Остальные его составляющие, включая и спектральный диапазон, где наблюдается процесс, носят справочный характер.

Имена идентификаторов могут быть любыми, но целесообразнее использовать несущие дополнительную информацию. Идентификатор каждого информационного элемента может представлять собой составное имя, например, первые две буквы которого обозначают тип радиационного процесса, последние буквы — тип частицы. Здесь условно индексы «+» и «-» у химических символов обозначаются буквами P и M. После букв BF, FF, указывающих тип процесса, могут присутствовать буквы, его уточ-

няющие, см., например, BFIO₂, BFDO₂, FFAO и т.п. Неотождественным процессам присвоены условные имена типа BFNO₂.

Аналогичная таблица составляется для соответствующего непрерывного спектра испускания. При этом идентификаторы свободно-связанных переходов имеют индексы FB, а свободно-свободных – FFE. Входными параметрами для расчета сечений приведенных радиационных процессов в условиях выполнения приближения ЛТР являются температура и волновое число поглощенного (испущенного) фотона.

В табл. 1.3 перечислены часто встречающиеся в расчетах переноса теплового излучения в инфракрасной области спектра колебательно-вращательные полосы.

Таблица 1.3

Компьютерное представление колебательных полос молекул

Идентификатор	Частица	Имя процесса	Имя полосы, мкм
VRH2O	H ₂ O	Сечение поглощения	1.38; 1.87; 2.7; 6.3; 20.0
VRHF	HF	—	1.29; 2.53
VRCO ₂	CO ₂	—	2.7; 4.3; 9.4; 10.4; 15.0
VRNO	NO	—	5.3
VRHCL	HCl	—	1.73; 3.82
VRCO	CO	—	2.35; 4.7
VRON	OH	—	1.44; 2.8
VRH ₂	H ₂	—	2.22
VRH2O	H ₂ O	Плотность вращательных линий	1.38; 1.87; 2.7; 6.3; 20.0
VRHF	HF	—	1.29; 2.53
VRCO ₂	CO ₂	—	2.7; 4.3; 9.4; 10.4; 15.0
VRNO	NO	—	5.3
VRHCL	HCl	—	1.73; 3.82
VRCO	CO	—	2.35; 4.7
VRON	OH	—	1.44; 2.8
VRH ₂	H ₂	—	2.22

Ключом поиска в данном случае должен быть информационный элемент, состоящий из двух идентификаторов: процесса и полосы. Параметр «плотность линий» необходим для расчетов переноса излучения с использованием модельного представления

молекулярного спектра. Аналогично формируется таблица для расчета процессов испускания. В условиях ЛТР входными параметрами являются температура и волновое число излучения. В работе (Хмелинин Б.А. и др., 1975) даны результаты расчетов сечений поглощения и плотностей линий при условиях, когда входными параметрами являются колебательная температура и волновое число.

Еще одна возможная форма представления информационных элементов продемонстрирована на примере радиационных процессов с участием конденсированной фазы газовых течений (табл. 1.4). В скобках идентификатора указаны параметры, которые могут требоваться по отдельности или все вместе (это выходные параметры): A – сечение поглощения; S – сечение рассеяния; F – индикатриса рассеяния (фазовая функция); AC – средний косинус рассеяния. В колонке «спектральный диапазон» даны значения $\Delta\omega$, для которых можно найти примеры использования этих данных в литературе (Дейрменджан Д., 1971; Борен К. и др., 1986). Входными данными здесь являются температура частиц, безразмерная комбинация, называемая параметром дифракции $x = 2\pi r/\lambda$ (r – радиус частицы, λ – длина волны), функция распределения частиц по размерам, спектральная зависимость комплексного показателя преломления материала частиц.

Таблица 1.4

**Компьютерное представление радиационных процессов
с участием конденсированной фазы**

Идентификатор	Частица	Спектральный диапазон, $\Delta\omega$, см^{-1}
SAL203 (A, S, C, AC)	Al_2O_3	< 50000
SC	C	—
SSIO2	SiO_2	—
SZRO2	ZrO_2	—
SBO2	BO_2	—
SH2O	H_2O	—

Идентификаторы компьютерных кодов, предназначенных для расчета параметров атомных линий, могут содержать только

имена атомных частиц, см., например, табл. 1.5. Однако каждый из таких кодов использует для расчетов информационные атрибуты соответствующей базы данных атомных линий, содержащей для каждой атомной линии энергию нижнего уровня и его статистический вес, волновое число и силу осциллятора энергетического перехода, константу (или несколько констант), характеризующую уширение линии, атомный вес.

Таблица 1.5

Компьютерное представление атомных линий

Идентификатор	Частица	Спектральный диапазон, $\Delta\omega$, cm^{-1}
LINO	O	8000+106000
LINN	N	7000+113000
LINOP	O ⁺	119000+227000
LINNP	N ⁺	90000+175000
LINAR	Ar	4900+115480
LINC	C	3030+105820

База данных параметров атомных линий формируется на основе литературных данных, например, (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971; Грим Г., 1978; Wiese W.L., et al., 1966, 1969; Surzhikov S.T., 2002) или расчета (см. главу 6).

1.4. Коэффициенты поглощения в непрерывном спектре

1.4.1. Расчет спектральных коэффициентов поглощения

Спектральный коэффициент поглощения является характеристикой не отдельно взятой частицы, а некоторого элементарного физического объема, в котором содержится множество частиц. Если плотность среды мала настолько, что времена свободных пробегов частиц оказываются большими по сравнению с временами межчастичных взаимодействий, то среда может рассматриваться как смесь идеальных газов атомов, молекул, ионов и электронов. Именно в таких условиях с достаточной для практических нужд точностью можно использовать понятие сечения процесса

как функции, характеризующей взаимодействие излучения с изолированной частицей. Тогда при ЛТР коэффициент поглощения рассчитывается умножением сечения на концентрацию частиц.

Если плотность среды возрастает настолько, что время свободного пробега становится соизмеримым с временем межчастичного взаимодействия, а средняя энергия взаимодействия – соизмеримой со средней кинетической энергией теплового движения, то свойства среды перестают описываться соотношениями теории идеальных газов. В этом случае говорят, что газ или плазма становятся неидеальными, и рассмотрение радиационных процессов в расчете на одну изолированную частицу становится некорректным (Фортов В.Е. и др., 1984).

Состояние полностью ионизованной плазмы определяется дальнедействующими кулоновскими взаимодействиями. В частично ионизованной плазме могут быть существенными взаимодействия зарядов с нейтральными атомами и молекулами, а также атомов и молекул между собой.

В работе (Фортов В.Е. и др., 1984) проанализированы различные критерии неидеальности плазмы. Эти критерии различны для классической и квантовой плазмы. Такое разделение связано с тем, что при условиях, когда начинают проявляться квантовые свойства частиц, может наблюдаться вырождение электронов, а также проявляться интерференционные квантовые эффекты, обусловленные принципом неопределенности. Условие классичности плазмы имеет вид

$$\lambda_e' = \frac{\hbar}{2\pi(2m_e T)^{1/2}} \ll \frac{e^2}{T}, \quad (1.11)$$

где m_e , e – масса и заряд электрона; T – температура; \hbar – постоянная Планка. Выражение (1.11) выражает тот физический факт, что в классической плазме электроны и ионы в основном находятся на расстояниях e^2/T , много превышающих тепловую длину волны λ_e' .

В классической плазме (квантовая плазма рассматриваться не будет) обычно используют два критерия идеальности:

$$\gamma = e^2 N_e^{1/3} / T \ll 1 \quad (1.12)$$

$$\text{и} \quad \Gamma = e^2 / (r_d T) \ll 1, \quad (1.13)$$

где γ – параметр кулоновского взаимодействия; Γ – плазменный параметр; N_e – концентрация электронов; r_d – радиус Дебая.

Физический смысл первого критерия состоит в том, что характерная потенциальная энергия кулоновского взаимодействия e^2/r_d на среднем расстоянии между частицами

$$|r| = \left(\frac{3}{4\pi N_e} \right)^{1/3} \quad (1.14)$$

много меньше средней тепловой энергии пропорциональной T . Второй критерий основан на определении дебаевского радиуса как расстояния, на котором в плазме в e раз экранируется поле пробного заряда. Малость кулоновской энергии взаимодействия по сравнению с кинетической энергией частиц выражается здесь в виде малости среднего расстояния между частицами по сравнению с дебаевским радиусом.

Для задач механики излучающего газа большой интерес представляет не полностью ионизированная плазма. В этих условиях приходится учитывать иные критерии неидеальности. По своему физическому смыслу эти критерии также требуют малости энергии взаимодействия по отношению к средней кинетической энергии.

Критерий идеальности по отношению к взаимодействию зарядов с нейтральными атомами и молекулами имеет вид (Форттов В.Е. и др., 1984)

$$\gamma_{ai} = \frac{2\pi\alpha e^2 N}{T r_a} \ll 1, \quad (1.15)$$

где α – поляризуемость атома; r_a – радиус обрезания поляризационного взаимодействия (грубо, $r_a \cong a_0$, где a_0 – радиус Бора). Выражение (1.15) получено в предположении, что среди обменных, электрических и поляризационных сил, последние являются определяющими. В частично ионизированной плазме можно при-

менять также простые неравенства, основанные на использовании ван-дер-ваальсова уравнения состояния: $Nb \ll 1$, $NaT^{-1} \ll 1$, где a, b – параметры уравнения Ван-дер-Ваальса; N – концентрация атомов и молекул.

Если измерять N и N_e в см^{-3} , а T в К, то введенные критерии имеют вид

$$\begin{aligned} \gamma &\cong 1.6 \times 10^{-3} N_e^{1/3} T^{-1} \ll 1, & \Gamma &\cong 0.324 \times 10^{-3} N_e^{1/2} T^{-1} \ll 1, \\ \gamma_{ai} &\cong 2 \times 10^6 \alpha N T^{-1} \ll 1, & \alpha &\cong (100 + 400) a_0^3. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Предполагая условия (1.16) выполненными, суммарный объемный спектральный коэффициент поглощения низкотемпературной плазмы сложного химического состава представляется в виде

$$\kappa(\omega, T) = [1 - \exp(-1.44\omega/T)] \sum_{k=1}^{N_k} x_k \sum_{i=1}^{N_{pk}} \sigma_{ik}(\omega, T) a_{ik}, \text{ см}^{-1}, \quad (1.17)$$

где $\sigma_{ik}(\omega, T)$ – сечение i -го радиационного процесса k -й компоненты; $x_k = p_k/p$; p_k, p – парциальное и суммарное давление; N_{pk}, N_k – число радиационных процессов у k -й компоненты и число компонент смеси газов. Переводной коэффициент a_{ik} согласует размерность $\kappa(\omega, T)$ и $\sigma_{ik}(\omega, T)$ и при необходимости содержит вероятности заселенностей возбужденных состояний, концентрации электронов или других компонент. Множитель в квадратных скобках учитывает вынужденное испускание излучения. По формуле (1.17) рассчитывается коэффициент поглощения в непрерывном спектре, однако имеется в виду не только истинно непрерывный спектр, образованный при свободно-свободных и связанно-свободных оптических переходах, но и усредненный линейчатый спектр (например, молекулярный спектр, усредненный по вращательной структуре). Поэтому, если среди процессов присутствуют связанно-связанные переходы, то на самом деле коэффициент поглощения уже не является спектральным в строгом смысле этого понятия, и обычно он называется *квазинепрерывным*. Расчет истинно селективного коэффициента поглощения с учетом линейчатой структуры имеет свои особенности и будет рассмотрен далее.

Необходимо подчеркнуть, что спектральный коэффициент поглощения определен только в фиксированной точке по волновому числу. Под моделью спектрального коэффициента поглощения следует понимать не таблицу соответствующих значений, а совокупность физических и вычислительных (математических) моделей, положенных в основу расчета спектрального коэффициента поглощения. Если в результате работы компьютерного кода получена таблица спектральных коэффициентов поглощения, то можно говорить только о групповой модели спектра, поскольку для любого значения волнового числа, не совпадающего с табличным значением, спектральный коэффициент поглощения может быть определен только посредством какой-либо интерполяционной процедуры.

Для решения задач физической газовой динамики необходимо рассчитывать как значения спектрального коэффициента поглощения в заданной точке шкалы волновых чисел, так и групповые модели коэффициентов поглощения при задании шкалы волновых чисел. Если размеры спектральных групп $\Delta\omega$ велики по сравнению с характерными структурными элементами спектра поглощения, то групповая модель коэффициента поглощения рассчитывается по формуле

$$\kappa_{\Delta\omega} = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\Delta\omega} \kappa_{\omega} d\omega. \quad (1.18)$$

Подробнее вопрос расчета групповых оптических моделей рассмотрен в следующем пункте.

1.4.2. Групповые модели коэффициента поглощения в непрерывном спектре

Под групповой (ступенчатой) моделью коэффициента поглощения понимается такая зависимость коэффициента поглощения от частоты, когда весь спектральный диапазон разбивается на конечное число участков, в пределах каждого из которых производится усреднение коэффициента поглощения. Внутри участков усреднения коэффициент поглощения принимается равным сво-

ему среднему значению и не зависит от частоты. Такое приближение оказывается чрезвычайно удобным и широко используется при расчетах переноса селективного излучения. Количество участков спектра, в которых усредняют коэффициент поглощения, определяется решаемой задачей. В задачах теплообмена излучением оказывается достаточным спектральную область от 0.02 мкм до ~ 10 мкм (в дальнейшем эту область будем называть полной спектральной областью) разбить на несколько участков (~ 2–10). В задачах, связанных со спектральной диагностикой газовых потоков и учетом тонких радиационно-газодинамических эффектов, приходится вводить сотни и тысячи участков усреднения, для того чтобы достаточно подробно описать спектр. Примером многогрупповых моделей коэффициента поглощения высокотемпературного воздуха служат табличные данные (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971). В последнее время появляются работы с результатами использования полинейчатых (*line-by-line*) моделей (Gorelov V.A., et al., 2004). Число спектральных групп здесь достигает одного–двух миллионов, что позволяет достаточно подробно рассчитывать контуры атомных линий. Однако даже указанные *line-by-line* модели являются все теми же групповыми моделями, но с очень большим числом групп.

Усреднение по спектру производится по формуле (1.18). Однако часто, при построении многогрупповой модели нет необходимости проводить интегрирование по спектру. Оказывается достаточным рассчитать коэффициент поглощения в любой точке, принадлежащей интервалу. Такой подход основан на том, что в пределах узкого спектрального диапазона коэффициент поглощения в непрерывном спектре меняется незначительно, а для систем молекулярных полос используются сечения, усредненные по вращательной структуре. Исключение здесь составляют атомные линии, для учета которых приходится разрабатывать специальные вычислительные модели.

Сложность построения оптических групповых моделей спектра, в которых учитываются атомные линии, состоит в том, что перенос излучения в атомных линиях на спектральных диапазонах, превосходящих их характерные ширины, нельзя описать

локальными функциями поглощения и испускания. Поэтому создаются либо приближенные модели переноса излучения (Суржиков С.Т., 2004 (б)), эффективно учитывающие линии, либо учет атомных линий производится на фоне групповых моделей непрерывного спектра. Остановимся на втором подходе.

Квазинепрерывный спектр (включающий сечения электронных полос двухатомных молекул) и спектр атомных линий представляются в виде двух аддитивных составляющих. Групповую модель квазинепрерывного спектра строят так, чтобы, во-первых, отразить основные элементы структуры спектра, а во-вторых, учесть практические потребности задачи. Границы спектральных диапазонов групповой модели выбирают так, чтобы учесть пороги фотоионизации, сильные молекулярные полосы. Определенная сложность возникает при выборе границ спектральных диапазонов осреднения, когда модель строится для широкого диапазона температур. Как известно, в этом случае наблюдается смещение порогов. Если этот эффект может оказать заметное влияние на результаты решения задачи, то приходится вводить дополнительные спектральные диапазоны. Требования, предъявляемые к модели со стороны решаемой задачи, могут привести либо к увеличению числа участков осреднения, либо наоборот, уменьшить их. Примером реализации такого подхода может служить методика построения групповых моделей квазинепрерывного спектра коэффициента поглощения высокотемпературного воздуха, смесей $\text{CO}_2 - \text{N}_2$ и $\text{N}_2 - \text{He}$, учитывающих не только структурные особенности спектра, но и типовые требования, предъявляемые к моделям при решении задач излучения высокотемпературных газовых объемов вблизи летательных аппаратов (Методические указания, 1984).

Если оптическая модель разрабатывается с целью ее последующего использования в некотором классе задач теории переноса теплового излучения или динамики излучающего газа, то, как уже отмечалось в п. 1.2, целесообразно создать оптимальную для данного класса физических задач оптическую модель.

Построение оптимальных групповых моделей состоит из нескольких этапов. Например, при разработке оптической модели

оптимальной для задач теории переноса теплового излучения, на первом этапе выделяются границы спектральных диапазонов на основе анализа спектральной зависимости объемного коэффициента поглощения от длины волны в диапазоне температур, характерном для решаемой задачи. На втором этапе выбранные границы спектральных диапазонов уточняются при решении задачи расчета интегральных лучистых потоков в объеме заданной геометрии. При этом размеры расчетной области и распределение температуры в таком объеме задаются по возможности близкими к тем, что ожидаются при решении требуемой задачи. Решение этой задачи проводится дважды: сначала с использованием, как можно более полной, информации по коэффициенту поглощения, а затем с использованием исследуемой групповой модели. Если точность расчета плотностей интегральных лучистых потоков по групповой модели оказывается недостаточной, то выполняется коррекция границ спектральных диапазонов.

При разработке спектрально-групповой оптической модели, оптимальной для задач радиационной газовой динамики, необходимо учитывать дополнительные требования. Например, при решении радиационно-газодинамических задач нагрева спускаемых космических аппаратов коррекцию границ спектральных диапазонов приходится делать дважды. Первый раз – при построении модели спектра коэффициента поглощения для заданных величин давления p_δ и температуры T_δ за фронтом ударной волны. Второй раз – на заключительном этапе решения задачи, когда групповые модели построены при различных значениях p_δ и T_δ , но они не совпадают между собой. Таким образом, построенная групповая модель является оптимальной для данного класса задач внешнего обтекания.

Групповые спектральные модели нагретых атмосферных газов (Методические указания, 1984), рекомендованные для практического использования в условиях локального термодинамического равновесия, были получены в результате таких оптимизирующих процедур. Примеры рассчитанных спектрально-групповых коэффициентов поглощения для атмосфер Земли, Венеры и Юпитера показаны на рис. 1.11 – 1.13.

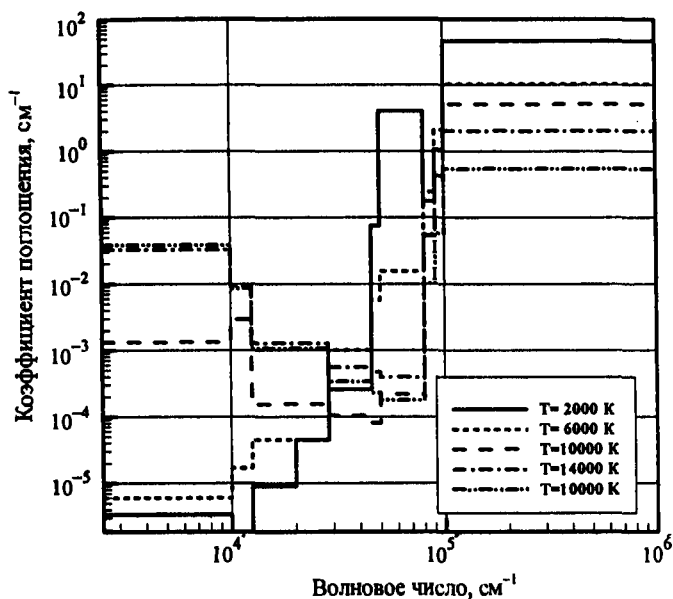


Рис. 1.11. Спектрально-групповой коэффициент поглощения воздуха (78% N_2 , 22% O_2 ; состав смеси газов задан в объемных долях)

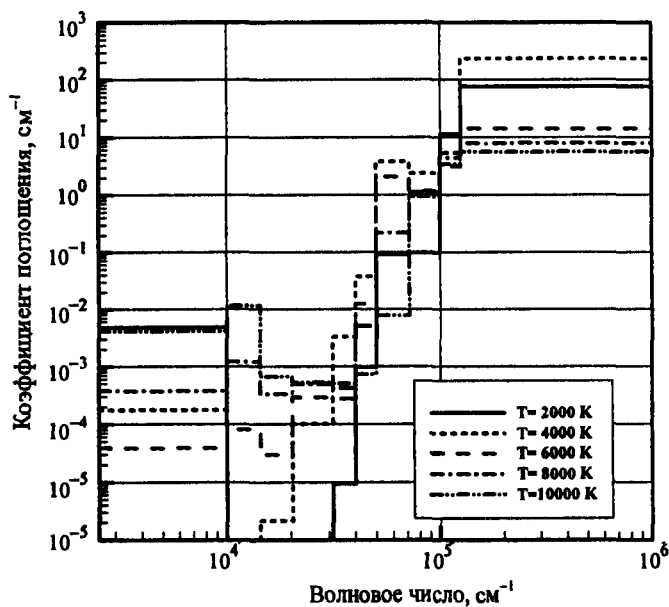


Рис. 1.12. Спектрально-групповой коэффициент поглощения атмосферы Венеры (97% CO_2 , 3% N_2 ; состав смеси газов задан в объемных долях)

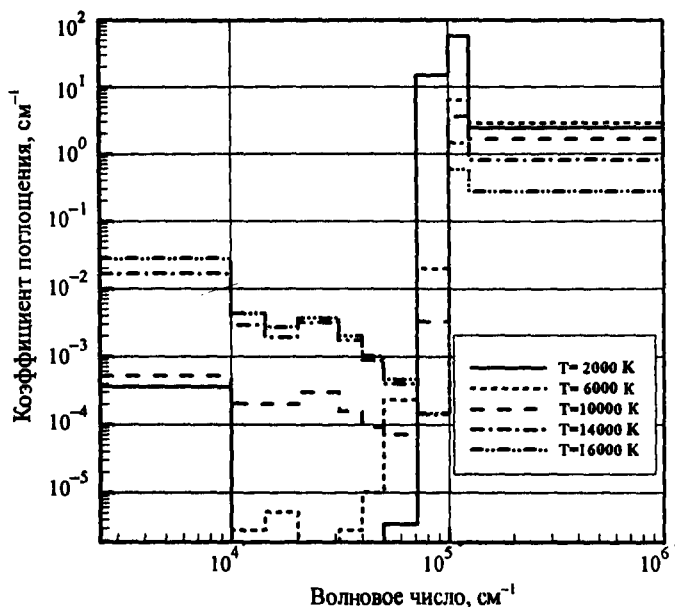


Рис. 1.13. Спектрально-групповой коэффициент поглощения атмосферы Юпитера (87% H_2 , 13% He ; состав смеси газов задан в объемных долях)

Спектральная оптическая модель с учетом атомных линий поддается оптимизации гораздо хуже. Рассмотрим два типа таких моделей. Первый тип групповой модели с учетом атомных линий — это синтетический (*line-by-line*) спектр поглощения атомных линий на фоне квазинепрерывного спектра. Использовать такую модель в расчетах переноса излучения неудобно из-за большой трудоемкости, поскольку даже с использованием неоднородной расчетной сетки на одну линию приходится отводить 10–20 точек. Это позволяет использовать такие типы моделей только в качестве эталонных. Второй тип групповых моделей — это модели, в которые вводятся специальные групповые функции, позволяющие провести расчет переноса излучения без увеличения числа групп. Их недостатком является необходимость использования специализированных расчетных алгоритмов. Однако с этим приходится мириться из-за их относительной простоты и очень высокой эффективности.

Проблемы оптимизации оптических моделей с учетом спектральных линий обсуждается в работе (Суржиков С.Т., 2004 (б)).

1.4.3. Среднеинтегральные коэффициенты поглощения

Среднеинтегральные коэффициенты поглощения получают при интегрировании коэффициентов поглощения по спектру с некоторыми весовыми функциями, выбор которых и определяет тип коэффициента. Наибольшее распространение получили два среднеинтегральных коэффициента: среднепланковский и среднеросселандовский коэффициенты поглощения (1.1), (1.2) и (1.6).

Если рассматривать квазинепрерывный спектр коэффициента поглощения, то численный расчет коэффициентов κ_P и κ_R не представляет трудностей, поскольку величины $\kappa_\omega = \kappa_{\Delta\omega_i}$ являются постоянными в пределах участков усреднения:

$$\kappa_P = \frac{\pi}{\tilde{\sigma} T^4} \sum_{i=1}^{N_{\Delta\omega}} \left(\kappa_{\Delta\omega_i} \right) \int_{\Delta\omega_i} J_{b\omega}(T) d\omega, \quad (1.19)$$

$$\kappa_R = \frac{\pi}{4\tilde{\sigma} T^3} \sum_{i=1}^{N_{\Delta\omega}} \left(\kappa_{\Delta\omega_i}^{-1} \right) \int_{\Delta\omega_i} \frac{dJ_{b\omega}(T)}{dT} d\omega, \quad (1.20)$$

где $N_{\Delta\omega}$ – число групп в модели; $\tilde{\sigma}$ – постоянная Стефана–Больцмана.

Заметим, что при взятии интегралов вида (1.19), (1.20) удобно использовать квадратурные формулы Гаусса.

Не сложен, как правило, и расчет среднепланковских коэффициентов с учетом линейчатой структуры. В этом случае при учете квазинепрерывной составляющей спектра используется формула (1.19), а интегрирование по линейчатой составляющей спектра поглощения сводится к суммированию интегральных коэффициентов поглощения в линиях. Это весьма хорошее приближение для условий невысоких давлений в плазме, когда спектральные размеры линий (характеризуемые их полуширинами) во много раз меньше размеров участков усреднения $\Delta\omega$. При больших давлениях такой прием использовать нельзя.

Сложнее обстоит дело с расчетом среднеросселандовских коэффициентов поглощения в линейчатом спектре. Этот вопрос был проанализирован в работах (Биберман Л.М. и др., 1964, 1967 (а)), где предложено применение статистических моделей.

Третий тип средних коэффициентов – средние по Чандрасекхару, имеют в качестве весовой функции спектральную интенсивность излучения J_ω (интегрирование ведется по полному спектральному диапазону):

$$\kappa_C = \frac{\int \kappa_\omega J_\omega d\omega}{\int J_\omega d\omega}. \quad (1.21)$$

На идее введения средних по Чандрасекхару основано несколько высокоэффективных методов ускорения процедуры численного решения задачи переноса селективного излучения (Суржиков С.Т., 2004 (б)). Поскольку интенсивность излучения зависит от направления, то коэффициент κ_C также может зависеть от направления. Чтобы избежать этого, спектральную интенсивность излучения усредняют по направлениям. Тип усреднения зависит от используемого метода, поэтому можно определить большое многообразие средних коэффициентов типа (1.21).

Рассмотрим физический смысл среднепланковского и среднеросселандовского коэффициентов поглощения. Среднепланковский и среднеросселандовский коэффициенты характеризуют перенос лучистой энергии соответственно в оптически тонких ($\kappa_\omega L \ll 1$, L – характерный размер) и оптически толстых ($\kappa_\omega L \gg 1$) средах. Воспользуемся уравнением переноса селективного излучения для спектральной интенсивности излучения J_ω вдоль некоторого направления s (Оцисик М.Н., 1976; Суржиков С.Т., 2004 (б)):

$$\frac{\partial J_\omega}{\partial s} = \kappa_\omega J_{b\omega} - \kappa_\omega J_\omega \quad (1.22)$$

и проинтегрируем его по волновому числу в диапазоне $\Delta\omega$:

$$\frac{\partial}{\partial s} \int_{\Delta\omega} J_\omega d\omega = \int_{\Delta\omega} \kappa_\omega J_{b\omega} d\omega - \int_{\Delta\omega} \kappa_\omega J_\omega d\omega =$$

$$= \kappa_{P, \Delta\omega} \frac{\bar{\sigma} T^4}{\pi} \int_{\Delta\omega} \kappa_{\omega} J_{\omega} d\omega - \int_{\Delta\omega} \kappa_{\omega} J_{\omega} d\omega, \quad (1.23)$$

где $\bar{\sigma}$ – постоянная Стефана – Больцмана. Отсюда следует, что первое слагаемое в (1.23), пропорциональное $\kappa_{P, \Delta\omega}$, соответствует энергии, которая излучается элементарным физическим объемом в спектральном диапазоне $\Delta\omega$. Аналогично, заданием κ_P определяется энергия, излучаемая в полной спектральной области.

С целью выяснения физического смысла среднеросселандовского коэффициента необходимо рассмотреть выражение для плотности спектрального лучистого потока в оптически толстой среде. Воспользуемся соотношением для плотности спектрального потока в приближении плоского слоя:

$$q_{\omega}(\tau_{\omega}) = 2\pi \int_0^{\tau_{\omega}} J_{b\omega}(\tau') E_2(\tau_{\omega} - \tau') d\tau' - \\ - 2\pi \int_{\tau_{\omega}}^{\tau_{\omega, L}} J_{b\omega}(\tau') E_2(\tau' - \tau_{\omega}) d\tau', \quad (1.24)$$

где $\tau_{\omega} = \int_0^s \kappa_{\omega} ds'$; E_2 – интегро-экспоненциальная функция 2-го порядка.

При получении (1.24) пренебрегалось излучением, падающим на границы слоя при $s = 0$ и $s = L$. Разлагая функцию Планка в ряд в окрестности τ_{ω} и удерживая только члены первого порядка по $(\tau_{\omega} - \tau')$, получаем

$$q_{\omega}(\tau_{\omega}) = 4\pi \frac{dJ_{b\omega}}{d\tau_{\omega}} \int_0^{\infty} \tau' E_2(\tau') d\tau' = -\frac{4}{3} \pi \frac{dJ_{b\omega}}{d\tau_{\omega}}. \quad (1.25)$$

Отсюда следует, что лучистый поток в спектральной области $\Delta\omega$ равен

$$q_{\Delta\omega}(s) = \frac{4}{3} \pi \int_{\Delta\omega} \frac{dJ_{b\omega}}{d\tau_{\omega}} d\omega = -\frac{16}{3} \kappa_{R, \Delta\omega}^{-1} \bar{\sigma} T^3 \frac{dT}{ds}. \quad (1.26)$$

Аналогично определяется лучистый поток в полной спектральной области. Таким образом, лучистый тепловой поток в оптически толстой среде описывается законом Фурье с коэффициентами теплопроводности

$$\lambda_{R,\Delta\omega} = \frac{16}{3} \kappa_{R,\Delta\omega}^{-1} \bar{\sigma} T^3, \quad \lambda_R = \frac{16}{3} \kappa_R^{-1} \bar{\sigma} T^3. \quad (1.27)$$

а коэффициент κ_R^{-1} характеризует расстояние эффективной передачи теплоты посредством излучения.

1.5. Коэффициенты поглощения в спектральных линиях

1.5.1. Расчет коэффициентов поглощения в атомных линиях

Проведению расчетов переноса излучения и спектральных коэффициентов поглощения с учетом атомных линий предшествует подготовительная работа, связанная с выбором номенклатуры учитываемых линий и анализом условий в плазме для построения адекватного метода расчета параметров атомных линий. Этим вопросам посвящена специальная литература по атомной спектроскопии (Грим Г., 1978; Wiese W.L., et al., 1966, 1969; Касабов Г.А. и др., 1979; Корлисс Ч. и др., 1968; Левинсон И.Б. и др., 1962; Грим Г., 1969; Собельман И.И., 1963; Рудзикас З.Б. и др., 1990; Кобзев Г.А., 1983). Применительно к задачам теплообмена излучением рассматриваются более простые методы, в которых вся сложность и многообразие квантово-механических процессов, протекающих при связанно-связанных переходах в атомах и ионах, представляется в виде ряда феноменологических констант, таких, как интегральное поглощение в линии и ее полуширина. Анализу некоторых методов расчета указанных коэффициентов и используемых вычислительных алгоритмов посвящен данный раздел.

Физические и математические модели, а также реализующие их программные модули разделяются на две независимые группы. Первая группа моделей и программ обеспечивает подготовку параметров атомных линий к стандартизованному виду и формиро-

вание базы данных. Обычно отдельно взятую атомную линию характеризуют: волновое число центра линии ω_{mn} (для перехода $m \rightarrow n$), статистический вес нижнего состояния g_m и его энергия E_m , сила осциллятора в поглощении f_{mn} , атомная масса иона или атома M_a , константа (или несколько констант), определяющая уширение линии. В этот набор могут также входить параметры верхнего уровня перехода $m \rightarrow n$.

Все физические аспекты расчета параметров линейчатого спектра включаются в эту первую группу. Здесь производится расчет сил осцилляторов (если отсутствуют соответствующие экспериментальные или расчетные данные) и постоянных уширения. Примером стандартного вида набора параметров атомных линий могут служить таблицы (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971; Грим Г., 1978; Wiese W.L., et al., 1966, 1969; Касабов Г.А. и др., 1979; Корлисс Ч. и др., 1968; Левинсон И.Б. и др., 1962; Wilson K.H, et al., 1967; Surzhikov S.T., 2002 (6)).

Вторая группа моделей и программ практически не связана с первой, а использует лишь информацию из базы данных атомных линий. Основное назначение этой группы вычислительных моделей состоит в расчете синтетического спектра коэффициента поглощения и в подготовке информации по атомным линиям для вычислительных моделей, реализующих расчет переноса излучения.

Рассмотрим некоторые расчетные модели, относящиеся к первой группе. Анализ линейчатого излучения в низкотемпературной плазме, выполненный в работах (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971; Фортон В.Е. и др., 1984), показывает, что основными механизмами уширения атомных и ионных линий в диапазоне температур $\sim 5000\div 20000$ К и при давлениях порядка атмосферного можно считать доплеровское и штарковское уширения заряженными частицами. При этом форму линии следует описывать функцией Фойгта. Для построения расчетной модели коэффициента поглощения необходимо определить три функции: α_{mn} – интегральный коэффициент поглощения линии, лоренцевскую полуширину γ_{mn}^L и доплеровскую полуширину γ_{mn}^D (где γ – половина ширины линии на половине высоты).

При больцмановском распределении атомов по энергетическим состояниям, α_{mn} задается в виде

$$\alpha_{m,n} = \frac{\pi e^2}{m_e c_0^2} f_{mn} N_m \left[1 - \exp\left(\frac{-hc_0 \omega_{mn}}{kT}\right) \right], \quad (1.28)$$

$$N_m = N \frac{g_m \exp(-E_m/kT)}{Q(T)},$$

где $\pi e^2/m_e c_0 = 2.65 \times 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}$ – площадь спектральной линии с единичной силой осциллятора; N_m в см^{-3} , α_{mn} в см^{-2} ; k – постоянная Больцмана; $Q(T)$ – статистическая сумма.

Величины E_m , ω_{mn} , f_{mn} , входящие в (1.28), следует брать по данным (Moore Ch., 1949, 1952, 1958; Wiese W.L., et al., 1966, 1969; Стриганов А.Р. и др., 1966). Статистический вес g_m определяется по конфигурации энергетического уровня. Когда f_{mn} для нужных переходов отсутствуют, применяются методы расчета (Грим Г., 1969; Собельман И.И., 1963; Рудзикас З.Б. и др., 1990; Вайнштейн Л.А., 1961) (в том числе оценки в кулоновском приближении (Bates D.R., et al., 1949)).

Доплеровское уширение рассчитывается по формуле

$$\gamma_{mn}^D = \left(2kT \frac{\ln 2}{M_a m_a c_0^2} \right)^{1/2} \omega_{mn} \cong 3.58 \times 10^{-7} \left(\frac{T}{M_a} \right)^{1/2} \omega_{mn}, \text{ см}^{-1} \quad (1.29)$$

где $m_a = 1.66 \times 10^{27} \text{ г}$ – атомная единица массы; M_a – атомный вес в относительных атомных единицах.

Взаимодействие с заряженными частицами (в основном с электронами (Собельман И.И., 1963)) обуславливает дисперсионную (или лоренцовскую) форму линии. Расчет уширения в этом случае представляет собой существенно более сложную задачу. То разделение программных модулей на две группы, о котором говорилось выше, вообще говоря, является неправомерным, поскольку уширение спектральных линий атомов и ионов во многом определяется конкретными физическими условиями в плазме. И именно с их учетом следует производить расчеты уширения в каждом конкретном случае. Тем не менее, такое разделение все же можно сделать, ограничив область определения условиями в

плазме. В теории штарковского уширения спектральных линий (Собельман И.И., 1963; Вайнштейн Л.А. и др., 1959) введен критерий

$$\beta = |\Delta E| \frac{(S_{mn}/3g_m)^{1/2}}{m_e v_e} = \frac{(f_{mn} R_y |\Delta E|)^{1/2}}{m_e v_e^2} = \frac{187 (f_{mn} |\Delta E|)^{1/2}}{T}, \quad (1.30)$$

где S_{mn} – сила линии в атомных единицах (ea_0); ΔE – расстояние от уровня n до ближайшего возмущающего уровня m , см^{-1} ; v_e – скорость электронов; T – температура, К. Последнее равенство в (1.30) получено для максвелловского распределения электронов по скоростям. Этот критерий позволяет классифицировать характер уширения атомных линий электронами: при $\beta \geq 5$ справедливо адиабатическое приближение (приближение упругих столкновений), в котором

$$\gamma_{mn}^L = N_e |v_e| \sigma_0, \quad \sigma_0 \cong 5.7 C_4^{2/3} |v_e|^{-2/3}, \quad (1.31)$$

а при $\beta \leq 2$ справедливо неадиабатическое приближение (приближение неупругих столкновений), в котором

$$\gamma_{mn}^L = N_e |v_e| \sum_i \sigma_{0i} J(\beta_i), \quad (1.32)$$

где N_e , $|v_e| = 6.21 \times 10^5 T^{1/2}$ – концентрация электронов и их среднемаксвелловская скорость, $\text{см}/\text{с}$; σ_0 – сечение уширения; C_4 – константа квадратичного эффекта Штарка; $J(\beta_i)$ – функция, определяющая вклад неупругих столкновений, представлена в табл. 1.6. Суммирование здесь ведется по всем верхним уровням, возмущающим уровень n . Константа C_4 определяется по формуле

$$C_4 = \frac{S_{mn} R_y a_0^2}{3\pi c_0 m_e g_m \omega_{mn}} \cong \frac{2.37 \times 10^{-12} S_{mn}}{g_m \omega_{mn}}, \quad \text{см}^4/\text{с}. \quad (1.33)$$

Заметим, что величины ΔE_{mn} (или ω_{mn}) и f_{mn} (или S_{mn}) в приведенных формулах должны определяться с учетом правил отбора (Ельяшевич М.А., 2001; Фриш С.Э., 1963; Радциг А.А. и др., 1980). При $2 < \beta < 5$ соотношения могут давать заметные погрешности.

Таблица 1.6

Функция $J(\beta)$

β	$J(\beta)$
32	0.97
16	1.02
8	1.03
4	1.06
2	1.12
1	1.17
0.5	1.2
0.25	1.15
0.125	1.09
0.0625	0.927
0.0312	0.764
0.0078	0.451
0.00195	0.239
0.00048	0.119
0.000015	0.017

В работе (Воробьев В.С. и др., 1964) все дискретные уровни разбиваются на группы, в пределах одной из которых справедливо адиабатическое приближение, а в пределах другой – параметры рассчитываются в водородоподобном приближении (Грим Г., 1978; Bates D.R., et al., 1949).

Штарковское уширение электронами линий ионов отличается от уширения линий атомов наличием кулоновского взаимодействия, учет которого приводит к формуле (Воробьев В.С. и др., 1964; Баранже М., 1964)

$$\gamma_{mn}^L = \frac{4h^2}{3\pi^3 \sqrt{2} m_e^2} N_e |v_e|^{-1} \left(\sum_i S_{mi} / g_m \right). \quad (1.34)$$

В тех случаях, когда заметно возмущение и нижнего уровня, в (1.32) и (1.34) следует добавить соответствующие слагаемые, т.е. выполнить суммирование не только по верхним, но и по нижним уровням.

С использованием приведенных соотношений теории Вайнштейна – Собельмана в (Каменщиков В.А. и др., 1971) сформирован набор атомных линий элементов N, O, N⁺, O⁺, где штарков-

ское уширение учитывается для каждой линии одной эффективной константой \tilde{C}_4 . С их учетом лоренцевские полуширины линий атомов и ионов рассчитываются по следующим формулам:

$$\begin{aligned}\gamma_a^L &= \gamma_{mn} = 4.57 \times 10^{-17} N_e T^{1/6} \tilde{C}_{4,mn}^a, \text{ см}^{-1}, \\ \gamma_i^L &= \gamma_{mn} = 1.11 \times 10^{-16} N_e T^{-1/2} \tilde{C}_{4,mn}^i, \text{ см}^{-1}.\end{aligned}\quad (1.35)$$

Таблицы (Каменщиков В.А. и др., 1971) удобны для целей вычислительного эксперимента еще и тем, что в них в единообразной форме даны параметры отдельных линий, входящих в состав мультиплета.

Отметим, что теория Вайнштейна – Собельмана (в ее рамках можно определить также и сдвиги линий) использовалась при формировании библиотек атомных линий в ряде других работ. Например, в работе (Романов Г.С. и др., 1979) приведены параметры линий углерода и его ионов, а в работе (Градов В.М. и др., 1982) рассчитаны параметры линий плазмы SiO_2 .

Детальные вычисления штарковского уширения линий выполнены в работах (Грим Г., 1978; Левинсон И.Б. и др., 1962). На их основе сформированы наборы атомных линий в работах (Авилова И.В. и др., 1970; Касабов Г.А. и др., 1979; Wilson K.H., et al., 1967).

В работе (Левинсон И.Б. и др., 1962) представлены полуширины, обусловленные штарковским уширением электронами (γ , в Å), относительные величины электронных ударных сдвигов (d/γ) и параметры ионного уширения α при электронной концентрации $N_e = 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Полуширина и сдвиг при произвольных концентрациях электронов определяются по формулам Визе (Визе В., 1967)

$$\begin{aligned}\gamma_{mn}^L &= 10^{-16} \gamma_{mn} N_e \left[1 + 1.75 \times 10^{-4} N_e^{1/4} \alpha_{mn} \left(1 - 0.068 N_e^{1/6} T^{-1/2} \right) \right], \text{ Å}, \\ \Delta &\cong \left[(d/\gamma)_{mn} \pm 2 \times 10^{-4} N_e^{1/4} \alpha_{mn} \left(1 - 0.068 N_e^{1/6} T^{-1/2} \right) \right], \text{ Å},\end{aligned}\quad (1.36)$$

которые справедливы при

$$\alpha N_e^{1/4} < 0.5 \times 10^{14}, \quad \sigma = 8 \times 10^{-2} \gamma \lambda^{-2} (M_a/T)^{1/2} N_e^{2/3} > 1,$$

$$R = 9 \times 10^{-2} N_e^{1/6} T^{-1/2} < 0.8.$$

Вторые слагаемые в (1.36) отвечают уширению линий ионами и, как правило, малы, поэтому при расчетах переноса теплового излучения ими часто пренебрегают.

Особо следует отметить работы (Wilson K.H., et al., 1967; Churchill D.R., et al., 1966), где применяется способ формального описания связанно-связанных переходов в атомах, который очень удобен при построении автоматизированных систем. Для идентификации каждого терма введен семипозиционный код $\{i, j, kk', n, l, S, L\}$, содержащий сведения об элементе и конфигурации терма: I – порядковый номер элемента (0 – O, 1 – N, 2 – C, ...); j – кратность ионизации (1 – нейтральный атом, 2 – однократный ион, ...); kk' – индекс конфигурации электронной оболочки (соответствие между ними устанавливается при помощи таблиц, например, табл. 1.7); n, l – главное и орбитальное квантовые числа; S – мультиплетность; L – полный орбитальный момент. Линия характеризуется двумя такими кодами.

Таблица 1.7

Компьютерное представление электронных конфигураций в работе (Wilson K.H et al., 1967)

$k k'$	O	O ⁺ , N	N ⁺ , C	C ⁺
0 1	1s ² 2s ² 2p ³ (⁴ S)	1s ² 2s ² 2p ² (³ P)	1s ² 2s ² 2p (² P)	1s ² 2s ² (¹ S)
0 2	(² D)	(¹ D)	(⁴ P)	2s2p (³ P)
0 3	(² P)	(¹ S)	(² D)	(¹ P)
0 4	2s2p ⁴ (⁴ P)	2s2p ³ (⁵ S)	(² S)	2p ² (³ P)
0 5	(² D)	(³ D)	(² P)	(¹ D)
0 6	(² S)	(³ P)	2p ³ (⁴ S)	(¹ S)
0 7	(² P)	(¹ D)	(² D)	
0 8	2p ⁵ (² P)	(³ S)	(² P)	
0 9		(¹ P)		
1 0		2p ⁴ (³ P)		
1 1		(¹ D)		
1 2		(¹ S)		

В таблицах (Wilson K.H., et al., 1967) полуширина $\tilde{\gamma}$ дается в эВ, поэтому

$$\gamma_{mn}^L = 8067 \tilde{\gamma} N_e, \text{ см}^{-1}. \quad (1.37)$$

В табл. 1.8 даны примеры информационных описаний мультиплетов элементов N и N⁺, принятые в работах (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971; Грим Г., 1978; Wilson K.H., et al., 1967). Наиболее подробная информация представлена в работе (Каменщиков В.А. и др., 1971), где приведены все необходимые константы для каждой линии мультиплета. Константы, приводимые в работе (Авилова И.В. и др., 1970), позволяют выполнить расчет по формуле

$$\gamma_{mn}^L = p \left(x_e \alpha T^k + \beta x_R T^{-1} + \delta x_P T^{-0.7} \right), \text{ см}^{-1}, \quad (1.38)$$

в которой учтено не только штарковское уширение ($\sim x_e$), но и ван-дер-ваальсово ($\sim x_P$), и резонансное ($\sim x_R$) уширение, где x_e, x_P, x_R — мольные доли электронов, уширяющих частиц и поглощающих частиц, находящихся в энергетическом состоянии m . Что касается последних двух типов уширения, то они могут оцениваться также по формулам (Каменщиков В.А. и др., 1971)

$$\gamma_{mn,P}^L \cong 8.94 \times 10^{-2} D^2 p (M_a/T)^{1/2}, \text{ см}^{-1},$$

$$\gamma_{mn,R}^L \cong 2.54 \times 10^6 f_{mn} (g_n/g_m)^{1/2} \omega^{-1}, \text{ см}^{-1}, \quad (1.39)$$

где $D^2 = D_A D_B$ — произведение оптических диаметров столкновений поглощающих и уширяющих частиц в Å; f_{mn} — сила осциллятора резонансного перехода; $M_a = M_{aA} M_{aB} / (M_{aA} + M_{aB})$ — приведенная атомная масса.

Еще одна составляющая лоренцевской полуширины, связанная с конечностью жизни возбужденных электронных состояний (так называемая естественная полуширина), заметно меньше других слагаемых. Она оценивается по формуле

$$\gamma_{mn,s}^L \cong 2.65 \times 10^{-12} \sum_j A_{nj}, \text{ см}^{-1}, \quad (1.40)$$

где суммирование ведется по состояниям, на которые может самопроизвольно перейти система с вероятностью, определяемой коэффициентом Эйнштейна спонтанного перехода A_{nj} .

Последний столбец в табл. 1.8 содержит значения штарковских полуширин, полученных по выше приведенным формулам и данным из цитированных работ. Видно, что различие в величинах γ_{mn}^L может достигать нескольких раз, что указывает на необходимость дальнейшего совершенствования обсуждаемых моделей.

Таблица 1.8 а

**Компьютерное описание параметров атомных линий N и N⁺
в работе (Каменщиков В.А и др., 1971)**

Атом	Переход	N	$J_m - J_n$	E_m , 1/см	ω_{mn} , 1/см	
N	$2p^3 (^2D) - 3d (^2F)$	7	5/2 - 5/2	19223	85587.9	
			5/2 - 7/2	19223	85659.7	
			3/2 - 5/2	19231	85579.9	
N ⁺	$2p^2 (^3P) - 3s (^3P)$	4	2 - 2	131.3	148946	
			2 - 1	131.3	148810	
			1 - 2	49.1	149028	
			1 - 1	49.1	148892	
			1 - 0	49.1	148860	
			0 - 1	0	148941	
			0 - 0	0	148909	
Атом	Переход	N	g_m	f_{mn}	\bar{C}_{4mn}	γ_{mn} , 1/см
N	$2p^3 (^2D) - 3d (^2F)$	7	6	0.00011	0.161	0.587
			6	0.0211	0.155	0.566
			4	0.0221	0.161	0.587
N ⁺	$2p^2 (^3P) - 3s (^3P)$	4	5	0.067	1.493	0.0285
			5	0.0223	1.495	0.0286
			3	0.0373	1.493	0.0285
			3	0.0223	1.495	0.0286
			3	0.0297	1.47	0.0281
			1	0.0892	1.495	0.0286
			1	0.02	1.47	0.0281

Таблица 1.8 б

Компьютерное описание параметров атомных линий N и N⁺ в работе (Wilson K.H., et al., 1967) и числовые значения параметров атомных линий при T=10000 К

Атом	Переход	N	Нижнее состояние	Верхнее состояние	λ_{mn} , Å	f_{mn}	$\tilde{\gamma} \cdot 10^{-21}$, эВ	$d_{mn} \cdot 10^{-21}$, эВ	γ_{mn} , 1/см
N	2p ³ (² D) – 3d(² F)	63	1101	1101	1167	0.0452	3.12	3.86	0.433
			2122	3223					
N ⁺	2p ² (³ P) – 3s(³ P)	7	1201	1201	671.1	0.128	0.292	0.474	0.041
			2131	3031					

Таблица 1.8 в

Компьютерное описание параметров атомных линий N и N⁺ в работах (Грим Г., 1978; Wiese W.L., et al., 1966, 1969)

Атом	Переход	N	λ_{mn} , Å	ω_{mn} , Å	$(d/\omega)_{mn}$, Å	α	γ_{mn} , 1/см
N	2p ³ (² D) – 3d(² F)	9	1168	0.00279	1.093	0.44	0.352
N ⁺	2p ² (³ P) – 3s(³ P)	3	671.01	0.000102	1.618	0.023	0.0389
			672.00				

Таблица 1.8 г

Компьютерное описание параметров атомных линий N и N⁺ в работе (Авилова И.В. и др., 1970)

Атом	Переход	N	λ_{mn} , Å	f_{mn}	α	k	β	δ	γ_{mn} , 1/см
N	2p ³ (² D) – 3d(² F)	7	1167	0.034	15	-0.667	-	0.09	0.350
N ⁺	2p ² (³ P) – 3s(³ P)	4	671.48	0.089	1.6	-0.667	-	-	0.0374

Большой практический интерес представляет расчет параметров атомных линий водородной плазмы. Силы осцилляторов атомных линий водородной плазмы приближенно определяются по формуле

$$f_{mn} = \frac{64}{3\pi\sqrt{3}2m^2} \frac{g}{\left[(1/m)^2 - (1/n)^2\right]^3} \frac{1}{m^3n^3}, \quad (1.41)$$

где $g \cong 1$ – фактор Гаунта, учитывающий квантово-механические поправки; m, n – главные квантовые числа нижнего и верхнего энергетического состояний. Уширение водородных линий в большинстве практически важных случаев определяется квазистатическим уширением ионов и ударным уширением электронов. Полуширина, обусловленная действием ионов, может быть оценена из теории Хольцмарка (Собельман И.И., 1963):

$$\gamma_{H,i} \cong 0.33 \times 10^{-10} (n^2 - m^2) N_e^{2/3}, \text{ см}^{-1}. \quad (1.42)$$

Ударное уширение линий водородоподобных атомов электронами по упрощенной теории (Собельман И.И., 1963) оценивается по формуле

$$\begin{aligned} \gamma_{H,e} &\cong \frac{16}{(9z^2\pi c_0)(h/2\pi m_e)^2} \frac{N_e (m^5 + n^5)}{v_e \left[0.33 + \ln \left(v_e / N_e^{1/3} n^{5/2} \right) \right]} \cong \\ &\cong \frac{0.4 \times 10^{-16} N_e (m^5 + n^5)}{\left(z^2 T^{1/2} \right) \left[\ln \left(6.21 \times 10^5 T^{1/2} / N_e^{1/3} n^{5/2} \right) + 0.33 \right]}, \text{ см}^{-1}, \quad (1.43) \end{aligned}$$

где z – заряд ядра; T – температура, К. Подробно с теорией уширения водородных линий можно ознакомиться в работах (Грим Г., 1978; Собельман И.И., 1963; Лисица В.С., 1977). Там же имеются результаты наиболее точных расчетов их контуров. Типичная номенклатура водородных линий, учитываемых в расчетах переноса теплового излучения, приведена в табл. 1.9.

В заключение рассмотрения вопросов расчета параметров атомных линий отметим, что группы линий, располагающиеся близко к фотоионизационным порогам, эффективно учитывают продлением порогов в длинноволновую сторону. Обоснованием этого может служить частичная нереализация верхних возбужденных уровней в плазме и сильное перекрытие таких линий. По

этому поводу см. работы (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971).

Таблица 1.9

Атомные линии водорода

Имя серии	λ , мкм	Имя серии	λ , мкм	Имя серии	λ , мкм
Серия Лаймана		Серия Бальмера		Серия Пашена	
L_α	0.1215	H_α	0.6563	P_α	1.8751
L_β	0.1026	H_β	0.4861	P_β	1.2818
L_γ	0.0972	H_γ	0.4340	P_γ	1.0938
L_δ	0.0949	H_δ	0.4101		
L_ϵ	0.0937	H_ϵ	0.3970		

Модели расчета спектральных коэффициентов поглощения относятся ко второй группе вычислительных моделей. При одновременном доплеровском γ_D и штарковском γ_L уширениях профиль линии описывается функцией Фойгта

$$\kappa(x) = \frac{\alpha_{mn}}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-y^2)}{a^2 + (x-y)^2} dy,$$

$$a = \frac{\gamma_L (\ln 2)^{1/2}}{\gamma_D}, \quad x = \frac{(\omega - \omega_0) (\ln 2)^{1/2}}{\gamma_D}, \quad (1.44)$$

где ω_0 – волновое число центра линии. Вместо интеграла (1.44) оказывается удобным использовать достаточно простую аппроксимацию фойгтовской функции, предложенную в работе (Матвеев В.С., 1972). Если ввести обозначения $\eta = (\omega - \omega_0)/\gamma_v$, $\xi = \gamma_L/\gamma_v$ (γ_v – полуширина линии с фойгтовским контуром), то

$$\kappa(\eta, \xi) = \frac{\alpha}{\gamma_v (\ln 2/\pi)^{1/2} (1-\xi) \exp(-\eta^2 \ln 2)} + \frac{\alpha \xi}{\left[\pi \gamma_v (1+\eta^2) \right]} -$$

$$\frac{\alpha \xi (1-\xi)}{\left[(\pi \gamma_v) (1.5/\ln 2 + 1 + \xi) \left[0.66 \exp(-0.4\eta^2) - (40 - 5.5\eta^2 + \eta^4)^{-1} \right] \right]},$$

$$\gamma_v = \frac{\gamma_D + (\gamma_L^2 + 4\gamma_D^2)^{1/2}}{2} + 0.05 \frac{1 - 2\gamma_L}{\gamma_L + (\gamma_L^2 + 4\gamma_D^2)^{1/2}}. \quad (1.45)$$

Использование формул (1.45) позволяет рассчитать функцию профиля фойгтовской линии с точностью 3%, чего вполне достаточно для практических целей.

В расчетах контуров спектральных линий может возникнуть проблема корректности определения коэффициента поглощения в далеких крыльях. На больших расстояниях от центра линии контур не описывается дисперсионной (лоренцевской) функцией. При анализе этого вопроса следует выделить различные расчетные случаи. Первый случай – это построение синтетического профиля коэффициента поглощения применительно к задачам спектроскопии. Здесь необходимо каждый раз задачу решать индивидуально, исходя из конкретных условий в плазме. В случае необходимости можно использовать иную зависимость для коэффициента поглощения в крыльях линий (например, степенную). При решении задач теплообмена излучением можно считать, что контур линии на фоне квазинепрерывного спектра с достаточной точностью находится по формулам (1.45).

Суммарный коэффициент поглощения в спектральном диапазоне $\Delta\omega$ с атомными линиями определяется по формуле

$$\kappa_\omega = \kappa_{\Delta\omega}^c + \sum_i^N \kappa_i(\omega_{0i}, \omega), \quad (1.46)$$

где $\kappa_{\Delta\omega}^c$ – фоновый коэффициент поглощения в квазинепрерывном спектре; $\kappa_i(\omega_{0i}, \omega)$ – коэффициент поглощения на частоте ω , обусловленный i -й линией с центром ω_{0i} ; N – число линий, попавших в $\Delta\omega$. Формула (1.46) определяет спектральный коэффициент поглощения в фиксированной точке ω шкалы волновых чисел. Эта же формула используется для построения подробной спектральной зависимости коэффициента поглощения в выделенном спектральном диапазоне $\Delta\omega$ (так называемого синтетического контура спектра коэффициента поглощения). С этой целью в спек-

спектральном диапазоне $\Delta\omega$ вводится подробная расчетная сетка по волновому числу, в каждой точке которой спектральный коэффициент поглощения находится по формуле (1.46). Расчетная сетка должна быть настолько подробной, чтобы контур каждой линии можно было описать без заметного искажения. Такая процедура расчета синтетического спектра коэффициента поглощения называется *методом line-by-line расчета*.

1.5.2. Расчет коэффициентов поглощения в молекулярных линиях

Задача вычисления контуров вращательных молекулярных линий возникает при построении синтетического контура коэффициентов поглощения и испускания, а также при проведении эталонных расчетов переноса излучения в однородных и неоднородных слоях молекулярных газов. Под эталонными понимаются наиболее точные и подробные расчеты, которые можно выполнить в вычислительной системе, и предназначенные для сравнения с ними результатов, полученных по различного рода приближенным моделям. В этом смысле соответствующие расчеты можно было бы назвать «точными».

В настоящее время наиболее полная информация по вращательным линиям двух- и многоатомных молекул, расположенных в инфракрасной области спектра, собрана в банке данных HITRAN (Rothman L.S., et al., 1983, 1992). Однако здесь представлены все необходимые данные для расчета интенсивностей и полуширин вращательных линий молекулярного спектра линий лишь для невысоких температур. Последний факт является принципиальным в вопросе возможности использования базы данных HITRAN для расчета излучения нагретых газов. Вращательные линии, возникающие в спектре поглощения молекулярных газов, за счет возрастания заселенностей колебательно-возбужденных состояний, не учтены в этой базе данных. Последнее время эта база данных пополняется такими вращательными линиями.

Анализ механизмов уширения вращательных линий молекулярного спектра показывает, что с достаточной точностью для

задач переноса теплового излучения, можно принимать в учет лишь два механизма уширения: ударный и доплеровский (Rothman L.S., et al., 1983, 1992; Гуди Р., 1966; Пеннер С.С., 1963).

Доплеровское уширение определяется по формуле (1.29), а ударное уширение вращательных линий – по соотношению, аппроксимирующему опытные данные (Пеннер С.С., 1963; Ludwig С.В., 1971):

$$\gamma_i^L = \sum_j b_{ij} p_j (273/T)^{1/2} + b_{ii} p_i (273/T), \quad (1.47)$$

где индексами i и j отмечены параметры поглощающей и уширяющих молекул; p – парциальное давление; b_{ij} – постоянная уширения; b_{ii} – константа резонансного уширения. При получении указанной аппроксимации полагалось, что составляющие уширения, обусловленные различными уширяющими молекулами, являются аддитивными. Зависимость $\gamma^L \sim pT^{-1/2}$ получается при использовании кинетической теории газов. Константа уширения b_{ij} находится по формуле

$$b_{ij} = 2.2 \times 10^{-2} D_i D_j \left(1/M_{ai} + 1/M_{aj} \right)^{1/2}, \quad (1.48)$$

где D_i, D_j – оптические диаметры, Å. Выполненное в работе (Кузнецова Л.А. и др., 1980) сопоставление оптических диаметров с кинетическими диаметрами столкновения показывает, что они достаточно близки. В табл. 1.10 представлены данные, заимствованные из работы (Кузнецова Л.А. и др., 1980). Из этой таблицы видно, что оптические диаметры могут сильно зависеть от уширяющих молекул. Поэтому кинетические диаметры столкновений следует использовать с большой осторожностью и только для оценочных расчетов. Вместе с этим, данных об уширении вращательных линий в электронно-колебательно-вращательных полосах настолько мало, что оценки с использованием кинетических диаметров являются вполне допустимыми. Кроме этого, еще следует иметь в виду возможность штарковского уширения вращательных линий, которое может оказаться существенным при $T \geq 8000$ К (для атмосферных давлений) (Breene R.G., 1968).

Таблица 1.10

**Оптические и кинетические эффективные диаметры
двухатомных молекул**

Молекула	Уширяющий газ	Оптический диаметр $D, \text{Å}$	Кинетический диаметр $\sigma_k, \text{Å}$
NO	NO	NO(γ) 3.9	3.09
O ₂	O ₂	O ₂ (S-R) 9.2	3.02
O ₂	O	O ₂ (S-R) 9.2	-
C ₂	CO	C ₂ (Sw) 7.5	-
C ₂	C, O	C ₂ (Sw) 21.5	-
C ₂	Ar	C ₂ (Sw) 8.3	-
CN	CO, N ₂	CN(V) 6.5	-
CO	-	-	3.23
Cl ₂	-	-	3.58
N ₂	-	-	3.22
H ₂	-	-	2.22

1.6. Расчет излучательных способностей в условиях локального термодинамического равновесия

Настоящий раздел носит справочный характер. Здесь приводятся формулы расчета излучательной способности горячих газов в условиях локального термодинамического равновесия, что очень часто требуется для оценок роли теплового излучения в полном энергетическом балансе.

Под *локальным термодинамическим равновесием* (ЛТР) применительно к задачам переноса теплового излучения понимается такое состояние излучающей и поглощающей среды, когда каждый элементарный физический объем этой среды находится в термодинамическом равновесии с контактирующими с ним другими элементарными физическими объемами, в результате чего состояние любой точки может быть охарактеризовано локальной температурой T . Такое приближение справедливо, когда столкновительные (термализующие) процессы между частицами среды происходят гораздо чаще, чем излучательные. Или, другими словами, на один акт испускания или поглощения излучения, прихо-

дящегося на выделенную частицу и изменяющего ее энергетическое состояние, приходится много столкновительных актов, которые выравнивают энергетическое распределение.

В случае применимости модели ЛТР испускание излучения элементарным физическим объемом можно описать с помощью функции Планка и закона Кирхгофа. Интенсивность спектрально-равновесного излучения абсолютно черного тела в вакууме задается формулой Планка

$$J_{b\nu} = \frac{2h\nu^3}{c_0^2 [\exp(h\nu/kT) - 1]}, \quad (1.49)$$

где ν – частота, с^{-1} . Используя связи $\nu = c_0\omega$, где ω – волновое число (обычно измеряется в см^{-1}) и $\nu = c_0/\lambda_0$, где λ_0 – длина волны излучения в вакууме (обычно измеряется в Å , мкм или нм), а также условия равенства спектральной энергии на соответствующих спектральных участках

$$J_{b\nu}d\nu = J_{b\omega}d\omega = -J_{b\lambda_0}d\lambda_0, \quad (1.50)$$

можно получить формулу Планка требуемой размерности:

$$J_{b\lambda_0} \cong \frac{1.191 \times 10^4}{\lambda_0^5 [\exp(14387/\lambda_0 T) - 1]}, \text{ Вт}/(\text{ср} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{мкм}),$$

$$J_{b\omega} \cong \frac{1.191 \times 10^{-12} \omega^3}{\exp(14387\omega/T) - 1}, \text{ Вт} \cdot \text{см}/(\text{ср} \cdot \text{см}^2). \quad (1.51)$$

Если излучение распространяется не в вакууме, а в среде с комплексным показателем преломления n^* , необходимо сделать коррекцию формул (1.49) с учетом того, что вместо c_0 в них должна входить скорость света $c = c_0/|n^*|$.

В соответствии с законом Кирхгофа спектральная интенсивность излучения $J_\omega(r)$, испускаемого в произвольном направлении элементарным физическим объемом, находящимся в термо-

динамическом равновесии, определяется функцией Планка $J_{b\omega}[T(r)]$ при температуре среды и спектральным коэффициентом поглощения $\kappa_{\omega}(r)$:

$$J_{\omega}(r) = \kappa_{\omega}(r) J_{b\omega}[T(r)]. \quad (1.52)$$

Отметим важный физический факт, что в условиях ЛТР спектральная интенсивность так же, как и планковская интенсивность, является изотропной функцией. Поэтому плотность интегрального потока абсолютно черного тела равна

$$W_b(T) = \int_0^{\infty} d\omega \int_0^{\infty} d\varphi \int_0^{\pi/2} J_{b\omega} \sin\theta \cos\theta d\theta = n^2 \tilde{\sigma} T^4, \quad (1.53)$$

где $\tilde{\sigma} \cong 5.67 \times 10^{-12}$ Вт/см² К – постоянная Стефана – Больцмана.

Для оценки и сравнения излучательных способностей различных смесей высокотемпературных газов используется характеристика, называемая степенью черноты. Степень черноты определяется отношением излучательной способности среды (в заданном направлении от объема заданной конфигурации) к соответствующей излучательной способности абсолютно черного тела. Если $J_{\omega}(r, \Omega)$ есть спектральная интенсивность излучения среды в точке пространства с радиус-вектором r в телесном угле $d\Omega$ вблизи направления Ω , то спектральная направленная степень черноты равна

$$\varepsilon_{\omega}(r, \Omega) = \frac{J_{\omega}(r, \Omega)}{J_{b\omega}(r)}. \quad (1.54)$$

Спектральная степень черноты полусферического однородного объема радиусом R равна отношению плотности спектрального потока от этого объема на единичную площадку в его основании к плотности потока абсолютно черного тела (рис. 1.14):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\omega, sf} &= (\pi J_{b\omega})^{-1} \int_0^R dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \kappa_{\omega} J_{b\omega} \exp(-\kappa_{\omega} r) \cos\theta \sin\theta d\theta = \\ &= \frac{\varepsilon'_{\omega, sf}}{\pi J_{b\omega}} = 1 - \exp(-\kappa_{\omega} R). \end{aligned} \quad (1.55)$$

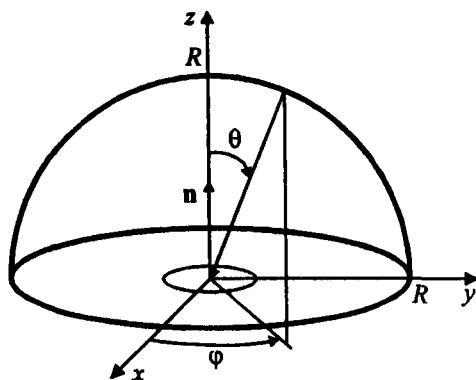


Рис. 1.14. К расчету полусферической степени черноты

По аналогии определяется спектральная степень черноты плоского однородного слоя (рис. 1.15), который считается однородным как в направлении нормали, так и в двух других направлениях (что позволяет использовать условия осевой симметрии):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\omega, pl} &= (\pi J_{b\omega})^{-1} \int_0^L dx \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \kappa_{\omega} J_{b\omega} \exp\left(-\frac{\kappa_{\omega} x}{\cos \theta}\right) \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{\varepsilon'_{\omega, pl}}{\pi J_{b\omega}} = 1 - 2E_3(\kappa_{\omega} L), \end{aligned} \quad (1.56)$$

где $E_n(x) = \int^1 \exp(-x/\mu) \mu^{n-2} d\mu$ – интегро-экспоненциальная функция n -го порядка.

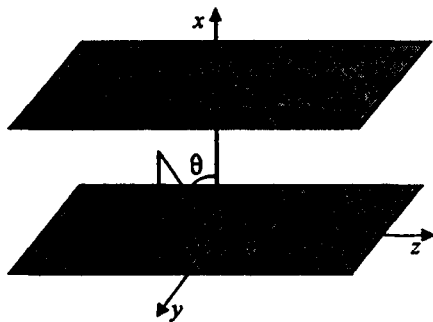


Рис. 1.15. К расчету степени черноты плоского слоя

Спектральные степени черноты, вводимые для характеристики излучения объемов других конфигураций, применяются гораздо реже, чем $\varepsilon_{\omega, sf}$ и $\varepsilon_{\omega, pl}$.

С использованием спектральных степеней черноты определяются соответствующие групповые и интегральные характеристики:

$$\varepsilon_{\Delta\omega} = \frac{1}{\bar{\sigma} T^4} \int_{\Delta\omega} \varepsilon_{\omega} d\omega, \quad \varepsilon = \frac{1}{\bar{\sigma} T^4} \int \varepsilon_{\omega} d\omega, \quad (1.55)$$

при расчете которых к точности определения спектральных коэффициентов поглощения предъявляются повышенные требования, вплоть до их расчета с использованием *line-by-line* метода.

ГЛАВА 2

ПРОСТЕЙШИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МОДЕЛИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

В данной главе рассмотрены простейшие вычислительные модели элементарных радиационных процессов с участием атомов и ионов. В отличие от более сложных моделей, рассматриваемых в последующих главах, для расчета сечений элементарных радиационных процессов не требуется знания волновых функций учитываемых квантовых состояний. Расчет сечений в этих методах производится либо с использованием квазиклассических приближений, либо по полуэмпирическим соотношениям, либо с использованием аналитических аппроксимаций волновых функций.

Подчеркнем, что использование квазиклассического подхода к расчету спектральных оптических свойств горячих газов и низкотемпературной плазмы (до температур ~ 20000 К) является вполне оправданным для рассматриваемого класса задач аэрофизики.

2.1. Расчет сечений поглощения в непрерывном спектре с участием атомных частиц

Сечение поглощения $\tilde{\sigma}_k$ является мерой вероятности поглощения излучения одной частицей сорта k . Обычно сечение измеряется в см^2 и, будучи умноженным на концентрацию N_k этих частиц в 1 см^3 , дает объемный коэффициент поглощения, непосредственно используемый в уравнении переноса излучения $\kappa_k = \tilde{\sigma}_k N_k \text{ см}^{-1}$. В расчетах течений неоднородных газовых смесей вместо числовых концентраций удобнее использовать парци-

альное давление компонент p_k (в атм), тогда объемный коэффициент поглощения находится по формуле

$$\kappa_k = \sigma_k p_k, \quad (2.1)$$

где σ_k – сечение, отнесенное к единичному давлению k -й компоненты ($1/(\text{см} \cdot \text{атм})$). Связь между сечениями $\tilde{\sigma}_k$ и σ_k следующая:

$$\tilde{\sigma}_k \cong 1.36 \times 10^{-22} T \sigma_k, \quad (2.2)$$

где T – температура, К. При получении (2.2) использовалось соотношение $p_k = N_k kT$, где $k = 1.38 \times 10^{-16}$ эрг/К – постоянная Больцмана.

Ниже представлены вычислительные модели сечений поглощения в непрерывном спектре, которые целесообразно использовать для расчетов оптических моделей газов и плазмы при решении задач радиационной газо- и плазмодинамики.

2.1.1. Приближенные аналитические методы расчета сечений фотоионизации атомов и ионов

В соответствии с (Авилова И.В., 1970; Амбарцумян В.А., 1934; Амбарцумян В.А. и др., 1952) вся совокупность энергетических уровней атомов и ионов разбивается на две группы. Первая группа – это уровни, фотоионизация с которых учитывается индивидуально. Фотоионизация с уровней второй группы учитывается интегрально совместно со свободно-свободными переходами в поле соответствующего остаточного иона. Вопрос о выборе граничного уровня, разделяющего систему квантовых уровней энергии атомов на две части, решается для разных атомов или ионов в каждом конкретном случае с учетом особенности задачи. Например, в работе (Авилова И.В., 1970) для атомов азота и кислорода выделены следующие группы уровней:

- 1) уровни основных конфигураций $2s^2 2p^3$ и $2s^2 2p^4$, с каждого из которых атом фотоионизируется с образованием иона в основном или возбужденном состояниях;
- 2) уровни $3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 5p$ атомов азота и кислорода;
- 3) уровни выше $5p$.

Фотоионизация с уровней 1-й и 2-й групп учитывалась индивидуально, а с уровнем 3-й группы – интегрально. Однако в этой же книге приводится рекомендация, в соответствии с которой интегральные формулы можно применять также и для уровней 2-й группы. Это можно делать, если к точности результатов вблизи порогов фотоионизации с основных состояний не предъявляются повышенные требования.

С использованием указанного подхода были предложены приближенные формулы для расчета фотоионизации водородоподобных и неводородоподобных атомов.

Фотоионизация водородоподобных атомов совместно с поглощением излучения при свободно-свободных переходах рассчитывается по формуле (Зельдович Я.Б. и др., 1966):

$$\sigma(\omega, T) \cong 0.01 \frac{z^4}{\omega^3} \left[\sum_{n=n^*}^{N_n} \frac{\exp(x_n - x_1)}{n^3} + \frac{\exp(-x_1)}{2x_1} \right], \text{ см}^2 \quad (2.3)$$

или

$$\begin{aligned} \kappa(\omega, T) &\cong 5.8 \times 10^4 \frac{\omega_1^3 z^4}{\omega^3 T} \left[\sum_{n=n^*}^{N_n} \frac{\exp(x_n - x_1)}{n^3} + \frac{\exp(-x_1)}{2x_1} \right] = \\ &= 0.725 \times 10^{20} \frac{z^4}{\omega^3 T} \left[\sum_{n=n^*}^{N_n} \frac{\exp(x_n - x_1)}{n^3} + \frac{\exp(-x_1)}{2x_1} \right], \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}, \quad (2.4) \end{aligned}$$

$$x_n = \frac{1.44\omega_n}{T}, \quad \omega_n = I - E_n, \quad E_n = -\frac{Ry}{n^2}, \quad Ry = \omega_1, \quad (2.5)$$

где n – главное квантовое число; ω – волновое число, см^{-1} ; T – температура, К; $x = 1.44 \cdot \omega/T$; N_n – наибольший уровень, учитываемый индивидуально; I, E_n – потенциал ионизации и энергия возбуждения, см^{-1} ; $Ry = 109737 \text{ см}^{-1}$. В (2.4) суммирование начинается с уровня n^* , для которого выполняется условие $\omega > \omega_n^*$.

Заметим, что расчетные соотношения (2.3) – (2.5) получены с использованием простейшей квазиклассической теории радиационных процессов (см. ниже, п. 2.1.4.). При этом в расчетах фо-

тоионизации водородоподобных атомов волновые числа порогов фотоионизации можно не рассчитывать по формуле (2.5), а брать их из экспериментальных данных (Moore Ch., 1949, 1952, 1958). Это значительно повышает точность расчетных данных, так как неявно учитывает специфику квантовых уровней.

Для расчета коэффициента фотоионизационного поглощения k -го неводородоподобного атома из низколежащих квантовых энергетических состояний в расчете на одну частицу (сечение поглощения), используется следующая формула:

$$\sigma_k(\omega, T) = C_k(T) \sum_{j=1}^{N_k} \chi[\omega - (\omega_j - \Delta\omega)] \sigma_j g_j \exp\left(-1.44 \frac{E_j}{T}\right), \quad (2.6)$$

$$C_k(T) = 7340/TQ(T),$$

где ω – волновое число, см^{-1} ; ω_j – волновое число j -го порога, см^{-1} ;

$$\chi(\omega - \omega_j) = \begin{cases} 1, & \omega > \omega_j \\ 0, & \omega < \omega_j \end{cases} \quad \text{– функция Хэвисайда;}$$

σ_j – сечение фотоионизации с j -го уровня, МБарн (1Барн = 10^{-24} см^2); g_j – статистический вес j -го уровня; E_j – энергия возбуждения j -го уровня, см^{-1} ; T – температура, К; N_k – число уровней, фотоионизация с которых учитывается индивидуально; $\Delta\omega$ – сдвиг порога фотоионизации; $Q(T)$ – статистическая сумма.

Простейший способ расчета по формуле (2.6) состоит в выборе постоянных, не зависящих от ω сечений σ_j (см., например, работу (Авилова И.В. и др., 1970)). Числовые значения величин, входящих в формулу (2.6), приведены в табл. 2.1 для атомов N, O (Авилова И.В. и др., 1970), C (Авилова И.В. и др., 1970 (6); Стулов В.П. и др., 1995), Ag (Кацнельсон С.С. и др., 1985). В работе (Авилова И.В. и др., 1970) рекомендуется перейти к статистической сумме по состояниям остаточного иона. Однако при построении вычислительной системы удобнее использовать в расчетном модуле лишь функции, характеризующие сам атом. Статистическая сумма по состояниям атомов рассчитывается с использованием данных (Гурвич Л.В. и др., 1978)

$$\begin{aligned}
 F_0 &= \varphi_1 + \varphi_2 \ln x + \varphi_3 x^{-2} + \varphi_4 x^{-1} + \varphi_5 x + \varphi_6 x^2 + \varphi_7 x^3, \\
 F_{ur} &= F_0/8,314 - 2.5 \ln T - 1.5 \ln M + 3.66487, \\
 Q(T) &= \exp(F_{ur}), \quad x = T/10^4,
 \end{aligned}
 \tag{2.7}$$

где φ_i – аппроксимирующие коэффициенты полного термодинамического потенциала; M – молекулярный вес. Пример набора аппроксимирующих коэффициентов φ_i приведен в табл. 2.2. Следует иметь в виду, что числовые значения этих коэффициентов даны в работе (Гурвич Л.В. и др., 1978) для двух температурных диапазонов.

Таблица 2.1

К расчету сечений фотоионизации с использованием простейших полуэмпирических моделей

k	N_k	$\omega_j,$ 10^4 см^{-1}	σ_j	$g = (2L+1)(2S+1)$	$E_j,$ 10^4 см^{-1}	$\Delta\omega, 10^4 \text{ см}^{-1}$
N	4	8.8374	10	6	2.884	0.125
		9.7986	9	10	1.9228	—
		11.3302	3	10	1.9228	—
		11.7214	10	4	0	—
O	2	10.984	5	9	0	—
		13.665	7	9	0	—
C	3	6.955	5	1	2.165	—
		8.100	5	5	1.02	—
		9.120	10	9	0	—
Ar	1	12.7109	30	1	0	—

Выбор постоянного сдвига порогов фотоионизации $\Delta\omega$ в табл. 2.1 сделан по аналогии с работой (Авилова И.В. и др., 1970), где он оценивался по формуле Инглиса – Теллера.

Когда зависимость сечения от волнового числа достаточно сильная, то для σ_j могут использоваться аппроксимации результатов квантово-механических расчетов или экспериментов. Например, сечение фотоионизации с основного состояния атома Si ($3p^2 3P^0$) в диапазоне энергий $\varepsilon = 8.15 \div 25$ эВ ($1 \text{ эВ} = 8065.48 \text{ см}^{-1}$)

приближенно представляется в виде $\sigma_{Si} = 10/\epsilon^5$ (при $\epsilon > 25$ эВ сечение остается практически постоянным). В работе (Стулов В.П. и др., 1995) даны аппроксимации частотной зависимости σ_j для атомов водорода и гелия.

Таблица 2.2

Набор аппроксимирующих коэффициентов φ_j

φ_j	O ₂	N ₂	NO	N
φ_1	275.9731	290.2077	302.5389	198.223
φ_2	27.5555	49.8574	42.4788	14.0513
φ_3	0.0199807	-0.0864349	-0.0383269	0.0393072
φ_4	-0.51314	3.40046	1.74255	-1.33253
φ_5	27.6187	-28.9402	-13.8244	10.3337
φ_6	-9.199	13.15	8.479	-0.125
φ_7	1.152	-1.9	-1.628	-0.337

В работе (Seaton M.J., 1958) получена аппроксимационная формула для сечений фотоионизации с основных состояний атомов и ионов, внешняя оболочка которых содержит только p -электроны. Предложена следующая формула:

$$\sigma_j = C_j B_j \left[\alpha_j (\omega/\omega_j)^{-s_j} - (1-\alpha_j)(\omega-\omega_j)^{-s_j-1} \right]. \quad (2.8)$$

Значения коэффициента C_j определяются термом исходного состояния атома (SL) и родительским термом иона (S^*L^*), образующегося при фотоионизации, а также числом эквивалентных p -электронов (N). Значения этого коэффициента, а также аппроксимационные коэффициенты B_j , s_j , α_j даны в табл. 2.3.

В работе (Бойко Ю.В. и др., 1988) выявлено подобие сечений одноэлектронных фотоионизационных переходов и приведены аппроксимирующие соотношения для фотоионизации с основных и низковозбужденных состояний валентных электронов и состояний электронов внутренних оболочек атомов и ионов CI–CIV, NI–NV, OI–OVI, FeI–FeVII, которые удобно использовать в задачах радиационной газо- и плазмодинамики.

Таблица 2.3 а

Значение коэффициента C_j в формуле Ситона

$SL-S^*L^*$	N	C_j	$SL-S^*L^*$	N	C_j
${}^2P-{}^1S$	1	1/3	${}^3P-4S$	4	4/9
${}^3P-{}^2P$	2	2/3	${}^3P-{}^2D$	4	5/9
${}^1D-{}^2P$	2	2/3	${}^3P-{}^2P$	4	1/3
${}^1S-{}^2P$	2	2/3	${}^1D-{}^4S$	4	0
${}^4S-{}^3P$	3	1	${}^1D-{}^2D$	4	1
${}^4S-{}^1D$	3	0	${}^1D-{}^2P$	4	1/3
${}^4S-{}^1S$	3	0	${}^1S-{}^4S$	4	0
${}^2D-{}^3P$	3	1/2	${}^1S-{}^2D$	4	0
${}^2D-{}^1D$	3	1/2	${}^1S-{}^2P$	4	4/3
${}^2D-{}^1S$	3	0	${}^2P-{}^3P$	5	1
${}^2P-{}^3P$	3	1/2	${}^2P-{}^1D$	5	5/9
${}^2P-{}^1D$	3	5/18	${}^2P-{}^1S$	5	1/9
${}^2P-{}^1S$	3	2/9	${}^1S-{}^2P$	6	2

Таблица 2.3 б

Значение коэффициентов B_j, s_j, α_j в формуле Ситона

Атом (ион)	B_j	s_j	α_j
Ne	2.5	1	4.3
F	3.7	1	4.1
O	5.7	1	4.0
N	8.9	1	3.1
C	15.8	1	1.9
Na ⁺	4.0	2	4.2
Ne ⁺	5.0	2	3.8
F ⁺	6.4	2	3.1
O ⁺	8.1	2	2.45
N ⁺	10.2	2	2.06
C ⁺	12.9	2	1.67

На основе проведения квантово-механических расчетов по полуэмпирическому методу, подробно описанному в работе

(Вайнштейн Л.А. и др., 1973), авторы (Бойко Ю.В. и др., 1988) предложили следующие формулы:

$$\begin{aligned}\sigma_j &= N\sigma_{j0}F_{nl}\left(v/v_{j0}\right), \quad n=2, l=s, p, \\ F_{2s} &= 0.617\left(v/v_{j0}\right)^{-2.22}, \quad v_{j0}=3.16\exp(0.345z), \\ \sigma_{j0} &= 1.21 \times 10^{-2} \exp\left[6.9 \times 10^{-3} \dot{I}_j + 3 \times 10^{-3} (\dot{I}_0 - 40.25)^2\right], \\ F_{2p} &= \exp\left\{4.69 \cos\left[0.638 \ln\left(v/v_{j0}\right)\right]\right\}, \\ v_{j0} &= 1.22 \exp(0.345z), \quad \sigma_{j0} = (\dot{I}_j/\dot{I}_0)^{0.5} \exp(-0.46z), \quad (2.9)\end{aligned}$$

где z – заряд ядра; I_j – энергия ионизации данного состояния; I_0 – энергия ионизации основного состояния нейтрального атома данного элемента (Cl, Ni, OI, FeI). Здесь частота излучения ν и энергия ионизации выражаются в эВ.

Фотоионизация атомов и ионов с возбужденных состояний рассчитывается, как правило, с использованием аналитических методов. Один из простейших методов состоит в использовании интегральной формулы (Биберман Л.М. и др., 1967 (б)), в которой фотоионизация с возбужденных состояний учитывается совместно со свободно-свободными переходами в полях положительных ионов. Эта формула достаточно хорошо обоснована для высоко-возбужденных (водородоподобных) состояний, например у атомов N и O выше 5p. Однако, решая задачи лучистого теплообмена, можно использовать формулы и для более низких состояний (3s, 3p) (Авилова И.В. и др., 1970). Коэффициент поглощения атома, отнесенный к своему парциальному давлению, имеет вид

$$\sigma(\omega, T) = C_2(T) \xi(\tilde{\omega}) \left[U(\tilde{\omega}, T) - 1 + g(\tilde{\omega}, T) \right] \tilde{\omega}^{-3}, \text{ см}^{-1} \text{ атм}^{-1},$$

$$g(\tilde{\omega}, T) = 1 + 0.276 \left[a(\tilde{\omega}, T) + \sqrt{5 + a^2(\tilde{\omega}, T)} \right],$$

$$a(\tilde{\omega}, T) = \ln \left[0.0194z (T/10000)^{3/2} / \tilde{\omega} \right],$$

$$U(\bar{\omega}, T) = \exp\left(1.44 \times 10^4 \frac{\bar{\omega}^*}{T}\right), \quad \bar{\omega}^* = \begin{cases} \bar{\omega} + \Delta\bar{\omega}, & \bar{\omega} < \bar{\omega}_p - \Delta\bar{\omega}, \\ \bar{\omega}_p, & \bar{\omega} > \bar{\omega}_p - \Delta\bar{\omega}, \end{cases}$$

$$C_2(T) = 487z^2 \frac{Q^+(T)}{Q(T)} \exp\left(-11610 \frac{I_0}{T}\right), \quad (2.10)$$

где $Q^+(T)$ – статистическая сумма по состояниям остаточного иона; $g(\bar{\omega}, T)$ – фактор Гаунта (аппроксимация дана в работе (Авилова И.В. и др., 1970)); $\bar{\omega}_p$ – пороговое волновое число, которое определяет последнее дискретное состояние, учитываемое индивидуально; $\Delta\bar{\omega}$ – смещение порогов фотоионизации, обусловленное нереализуемостью верхних дискретных уровней вследствие взаимодействия атомов, ионов и электронов между собой. Оценка $\Delta\bar{\omega}$, выполненная в работе (Авилова И.В. и др., 1970) для возбужденных уровней, дает величину порядка 0.55, которая обычно принимается постоянной. Здесь и далее $\bar{\omega}$, $\bar{\omega}_p$ и $\Delta\bar{\omega}$ задаются в 10^4 см^{-1} . На самом деле величина $\Delta\bar{\omega}$ зависит от концентраций частиц, температуры и давления. Функция $\xi(\bar{\omega})$ характеризует отличие поглощения многоэлектронного атома от поглощения атома водорода на уровне с соответствующим главным квантовым числом n . В работе (Биберман Л.М. и др., 1967 (б)) приведены результаты расчетов $\xi(\bar{\omega})$ для многих атомов. Аппроксимация $\xi(\bar{\omega})$ в виде $\xi(\bar{\omega}) = 1 - b \sin(c\bar{\omega})$ дана в работе (Авилова И.В. и др., 1970) для O, N, N⁺ и в (Авилова И.В. и др., 1970 (б)) для атома C. Константы, рекомендуемые для использования в (2.10), даны в табл. 2.4. Применительно к атомам Ag и Si функция $\xi(\bar{\omega})$, аппроксимирующая результаты (Биберман Л.М. и др., 1967), имеет вид (Суржииков С.Т., 1992)

$$\xi_{\text{Ar}}(\bar{\omega}) = \begin{cases} 1 - 0.2 \sin \pi \bar{\omega}, & 0.25 < \bar{\omega} < 1, \\ 1 + 1.1 \sin \left[\pi (\bar{\omega} - 1) / 5.34 \right], & 1 < \bar{\omega} < 5; \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\xi_{\text{Si}}(\bar{\omega}) = \begin{cases} 1 - 0.2 \sin (\pi \bar{\omega} / 1.33), & 0.25 < \bar{\omega} < 1.33, \\ 1 + \sin \left[\pi (\bar{\omega} - 1.33) / 7.34 \right], & 1.33 < \bar{\omega} < 5. \end{cases}$$

В ряде работ при интерпретации экспериментальных данных функции $\xi(\bar{\omega})$ уточнялись (см., например, (Батенин В.М. и др., 1977)).

Таблица 2.4

Аппроксимирующие коэффициенты сечений фотоионизации атомов и ионов с возбужденных состояний

Атом (ион)	I	b	c	$\Delta\omega, 10^4 \text{ см}^{-1}$	$\omega_p, 10^4 \text{ см}^{-1}$
N	14.53	0.78	0.52	0.55	3.40
O	13.62	0.81	0.41	0.55	3.60
C	11.26	0.72	0.54	0.55	3.05
N ⁺	29.60	0.48	0.22	0.55	19.2
Ar	15.76	—	—	0.55	1.544
Si	8.15	—	—	0.55	2.606

Формулу (2.10) удобно использовать в расчетах радиационных характеристик низкотемпературной плазмы сложного химического состава. Однако неудобством этой модели является необходимость задания аппроксимации частотной зависимости ξ -фактора, т.е., фактически, наличия решения, полученного каким-либо иным расчетным методом (или наличия экспериментальных данных). Этот недостаток позволяет устранить полуэмпирическая модель, предложенная в работе (Суржиков С.Т., 1992), представленная в следующем разделе.

На рис. 2.1–2.4 показаны сечения фотоионизации атомов N и O, заимствованные из работ (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971), и рассчитанные по методу, предложенному в (Peach G.A., 1970). Связь между размерностями представленных сечений поглощения обсуждается в п. 2.2. Подчеркнем, что приведенные на рис. 2.1, 2.3 и 2.4 сечения фотоионизации включают в себя свободно-свободное поглощение в полях остаточных ионов, т.е. в полях ионов, образующихся при фотоионизации исходного атома. Согласно методике (Каменщиков В.А. и др., 1971), указанные процессы учитываются раздельно.

На рис. 2.2 также показано спектральное распределение функции Планка при температуре $T = 10000 \text{ К}$, что позволяет оценить спектральную излучательную способность в условиях ЛТР.

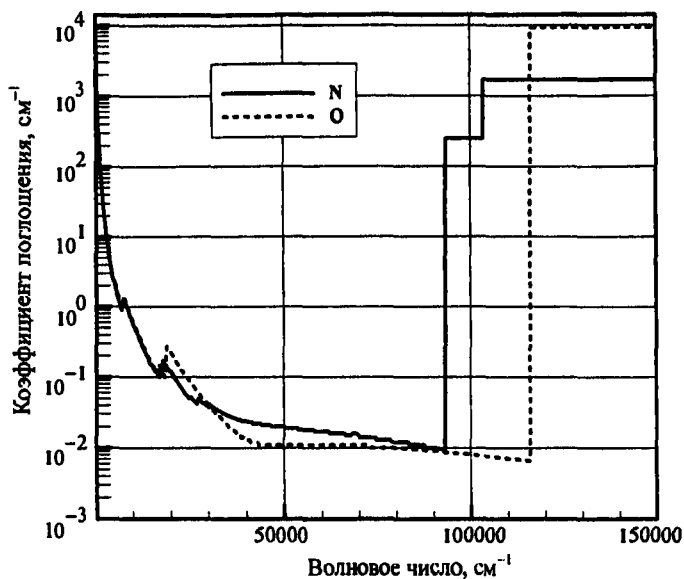


Рис. 2.1. Коэффициенты поглощения при $T=10000$ К, заимствованные из работы (Авилова И.В. и др., 1970)

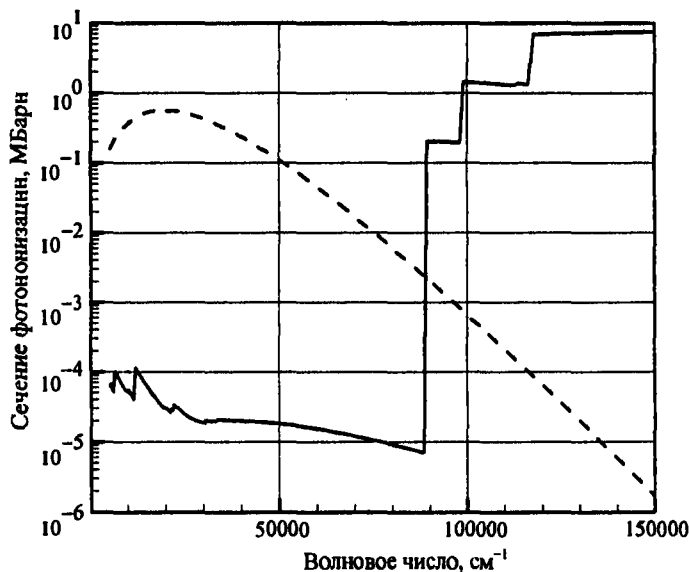


Рис. 2.2. Сечение фотоионизации при $T=10000$ К, заимствованное из работы (Каменщиков В.А. и др., 1971). Пуиктиром показана функция Планка

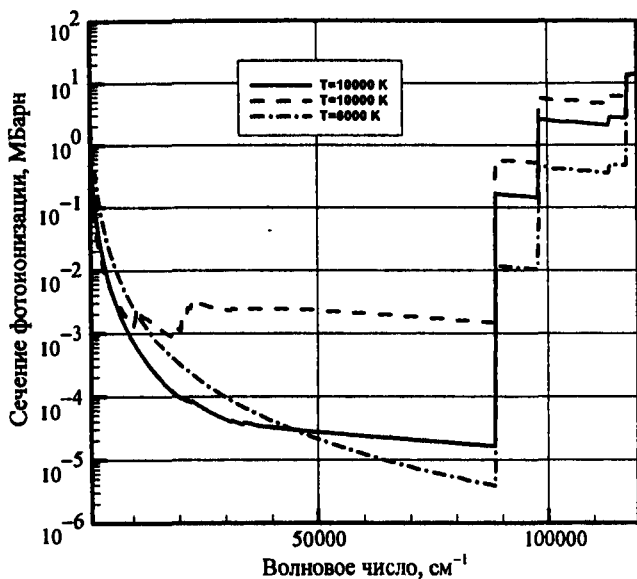


Рис. 2.3. Сечения фотоионизации атома N, рассчитанные по методике (Peach G.A., 1970)

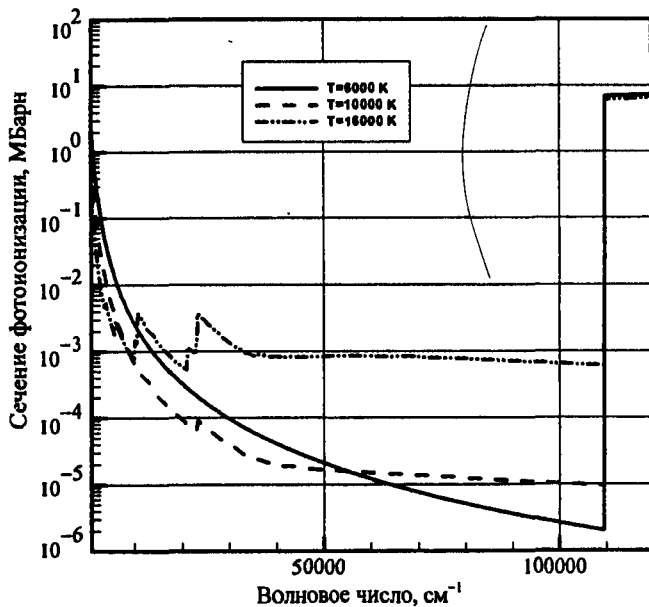


Рис. 2.4. Сечения фотоионизации атома O, рассчитанные по методике (Peach G.A., 1970)

2.1.2. Полуэмпирическая модель поглощения в непрерывном спектре, обусловленного фотоионизацией и тормозными процессами в поле остаточного иона

Расчетная формула получена с использованием квазиклассической теории Унзольда – Крамерса, в которой используются экспериментальные данные по уровням энергии атомных частиц, приведенные в работах (Moore Ch., 1949, 1952, 1958). Используется следующая формула:

$$\kappa_{\omega}^{bf+ff} = 475.9 \frac{P}{\tilde{T}} \cdot \frac{z^2}{\tilde{\omega}^3} \left[1.44 \sum_{m=m^*}^{M^*-1} C_m^{ff} \left(\frac{d\tilde{\omega}}{dm} \right)_m \exp \left(-1.44 \frac{\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_m}{\tilde{T}} \right) + \right. \\ \left. + \tilde{T} \exp \left(-1.44 \frac{\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_{M^*}}{\tilde{T}} \right) \right], \text{ см}^{-1}, \quad (2.12)$$

$$\tilde{T} = \frac{T}{10^4}, \quad \tilde{\omega} = \frac{\omega}{10^4}, \quad \omega_m = I - E_m,$$

где T – температура, К; ω – волновое число, см^{-1} ; I , E_m – потенциал ионизации и энергия m -го уровня, см^{-1} ; C_m^{ff} – угловой коэффициент, величина которого определяется конфигурацией m -го энергетического уровня. На рис.2.5 показана условная схема энергетических уровней, поясняющая используемые величины.

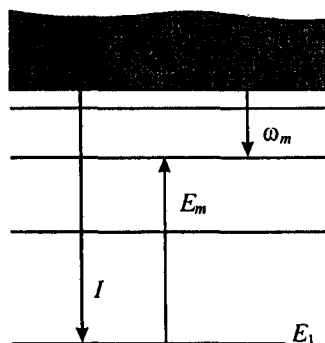


Рис. 2.5. Схема энергетических уровней атомов

Как отмечалось, формула (2.12) основана на теории Унзольда–Крамерса. Здесь учтено фотоионизационное поглощение с дисперсных уровней энергии $m = m^*, m^* + 1, \dots, M^* - 1$ (первое слагаемое в правой части (2.12)), фотоионизационное поглощение с уровней энергии, расположенных выше уровня M^* , совместно с тормозными процессами электронов в полях ионов (второе слагаемое в правой части (2.12)).

Уровень m^* , с которого начинается суммирование, отвечает первому возбужденному уровню. А уровень M^* , которым завершается суммирование, выбирается достаточно близким к ионизационному пределу.

Производная $d\tilde{\omega}/dm$, присутствующая в (2.12), появляется как следствие предположения о непрерывной зависимости величины $\tilde{\omega}$ от номера энергетического уровня. Чем ближе уровень к ионизационному пределу, тем с большей обоснованностью можно использовать такую модель. Для низколежащих уровней эта модель не имеет под собой физического обоснования. Однако удивительным является то, что формальное ее использование для низколежащих уровней, в том числе для уровней основного состояния, позволяет получить вполне приемлемые результаты, не уступающие по точности тем, которые получаются с использованием других приближенных моделей. Тем не менее, пользоваться данным соотношением, как и любой другой полуэмпирической формулой, следует с осторожностью.

Производная $d\tilde{\omega}/dm$ может рассчитываться с использованием следующей аппроксимации:

$$\frac{d\tilde{\omega}}{dm} \approx 2 \frac{\omega_m}{n^*(m)} [n^*(m+1) - n^*(m)], \quad n^*(m) = \sqrt{\frac{I}{\omega_m}}, \quad (2.13)$$

где I – потенциал ионизации, соответствующий данному энергетическому состоянию m , а значения волновых чисел отдельных уровней берутся из экспериментальных данных (Moore Ch., 1949, 1952, 1958). Расчеты спектральных коэффициентов поглощения, представленные в данной книге, выполнены с использованием полуэмпирической модели (2.12), (2.13). Заметим, что модели подобного типа являются весьма удобными для их использования в

программных кодах, предназначенных для расчета спектральных оптических свойств многокомпонентных газовых смесей. Еще одним достоинством таких моделей является простота их обобщения на случай неравновесного излучения. Пример расчета сечения фотоионизации атома водорода представлен на рис.2.6.

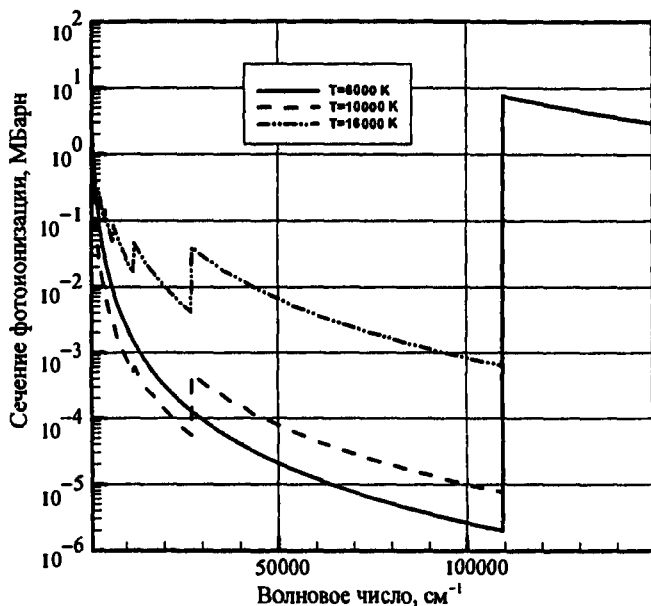


Рис.2.6. Сечения фотоионизации атома Н, рассчитанные по полуэмпирической методике

Представленные способы расчета являются полуэмпирическими аппроксимирующими методами. Достоинство таких методов состоит в их высокой экономичности, и именно такие методы целесообразно применять в расчетных кодах, непосредственно используемых при решении задач динамики излучающего газа. Недостатком этих методов является то, что они не обладают общностью и универсальностью. Каждому элементарному радиационному процессу ставится в соответствие своя математическая модель. Обилие учитываемых радиационных процессов и разных вариантов моделей одного и того же процесса приводит к усложнению программной системы в целом.

Проблему универсальности моделей позволяют решить методы, развитые в атомной спектроскопии, среди которых наибольшее распространение получили методы Хартри–Фока (Хартри Д., 1960; Фок В.А., 1976; Груздев П.Ф., 1990). Среди программных реализаций методов Хартри–Фока отметим работы (Амусья М.Я. и др., 1983; Барановский В.И. и др., 1976; Чернышева Л.В. и др., 1971; Иванова А.Н. и др., 1975).

Однако большинство этих методов чрезвычайно трудоемки для использования в системах вычислительного эксперимента в механике излучающего газа. Такие методы могут применяться лишь для предварительных расчетов, позволяющих построить подробную спектральную зависимость оптических коэффициентов, или получить данные для использования в аппроксимирующих методах. Кроме этого, нельзя не учитывать, что эксплуатация подобного рода программ требует определенной квалификации в области атомной спектроскопии. Отметим также программный комплекс АТОМ (Вайнштейн Л.А. и др., 1986), реализующий метод (Вайнштейн Л.А., 1961; Вайнштейн Л.А. и др., 1979), который сочетает в себе разумную строгость и эмпиризм.

В астрофизических исследованиях и прикладной спектроскопии широкое распространение получил полуэмпирический метод квантового дефекта.

2.1.3. Методы квантового дефекта

Исходная формулировка метода квантового дефекта Берджесса и Ситона дана в работе (Burgess A., et al., 1960). Этот метод является наиболее широко используемым полуэмпирическим методом расчета фотоионизационного поглощения возбужденных атомных состояний. Многочисленными исследованиями установлено, что этот метод, как правило, дает хорошую точность расчетных данных для легких и средних атомов. Точность метода квантового дефекта вполне удовлетворяет требованиям, предъявляемым к оптическим моделям динамики излучающего газа. По крайней мере, до настоящего времени не известны какие-либо

случаи, противоречащие этому утверждению. В указанной работе предложено следующее расчетное соотношение:

$$\sigma_{nlLS} = \frac{4\pi\alpha a_0^2}{3} \frac{I_{nlLS} + k^2}{I_{nlLS}^2} \sum_{L'=L, L\pm 1} \cdot \sum_{l'=l\pm 1} C_{ll'} \left| g(n^*, l; \epsilon', l') \right|^2, \text{ см}^2, \quad (2.14)$$

$$C_{ll'} = l_{\max} q \left| G_{S'L'}^{SL} \right| (2L' + 1) W^2(l, l', L, L'; 1, L'), \quad (2.15)$$

где a_0 – радиус Бора; α – постоянная тонкой структуры; I_{nlLS} – потенциал ионизации терма LS , в единицах Ry ; $I_{nlLS} = (I_0^{S'L'} - E_{nl})/Ry$; $I_0^{S'L'}$ – потенциал ионизации, соответствующий родительскому терму, см^{-1} ; E_{nl} – энергия терма, с которого рассчитывается фотоионизация, см^{-1} ; k^2 – кинетическая энергия выбитого электрона в единицах Ry ; $k^2 = (\omega - \omega_{nl})/Ry$, ω – волновое число (см^{-1}), при котором определяется сечение фотоионизации; $\omega_{nl} = I_0^{S'L'} - E_{nl}$ – волновое число (см^{-1}), соответствующее порогу фотоионизации с рассматриваемого уровня nl ; $Ry = 109737 \text{ см}^{-1}$ – постоянная Ридберга; q – число эквивалентных электронов во внешней оболочке атома; $G_{S'L'}^{SL}$ – генеалогический коэффициент (при возбуждении неэквивалентных электронов $G_{S'L'}^{SL} = 1$, $q = 1$); $W^2(l, l', L, L'; 1, L')$ – коэффициент Ракаха; $l_{\max} = \max(l, l')$; $g(n^*, l; \epsilon', l')$ – нормированный радиальный интеграл. Используемые здесь понятия атомной спектроскопии обсуждаются в главе 6.

Коэффициенты $C_{ll'}$ определяются конфигурацией оптического электрона (т.е. электрона, совершающего квантовый переход под воздействием электромагнитного излучения). Выделяют три случая, представляющие наибольший практический интерес.

1-й случай. Пусть начальная конфигурация содержит замкнутую оболочку с одним nl -электроном над ней, тогда

$$C_{ll'} = C(l \rightarrow l') = \frac{l_{\max}}{2l + 1}, \quad l_{\max} = \max(l, l'). \quad (2.16)$$

2-й случай. Пусть начальное состояние задано конфигурацией $(\alpha S'L')nlSL$, где $(\alpha S'L')$ характеризует родительский

терм. Так как при переходе электрона в новое состояние родительский терм не может измениться $(\alpha S^*L^*)_l = (\alpha S^*L^*)_{l'}$, то

$$C_{ll'} = C_{ll'} (S^*L^*lSL \rightarrow S^*L^*l'SL') = \\ = (2l+1)(2l'+1) W^2(l, l', L, L'; 1, L^*) C(l \rightarrow l'), \quad (2.17)$$

где W^2 – коэффициент Ракаха. Значения коэффициентов Ракаха приведены в п. 6.2.5 (см. также (Грим Г., 1969; Зар Р., 1993)). Угловые коэффициенты C_l удовлетворяют правилу сумм:

$$\sum_{L'} C_{ll'} (S^*L^*lSL \rightarrow S^*L^*l'SL') = C(l \rightarrow l'). \quad (2.18)$$

Поэтому в следующих двух случаях можно положить $C_l = C(l \rightarrow l')$:

- 1) если радиальный интеграл не зависит от L' ;
- 2) если только одна величина L' разрешена соответствующим правилом отбора.

Заметим, что часто в расчетах сечений фотоионизации используется правило сумм (2.18). Тогда в формуле (2.14) остается только суммирование по l' .

3-й случай. Фотоионизация конфигурации nl^q эквивалентных электронов. Пусть начальное состояние nl^qSL , а конечное состояние – $nl^{q-1}S^*L^*kl'SL'$, тогда

$$C_{ll'} = C_{ll'} (l^qSL \rightarrow l^{q-1}S^*L^*l'SL') = \\ = q \left| \left(l^q SL | l^{q-1} (S^*L^*) lSL \right) \right|^2 C(S^*L^*lSL \rightarrow S^*L^*l'SL'), \quad (2.19)$$

где $\left| \left(l^q SL | l^{q-1} S^*L^* lSL \right) \right|^2 = G_{S^*L^*L'}^{SL}$ – генеалогический коэффициент.

Если $q = 2$, то $G_{S^*L^*L'}^{SL} = 1$.

Если просуммировать (2.19), то получим

$$C_{ll'} (l^qSL \rightarrow l^{q-1}S^*L^*l') = \sum_{L'} C(l^qSL \rightarrow l^{q-1}S^*L^*l'SL'). \quad (2.20)$$

Тогда $C(l^qSL \rightarrow l^{q-1}S^*L^*l') = q G_{S^*L^*L'}^{SL} (l-l')$, (2.21)

следовательно

$$\begin{aligned}
 C_{ll'} &= C(l^q SL \rightarrow l^{q-1} S^* L^* l' SL') = \\
 &= (2l+1)(2l'+1) W^2(l, l', L, L'; 1, L^*) q G_{S^* L^*}^{SL} C(l \rightarrow l') = \\
 &= (2l+1)(2l'+1) W^2(l, l', L, L'; 1, L^*) C(l^q SL \rightarrow l^{q-1} S^* L^* l'). \quad (2.22)
 \end{aligned}$$

Значения коэффициентов $C(l^q SL \rightarrow l^{q-1} S^* L^* l')$ приведены в табл. 2.5.

Таблица 2.5

Угловые коэффициенты $C(l^q SL \rightarrow l^{q-1} S^* L^* l')$

q	SL	$S^* L^*$	C	q	SL	$S^* L^*$	C
1	2P	1S	1/3	4	3P	4S	4/9
2	3P	2P	2/3	4	3P	2D	5/9
2	1D	2P	2/3	4	3P	2P	1/3
2	1S	2P	2/3	4	1D	4S	0
3	4S	3P	1	4	1D	2D	1
3	4S	1D	0	4	1D	2P	1/3
3	4S	1S	0	4	1S	4S	0
3	2D	3P	1/2	4	1S	2D	0
3	2D	1D	1/2	4	1S	2P	4/3
3	2D	1S	0	5	2P	3P	1
3	2P	3P	1/2	5	2P	1D	5/9
3	2P	1D	5/18	5	2P	1S	1/9
3	2P	1S	2/9	6	1S	2P	2

Примечание: $C(p^q SL \rightarrow p^{q-1} S^* L^* l') = 2C(p^q SL \rightarrow p^{q-1} S^* L^* s)$

Для радиального интеграла в методе квантового дефекта получено следующее выражение:

$$g(n^*, l; \epsilon', l') = \frac{G(n^*, l; \epsilon', l')}{\sqrt{\xi(n^*, l)}} \cos \left\{ \pi \left[n^* + \mu'(\epsilon') + \chi(n^*, l; \epsilon', l') \right] \right\}, \quad (2.23)$$

$$\text{где } G(n^*, l; \varepsilon', l') = (-1)^{l+1} G_{ll'}(n^*) \left[1 + \varepsilon' (n^*)^2 \right]^{-\gamma_{ll'}(n^*)}; \quad (2.24)$$

$$\chi(n^*, l; \varepsilon', l') = a_{ll'} + \frac{b_{ll'}}{n^*} + \frac{c_{ll'}}{(n^*)^2} \quad \text{при } n^* \geq l+2;$$

$$\chi(n^*, 0; \varepsilon', 1) = \chi_{01}(n^*) + 0.25 \frac{\varepsilon' n^*}{1 + \varepsilon' n^*} \quad \text{для } s-p \text{ переходов};$$

$$\chi(n^*, 1; \varepsilon', 0) = \chi_{10}(n^*) \quad \text{для } p-s \text{ переходов};$$

$$\chi(n^*, 1; \varepsilon', 2) = \chi_{12} + 0.320 \frac{\varepsilon' n^*}{1 + \varepsilon' n^*} + \frac{\varepsilon' (n^*)^2}{1 + \varepsilon' (n^*)^2} \beta_{12}$$

для $p-d$ переходов;

в общем случае:

$$\chi(n^*, l; \varepsilon', l') = \chi_{ll'} + \frac{\varepsilon'}{1 + \varepsilon' n^*} \alpha_{ll'} + \frac{\varepsilon' (n^*)^2}{1 + \varepsilon' (n^*)^2} \beta_{ll'}, \quad (2.25)$$

$$\xi(n^*, l) = 1 + \frac{2}{(n^*)^3} \frac{\partial \mu(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}; \quad (2.26)$$

$$n^* = z / \sqrt{I_{n^* l S}} \quad - \text{эффективное главное квантовое число} \quad (2.27)$$

терма LS ;

$$\varepsilon' = k^2 / z^2 \quad - \text{приведенная кинетическая энергия свободного электрона, образовавшегося при фотоионизации, } z \text{ - остаточный заряд (для атома } z=1); \quad (2.28)$$

$$\varepsilon = -1 / (n^*)^2; \quad (2.29)$$

$$\mu(\varepsilon) = n - n^* \quad - \text{квантовый дефект}; \quad (2.30)$$

$\mu'(\varepsilon')$ - экстраполированный квантовый дефект для серии термов $n'l'L'S'$.

Функции $G_{ll'}$, $\chi_{ll'}(n^*)$, $\alpha_{ll'}$, $\beta_{ll'}$, $\chi_{ll'}$, $\gamma_{ll'}$ рассчитаны в работе (Burgess A., et al., 1960) и приведены в табл. 2.6.

Для того чтобы сечение поглощения σ_{nLS} измерялось в см^2 необходимо положить

$$4\pi\alpha a_0^2/3 = 8.559 \times 10^{-19}.$$

Таблица 2.6

Аппроксимирующие коэффициенты в методе Берджесса – Ситона

l	l'	$a_{ll'}$	$b_{ll'}$	$c_{ll'}$	$\alpha_{ll'}$	$\beta_{ll'}$
0	1	-0.147	0.2515	-0.078	0.31	0.
1	0	-0.216	-0.171	0.	0.	0.
1	2	-0.12	0.6	0.	0.362	0.0535
2	1	-0.247	-0.272	0.	-0.01	-0.019
2	3	-0.117	1.17	0.	0.321	0.106
3	2	-0.362	0.599	-2.432	-0.39	0.05
n^*	G_{01}	G_{10}	G_{12}	G_{21}	G_{23}	G_{32}
1	2.723	0.	0.	0.	0.	0.
2	2.095	1.028	2.84	0.4	4.0	0.
3	1.856	1.117	2.264	0.669	3.0	0.
4	1.718	1.152	2.01	0.818	2.413	0.468
5	1.623	1.168	1.856	0.899	2.139	0.599
6	1.553	1.175	1.749	0.952	1.971	0.704
7	1.498	1.177	1.666	0.988	1.854	0.793
8	1.452	1.176	1.601	1.014	1.765	0.868
9	1.414	1.173	1.546	1.033	1.694	0.933
10	1.381	1.170	1.501	1.047	1.635	0.991
11	1.352	1.165	1.461	1.058	1.585	1.041
12	1.327	1.161	1.427	1.065	1.543	1.085
n^*	γ_{01}	γ_{10}	γ_{12}	γ_{21}	γ_{23}	γ_{32}
1	1.754	0.	0.	0.	0.	0.
2	1.605	1.667	1.574	1.87	1.1	0.
3	1.591	1.667	1.582	1.819	1.447	1.6
4	1.590	1.667	1.579	1.771	1.535	1.850
5	1.591	1.667	1.582	1.741	1.544	1.908
6	1.594	1.667	1.587	1.722	1.549	1.918
7	1.596	1.667	1.593	1.707	1.556	1.920
8	1.599	1.667	1.598	1.697	1.564	1.921
9	1.601	1.667	1.603	1.688	1.573	1.922
10	1.603	1.667	1.608	1.682	1.581	1.924
11	1.605	1.667	1.614	1.676	1.589	1.926
12	1.607	1.667	1.618	1.672	1.596	1.928

Окончание табл. 2.6

n^*	G_{01}	γ_{01}	χ_{01}	
0.4	3.55	1.92	0.216	
0.6	3.259	1.85	0.143	
0.8	2.976	1.77	0.085	
1.0	2.739	1.701	0.043	
1.2	2.527	1.655	0.011	
1.4	2.360	1.632	-0.008	
1.6	2.244	1.62	-0.020	
1.8	2.162	1.612	-0.031	
2.0	2.095	1.604	-0.041	
n^*	G_{10}	γ_{10}	χ_{10}	
0.8	2.5	1.	-0.348	
1.0	1.880	1.333	-0.330	
1.2	1.500	1.515	-0.321	
1.4	1.310	1.585	-0.313	
1.6	1.180	1.630	-0.306	
1.8	0.962	1.655	-0.300	
2.0	0.999	1.667	-0.295	
2.2	1.029	1.667	-0.290	
2.4	1.058	1.667	-0.286	
2.6	1.080	1.667	-0.281	
2.8	1.1	1.667	-0.277	
3.0	1.117	1.667	-0.273	
n^*	G_{12}	γ_{12}	χ_{12}	β_{12}
0.8	5.85	2.920	0.77	0.086
1.0	5.69	2.340	0.65	0.079
1.2	5.57	1.911	0.511	0.069
1.4	4.02	1.703	0.389	0.054
1.6	4.25	1.625	0.287	0.038
1.8	3.075	1.624	0.21	0.029
2.0	2.757	1.658	0.1645	0.035
2.2	2.512	1.675	0.1425	0.053
2.4	2.415	1.635	0.131	0.068
2.6	2.386	1.593	0.115	0.068
2.8	2.340	1.576	0.0945	0.060
3.0	2.251	1.597	0.0733	0.050

Компьютерная реализация метода квантового дефекта имеет ряд особенностей.

1. Квантовый дефект рассчитывается для каждой спектральной серии термов. По определению признаком принадлежности к одной спектральной серии является совпадение следующих характеристик терма: $l, S, L, \pi, S'', L'', \pi''$ (здесь π – признак четности волновой функции для данного состояния).

С использованием локальной базы данных параметров термов атомов компьютерный код формирует столько спектральных серий, сколько таких комбинаций встречается в базе данных. Используемый здесь термин «локальная база данных» означает электронную базу данных атомных термов, используемых в расчетах. Структура такой базы данных определяется создателями конкретных вычислительных кодов.

2. Если $n^* \geq l+1$, то при вычислениях можно воспользоваться таблицами величин $G_{l'}$, $\chi_{l'}$, $a_{l'}$, $b_{l'}$, $c_{l'}$, $\alpha_{l'}$, $\beta_{l'}$.

3. Если $n^* < l+1$, то функции χ и G определяются по-разному для различных типов переходов:

а) переходы $(ns) \rightarrow (k^2 p)$

$$\chi(n^*, l=0; \varepsilon', 1) = \chi_{01}(n^*) + 0.310 \frac{\varepsilon' n^*}{1 + \varepsilon' n^*}. \quad (2.31)$$

Функции $\chi_{01}(n^*)$, $G_{01}(n^*)$, $\gamma_{01}(n^*)$ берутся из таблиц (табл. 2.6);

б) переходы $(np) \rightarrow (k^2 d)$

$$\chi(n^*, l=1; \varepsilon', 2) = \chi_{12}(n^*) + 0.62 \frac{\varepsilon' n^*}{1 + \varepsilon' n^*} + \beta_{12}(n^*) \frac{\varepsilon' (n^*)^2}{1 + \varepsilon' (n^*)^2}. \quad (2.32)$$

Функции $\chi_{12}(n^*)$, $\beta_{12}(n^*)$, $G_{12}(n^*)$, $\gamma_{12}(n^*)$ берутся из таблиц (табл. 2.6);

в) переходы $(np) \rightarrow (k^2 s)$

$$\chi(n^*, l=1; \varepsilon', 0) = \chi_{10}(n^*). \quad (2.33)$$

Функции $\chi_{10}(n^*)$, $G_{10}(n^*)$, $\gamma_{10}(n^*)$ берутся из таблиц (табл. 2.6).

4. В расчетах необходимо следить за выполнением правил отбора. После выбора очередного терма для расчета фотоионизации и определения величины l' (по заданной величине l) необходимо убедиться, что «штрихованная» серия принадлежит тому же родительскому терму, что и исходная. Для этого по заданной величине l выбираются три признака родительского терма из локальной базы данных:

$$(2S'' + 1), L'', \pi''.$$

Затем проверяется выполнение равенств

$$\begin{aligned} (2S'' + 1)_{l'} &= (2S'' + 1)_l, \\ (L'')_{l'} &= (L'')_l, \\ (\pi'')_{l'} &= (\pi'')_l. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Только при одновременном выполнении этих равенств можно производить расчет сечения.

5. Для получения сечений поглощения в плазме необходимо умножить полученное сечение σ_{nlLS} на заселенность соответствующего уровня

$$W_{nlLS} = \frac{g_{nlLS}}{Q_{\Sigma}} \exp\left(-1.44 \frac{E_{nl}}{T}\right), \quad (2.35)$$

где g_{nlLS} – статистический вес энергетического состояния ($nlLS$),

$$Q_{\Sigma} = \sum_{nl} g_{nlLS} \exp\left(-1.44 \frac{E_{nl}}{T}\right). \quad (2.36)$$

6. Наименее обоснованным элементом рассматриваемого метода является экстраполяция квантового дефекта в область непрерывного спектра. Известно, что для некоторых серий такая экстраполяция квантового дефекта может привести к большим погрешностям, поэтому при ее компьютерной реализации необходимо проявлять осторожность.

В работе (Peach G., 1967) предложена модификация метода квантового дефекта. Расчетное соотношение сечения фотоионизации уровня $nlLS$ имеет следующий вид:

$$\sigma_{nllS}^P = \frac{8\alpha a_0^2 (n^*)^3}{3z^2 \xi(n^*, l)} \frac{1}{[1 + \epsilon' (n^*)^2]^3} \sum_{L'=L, L\pm 1} \sum_{l'=l\pm 1} C_{ll'} \{G(n^*, l; \epsilon', l') \times$$

$$\times \cos[\pi [n^* + \mu'(\epsilon') + \chi(n^*, l; \epsilon', l')]]\}^2, \quad (2.37)$$

где $8\alpha a_0^2/3 = 5.449 \times 10^{-19} \text{ см}^2$; $C_{ll'}$ – как и прежде, угловой коэффициент, определяемый способом векторной связи моментов атомного остова и оптического электрона независимо от его принадлежности непрерывному или дискретному спектру. Значения функций $G(n^*, l; \epsilon', l')$ и $\chi(n^*, l; \epsilon', l')$ представлено в таблицах (табл. П.1).

На рис.2.7–2.14 приведены расчетные данные, выполненные Г.Пич (Reach G., 1970). Приведенные расчетные данные прошли многократную проверку сравнением с экспериментальными и другими расчетными данными, что позволяет рекомендовать их как эталонные (для данного класса методов).

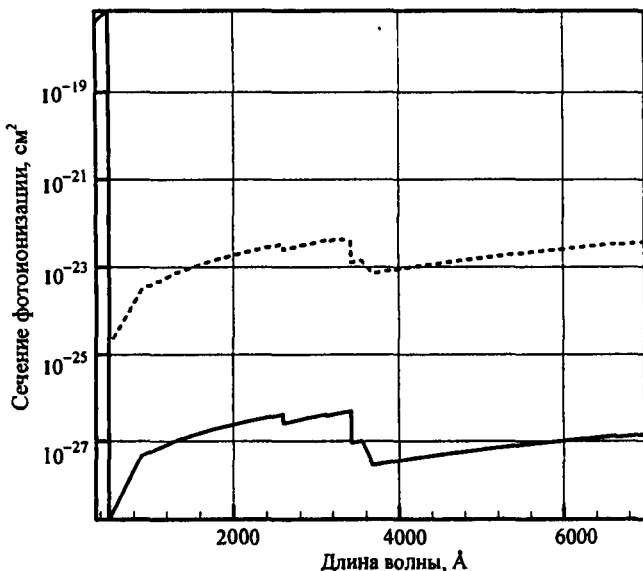


Рис. 2.7. Сечение фотоионизации атома Не при $T = 10000 \text{ К}$ (сплошная кривая) и $T = 16000 \text{ К}$ (штриховая кривая)

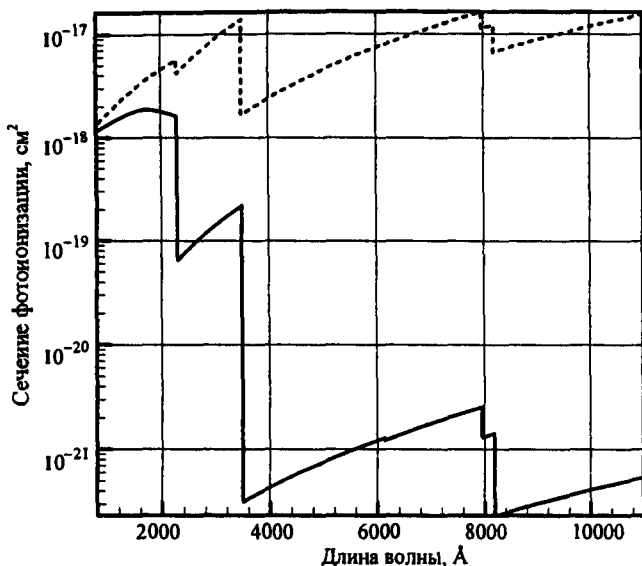


Рис. 2.8. Сечение фотоионизации атома Li при $T = 4000$ К (сплошная кривая) и $T = 16000$ К (штриховая кривая)

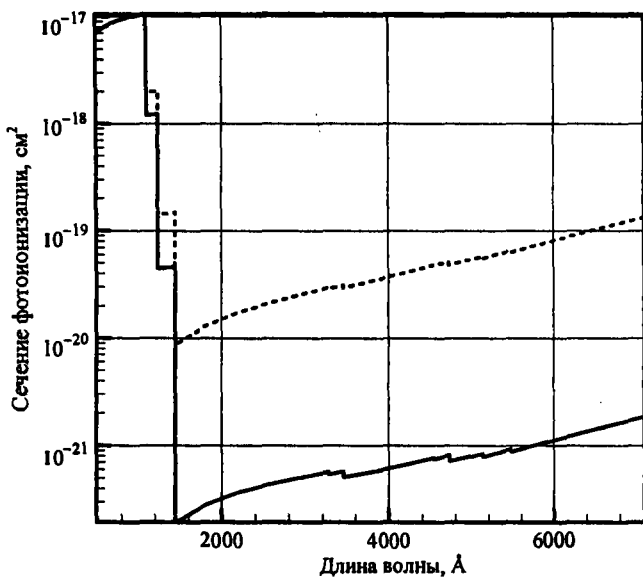


Рис. 2.9. Сечение фотоионизации атома С при $T = 10000$ К (сплошная кривая) и $T = 16000$ К (штриховая кривая)

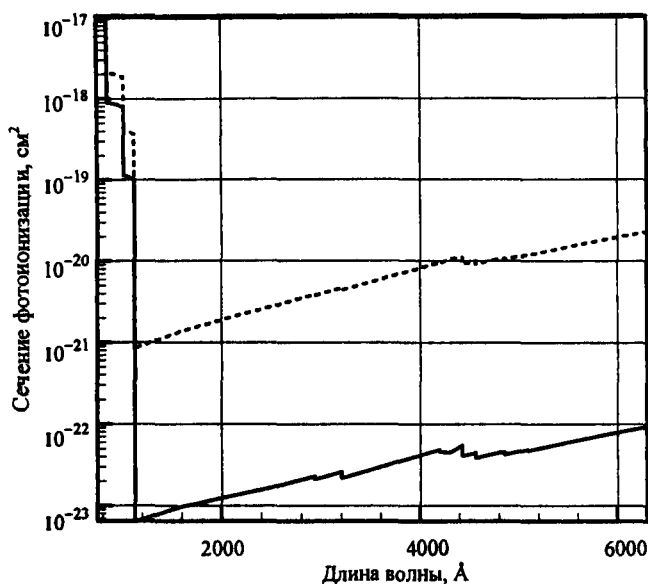


Рис. 2.10. Сечение фотоионизации атома N при $T = 10000$ К (сплошная кривая) и $T = 16000$ К (штриховая кривая)

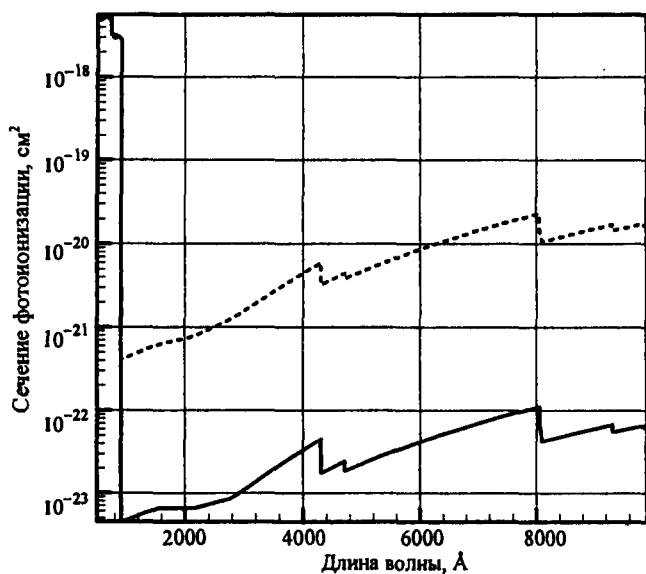


Рис. 2.11. Сечение фотоионизации атома O при $T = 10000$ К (сплошная кривая) и $T = 16000$ К (штриховая кривая)

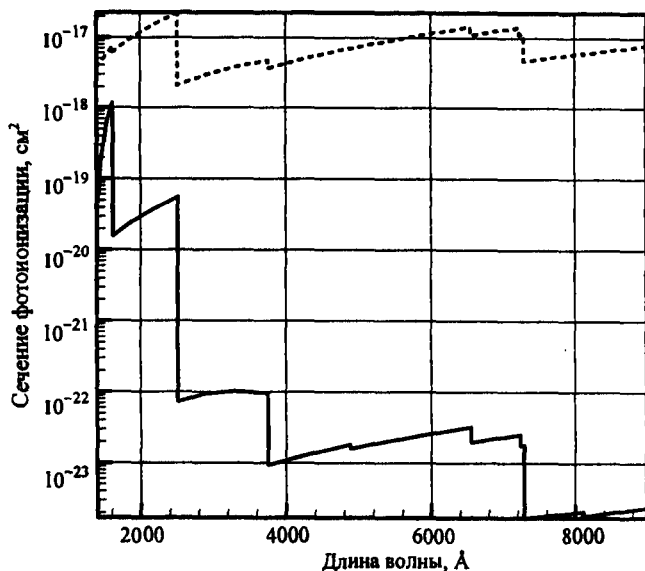


Рис. 2.12. Сечение фотоионизации атома Mg при $T = 4000$ К (сплошная кривая) и $T = 16000$ К (штриховая кривая)

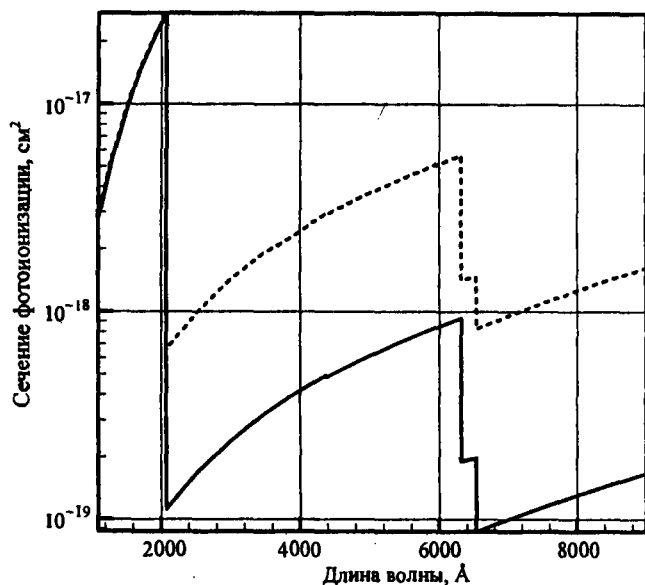


Рис. 2.13. Сечение фотоионизации атома Al при $T = 10000$ К (сплошная кривая) и $T = 16000$ К (штриховая кривая)

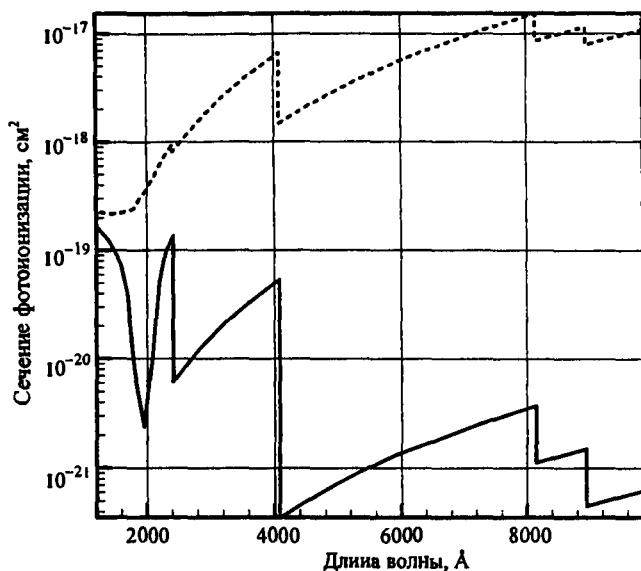


Рис. 2.14. Сечение фотоионизации атома S при $T = 4000$ K (сплошная кривая) и $T = 16000$ K (штриховая кривая)

2.1.4. Полуэмпирическая модель поглощения в непрерывном спектре при неравновесной заселенности возбужденных состояний атомных частиц

Рассмотренные в предыдущих разделах приближенные модели расчета фотоионизационного поглощения совместно с непрерывным поглощением в полях остаточных ионов позволяют предсказывать спектральные оптические свойства атомарной плазмы в условиях ЛТР. Если заселенности возбужденных энергетических состояний отличаются от больцмановского, все расчетные соотношения должны быть модифицированы. В данном разделе представлен пример учета неравновесности заселенностей в рамках полуэмпирической модели. В качестве примера выбрана неравновесная двухтемпературная водородная плазма, в которой температуры электронов и тяжелых частиц различны.

Электромагнитная энергия, испускаемая в спектральном диапазоне $d\nu$ в окрестности ν при падении единичного потока электронов на изолированный атом, оценивается формулой

$$dq_v = \frac{8\pi^2}{3} \frac{Z^2 e^6}{m_e^2 c^3} \frac{1}{v_e^2} dv, \quad (2.38)$$

где z – заряд иона; e – заряд электрона; m_e – масса электрона; c – скорость света; v_e – скорость потока электронов.

Приближенная формула (2.38) получена в работе (Зельдович Я.Б. и др., 1966) при помощи ряда упрощающих допущений. Более детальное рассмотрение (Ландау Л.Д. и др., 1988) дает

$$dq_v = \frac{32\pi^2}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6}{m_e^2 c^3} \frac{1}{v_e^2} dv, \quad (2.39)$$

что уточняет (2.38) лишь в части несущественного числового коэффициента.

Формула (2.39), полученная с использованием классической электромагнитной теории, справедлива при

$$v \gg \frac{m_e v_e^3}{2\pi Z e^2} \quad (2.40)$$

или

$$\frac{h v_e}{\pi Z e^2} \ll 1. \quad (2.41)$$

Соотношение (2.39) будет использоваться далее для построения полуэмпирической модели.

Пусть электроны характеризуются максвелловской функцией распределения с температурой T_e , тогда

$$f(v_e) dv_e = 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi k T_e} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m_e v_e^2}{2k T_e} \right) v_e^2 dv_e. \quad (2.42)$$

Для нормировки этой функции распределения используется следующее условие: величина $[f(v_e) v_e dv_e] N_e$ задает число электронов в 1 см^3 со скоростями в диапазоне $v_e \div (v_e + dv_e)$. Если N_i – концентрация ионов в 1 см^3 , то $N_i N_e f(v_e) v_e dv_e \cdot dq_v$ есть энергия, испускаемая в 1 с из объема 1 см^3 электронами со скоростями v_e , тормозящимися вблизи иона зарядом Z .

Тогда энергия, испускаемая за 1 с из объема 1 см^3 всеми электронами, скорости которых превосходят величину v_e^* , определяется по формуле

$$j_\nu dv = \int_{v_e^*}^{\infty} N_e N_i f(v_e) v_e dv_e \cdot dq_\nu, \quad (2.43)$$

где v_e^* находится из условия

$$m_e (v_e^*)^2 / 2 = h\nu.$$

Подстановка (2.39) в (2.43) дает

$$\begin{aligned} j_\nu dv &= N_e N_i \frac{32\pi^2}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6}{m_e^2 c^3} \int_{v_e^*}^{\infty} f(v_e) \frac{1}{v_e} dv_e dv = \\ &= \frac{32\pi}{3} \frac{Z^2 e^6}{m_e c^3} \left(\frac{2\pi}{3m_e k T_e} \right)^{1/2} e^{-h\nu/kT_e} N_e N_i dv. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Таким образом, формула (2.44) позволяет рассчитать энергию, испускаемую из объема 1 см^3 за 1 с при условии, что электронный газ максвеллизирован, и справедливо приближение «высоких частот»:

$$\nu \gg \frac{m_e \bar{v}_e^3}{2\pi Z e^2} = \frac{m_e}{2\pi Z e^2} (6.21 \times 10^5)^3 T_e^{3/2},$$

где
$$\bar{v}_e = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = 6.21 \times 10^5 \sqrt{T_k}, \text{ см/с.}$$

Подставив в (2.44) числовые значения констант, получим

$$j_\nu dv = 0.683 \times 10^{-37} \frac{Z^2}{T_e^{1/2}} e^{-h\nu/kT_e} N_e N_i dv. \quad (2.45)$$

При измерении спектральной зависимости в волновых числах, испущенная энергия равна

$$j_\nu dv = j_\omega d\omega,$$

$$j_{\omega} = j_{\nu} \frac{d\nu}{d\omega} = c \cdot 0.683 \times 10^{-37} \frac{Z^2}{T_e^{1/2}} e^{-1.439\omega/T_e} N_i N_e, \quad (2.46)$$

или

$$j_{\omega} = 0.205 \times 10^{-26} \frac{Z^2}{T_e^{1/2}} e^{-1.439\omega/T_e} N_i N_e, \quad (2.47)$$

где j_{ω} измеряется в эрг·см/см³·с

Энергия, испускаемая в спектральной группе $\Delta\omega_g$, равна

$$J_g = \int_{\Delta\omega_g} j_{\omega} d\omega = \int_{\Delta\omega_g} 0.205 \times 10^{-26} \frac{Z^2}{T_e^{1/2}} e^{-1.439\omega/T_e} N_i N_e d\omega. \quad (2.48)$$

И, окончательно, интегральная энергия, испускаемая в процессах торможения электронов, рассчитывается по формуле

$$\begin{aligned} J &= \int_0^{\infty} j_{\nu} d\nu = 0.683 \times 10^{-37} \frac{Z^2}{T_e^{1/2}} \times \\ &\times \int_{\Delta\omega_g} 0.205 \times 10^{-26} \frac{Z^2}{T_e^{1/2}} N_e N_i \int_0^{\infty} e^{-h\nu/T_e} d\nu \frac{h}{kT_e} \frac{kT_e}{h} = \\ &= 0.683 \times 10^{-37} \frac{Z^2}{T_e^{1/2}} N_e N_i T_e \frac{k}{h} \end{aligned} \quad (2.49)$$

или

$$J = 0.142 \times 10^{-26} Z^2 T_e^{1/2} N_e N_i, \frac{\text{эрг}}{\text{см}^3 \cdot \text{с}}. \quad (2.50)$$

Непрерывному испусканию излучения, обусловленному торможением электронов в полях положительно заряженных ионов, соответствует обратный процесс, состоящий в поглощении фотона электроном, сопровождающийся ускорением этого электрона в поле иона. Такой процесс иногда не вполне корректно называется *тормозным поглощением*.

Пусть испускание и поглощение электромагнитной энергии определяется в основном свободно-свободными переходами электронов в полях ионов. Тогда интенсивность излучения можно ха-

рактически электронная температура T_e . Воспользуемся принципом детального баланса:

$$N_i N_e f(v_e) dv_e (c U_{vp}) \kappa_v (1 - e^{-hv/kT_e}) = N_i N_e v'_e f(v'_e) dv'_e dq_v, \quad (2.51)$$

где $N_e f(v_e) dv_e$ — число электронов в 1 см^3 со скоростями $v_e \div (v_e + dv_e)$; $c U_{vp}$ — спектральная объемная плотность радиационной энергии; κ_v — спектральный объемный коэффициент поглощения; $1 - e^{-hv/kT_e}$ — поправка на вынужденное испускание.

Левая часть уравнения (2.51) задает величину радиационной энергии, поглощенной электронами со скоростями $v_e \div (v_e + dv_e)$ за 1 с в 1 см^3 . Правая часть (2.51) дает величину испущенной энергии в тормозных процессах электронами со скоростями $v'_e \div (v'_e + dv'_e)$ за 1 с в 1 см^3 .

Связь между скоростями v'_e и v_e может быть представлена в виде

$$\frac{m_e v'_e{}^2}{2} = \frac{m_e v_e{}^2}{2} + hv, \quad hv = \frac{m_e v'_e{}^2}{2} - \frac{m_e v_e{}^2}{2}$$

или
$$m_e v'_e dv'_e = m_e v_e dv_e \quad (2.52)$$

Пусть
$$dq_v = hv d\sigma_v, \quad (2.53)$$

где σ_v — спектральное сечение тормозного излучения.

Спектральная объемная плотность радиационной энергии задается функцией Планка

$$U_{vp} = \frac{8\pi h v^3}{c^3} \frac{1}{\exp(hv/kT_e) - 1}, \quad (2.54)$$

поэтому, учитывая

$$f(v_e) dv_e = 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi k T_e} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_e v_e^2}{2k T_e} \right) v_e^2 dv_e,$$

и соотношение $e^{-hv/kT_e} = e^{m_e v_e^2/2kT_e} - e^{m_e v'_e{}^2/2kT_e}$, несложно получить

$$\kappa_v = \frac{c^2}{8\pi v^2} \frac{v_e^2}{v_e} \frac{d\sigma_v(v'_e)}{dv}.$$

Хорошо известное соотношение Крамерса получается при подстановке $d\sigma_v(v'_e) = dq_v(v'_e)/h\nu$ в вышеприведенное уравнение

$$\kappa_v = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6}{hcm_e^2 v_e^3}, \text{ см}^5, \quad (2.55)$$

откуда коэффициент тормозного поглощения получается интегрированием по скоростям электронов

$$\begin{aligned} \kappa_v &= \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6}{hcm_e^2 v^3} N_e N_i \int_0^\infty \frac{1}{v_e} 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi k T_e} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_e v_e^2}{2k T_e}\right) v_e^2 dv_e = \\ &= \frac{4}{3} \frac{Z^2 e^6}{hcm_e^2 v^3} N_i N_e \left(\frac{2\pi}{3m_e k T_e} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (2.56)$$

или с учетом числовых значений атомных постоянных

$$\kappa_v = 3.69 \times 10^8 \frac{Z^2}{T_e^{1/2} v} N_e N_i, \text{ см}^{-1}. \quad (2.57)$$

И, наконец, с учетом фактора Гаунта

$$\kappa_v = 3.69 \times 10^8 \frac{Z^2}{T_e^{1/2} v} N_e N_i g, \text{ см}^{-1}, \quad (2.58)$$

где

$$g = g(N_e T_e) = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln \frac{4kT_e}{e^2 N_e^{1/3}} = 1.27 \left(3.38 + \lg T_e - \frac{1}{3} \lg N_e \right). \quad (2.59)$$

Подчеркнем, что в соотношении (2.58) используется полная концентрация ионов, а сам коэффициент поглощения определяется электронной температурой.

Рассмотренные соотношения для непрерывных радиационных процессов можно применить для расчета свободно-связанных процессов. Для этого следует воспользоваться условиями применимости квазиклассического приближения. Такие условия сформулированы в работе (Зельдович Я.Б. и др., 1966) в следующем виде:

$$m_e v_e^2 / 2 \ll I_H Z^2 . \tag{2.60}$$

Далее для простоты рассмотрим атом водорода, для которого

$$I_H = e^2 / 2a_0 = 13.6 \text{ эВ} = 0.218 \times 10^{-10} \text{ эрг} .$$

Тепловая скорость электронов рассчитывается по формуле

$$v_e = 6.21 \times 10^5 \sqrt{T_{e,k}} , \text{ см/с} .$$

Тогда условия квазиклассичности могут быть переписаны в виде

$$T_{e,k} \ll I_H \frac{2Z^2}{m_e (6.21 \times 10^5)^2} \text{ или } T_{e,k} \ll 1.24 \times 10^5 , \text{ К} . \tag{2.61}$$

С учетом схемы уровней энергии, показанной на рис.2.15, связь между частотой поглощенного кванта и энергией дискретного состояния определяется следующим соотношением:

$$h\nu = \frac{m_e v_e^2}{2} + \frac{i}{n^2} , \tag{2.62}$$

где n – главное квантовое число водородоподобного атома.

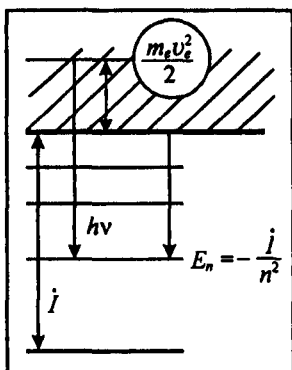


Рис. 2.15. Схема уровней энергии и квантовых переходов

Пусть $\sigma_{e,n}$ – эффективное сечение испускания с группы Δn уровней, тогда $\Delta q_v = h\nu \sigma_{e,n} \Delta n$, откуда

$$\sigma_{e,n} = \frac{\Delta q_v}{h\nu\Delta n}. \quad (2.63)$$

Если подставить Δq_v из уравнения (2.39) в (2.63), то

$$\sigma_{e,n} = \frac{32\pi^2}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6}{m_e^2 c^3} \frac{1}{v_e^2} \frac{dv}{h\nu dn}.$$

Но из (2.62) следует, что

$$hdv = \frac{2n\dot{I}}{n^4} dn, \quad dv = \frac{2\dot{I}}{hn^3} dn.$$

Поэтому

$$\sigma_{e,n} = \frac{32\pi^2}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6}{m_e c^3 h^2} \frac{2}{m_e v_e^2} \frac{\dot{I}}{n^3 v} \quad (2.64)$$

или с учетом числовых значений констант

$$\sigma_{e,n} = 0.692 \times 10^{-6} \frac{2}{m_e v_e^2} \frac{\dot{I} Z^2}{n^3} \frac{1}{v}, \text{ см}^2. \quad (2.65)$$

Суммирование по всем дискретным квантовым уровням дает

$$\sigma_e = 0.692 \times 10^{-6} \frac{\dot{I}}{E_e} Z^2 h \sum_{n=n^*}^{\infty} \frac{1}{n^3 h\nu}, \quad (2.66)$$

где $E_e = \frac{m_e v_e^2}{2}$.

Учитывая соотношение (2.62), можно переписать (2.66):

$$\sigma_e = 0.458 \times 10^{-32} \frac{Z^2}{E_e} \sum_{n=n^*}^{\infty} \frac{1}{n^3 \left(\frac{E_e}{\dot{I}} + \frac{1}{n^2} \right)}, \text{ см}^2, \quad (2.67)$$

где $E_e = \frac{m_e v_e^2}{2} = 0.175 \times 10^{-15} T_e$;

для атома водорода $\dot{I} = 21.79 \times 10^{-12}$ эрг.

Теперь остается рассмотреть спектральное сечение поглощения. Пусть спектральная объемная плотность излучения определяется функцией Планка с электронной температурой T_e :

$$U_{b,\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(h\nu/kT_e) - 1}, \quad (2.68)$$

а число актов захвата электронов с испусканием квантов излучения совпадает с числом актов фотоионизации. Это позволяет воспользоваться принципом детального баланса:

$$N_i N_e v_e f(v_e) dv_e \sigma_{e,n} = N_n \frac{U_{b,\nu} c}{h\nu} dv \left(1 - e^{-h\nu/kT_e}\right) \sigma_{\nu,n}. \quad (2.69)$$

Здесь $\sigma_{\nu,n}$ – спектральное сечение фотоионизационного поглощения с квантового уровня n .

Левая часть уравнения (2.69) задает число актов захвата электронов за 1 с в объеме 1 см^3 с испусканием квантов энергии на спектральном участке $\nu \div (\nu + d\nu)$. Эти электроны обладают скоростями $v_e \div (v_e + dv_e)$, и каждый электрон захватывается из свободного состояния на квантовый уровень n . Правая часть (2.69) задает число соответствующих актов фотоионизации с квантового уровня n .

При отсутствии термодинамического равновесия, например для двухтемпературной плазмы, связь между концентрацией ионов N_i и электронов N_e посредством уравнения Саха не устанавливается, поэтому

$$\sigma_{\nu,n} = \frac{N_i N_e}{N_n} \frac{h\nu}{c U_{b,\nu}} \frac{1}{(1 - e^{-h\nu/kT_e})} \frac{1}{dv} \cdot v_e f(v_e) dv_e \sigma_{e,n} \quad (2.70)$$

Подставив в (2.69) соотношения

$$f(v_e) dv_e = 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi kT_e}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_e v_e^2}{2kT_e}\right) v_e^2 dv_e,$$

$$U_{b,\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(h\nu/kT_e) - 1},$$

получим

$$\sigma_{\nu,n} = \frac{N_i N_e}{N_n} \frac{c^2}{8\pi\nu^2} \frac{1}{d\nu} e^{h\nu/kT_e} \left(1 - e^{-h\nu/kT_e}\right) \times \\ \times 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi kT_e}\right)^{3/2} \nu_e^3 d\nu_e \cdot e^{-m_e \nu_e^2 / 2kT_e} \sigma_{e,n}.$$

Экспоненциальные множители могут быть преобразованы следующим образом:

$$\frac{h\nu}{kT_e} - \frac{m_e \nu_e^2}{2} \frac{1}{kT_e} = \frac{1}{kT_e} \left(h\nu - \frac{m_e \nu_e^2}{2} \right) = \frac{1}{kT_e} \frac{\dot{I}}{n^2}.$$

Тогда

$$\sigma_{\nu,n} = \frac{N_i N_e}{N_n} \frac{c^2}{8\pi\nu^2} e^{I/n^2 kT_e} \frac{1}{d\nu} 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi kT_e}\right)^{3/2} \nu_e^3 d\nu_e \cdot \sigma_{e,n}.$$

Но $\nu_e d\nu_e = \frac{h d\nu}{m_e}$, так как $\frac{m_e \nu_e^2}{2} = h\nu - \frac{\dot{I}}{n^2}$.

Поэтому

$$\sigma_{\nu,n} = \frac{N_i N_e}{N_n} \frac{c^2 h}{8\pi\nu^2 m_e} \nu_e^2 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi kT_e}\right)^{3/2} \sigma_{e,n} e^{I/n^2 kT_e},$$

но $\sigma_{e,n} = \frac{32\pi^2 e^6}{3\sqrt{3} h^2 m_e c^3} \frac{2}{m_e \nu_e^2} \frac{\dot{I}^2}{n^3 \nu} e^{I/n^2 kT_e}$.

Тогда

$$\sigma_{\nu,n} = \frac{N_i N_e}{N_n} \frac{c^2 h \cdot 2}{8\pi\nu^2 m_e^2} \frac{m_e \nu_e^2}{2} 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi kT_e}\right)^{3/2} \frac{32\pi^2 e^6}{3\sqrt{3} h^2 m_e c^3} \frac{2}{m_e \nu_e^2} \frac{\dot{I}^2}{n^3 \nu}$$

и $\sigma_{\nu,n} = \frac{N_i N_e}{N_n} \frac{32\pi^2 e^6}{(2\pi)^{3/2} (kT_e)^{3/2}} \frac{\dot{I}^2}{3\sqrt{3} h c m_e^{3/2}} \frac{1}{n^3 \nu^3} e^{I/n^2 kT_e}$.

Если обозначить

$$a^* = \frac{32\pi^2 e^6}{3\sqrt{3}hc (2\pi k)^{3/2} m_e^{3/2}} = 0.535 \times 10^{25},$$

то

$$\sigma_{v,n} = a^* \frac{Z^2 j}{n^3} \frac{1}{v^3} e^{j/n^2 k T_e} \cdot \frac{1}{T_e^{3/2}} N_i N_e \frac{1}{N_n}. \quad (2.71)$$

Искомый коэффициент связанно-свободного поглощения находится суммированием

$$\kappa_v^{bf} = \sum_{n=n^*}^{\infty} N_n \sigma_{v,n} = a^* \frac{Z^2 j}{v^3} \frac{N_i N_e}{T_e^{3/2}} \sum_{n=n^*}^{\infty} \frac{1}{n^3} e^{j/n^2 k T_e}. \quad (2.72)$$

Полный коэффициент связанно-свободного поглощения совместно со свободно-свободным поглощением в поле остаточного иона получается очевидным образом:

$$\begin{aligned} \kappa_v^{\Sigma} = & a^* \frac{Z^2 j}{v^3} \frac{N_i N_e}{T_e^{3/2}} \sum_{n=n^*}^{\infty} \frac{1}{n^3} e^{j/n^2 k T_e} + \\ & + \frac{4}{3} \frac{Z^2 e^6}{h c m_e^2 v^3} N_i N_e \left(\frac{2\pi}{3 m_e k T_e} \right)^{1/2} g(N_e, T_e) \end{aligned} \quad (2.73)$$

или с учетом числовых значений констант

$$\begin{aligned} \kappa_v^{\Sigma} = & 0.535 \times 10^{25} \frac{Z^2 j}{v^3} \cdot \frac{N_i N_e}{T_e^{3/2}} \sum_{n=n^*}^{\infty} \frac{1}{n^3} e^{j/n^2 k T_e} + \\ & + 3.69 \times 10^8 \frac{Z^2}{v^3} \frac{N_i N_e}{T_e^{1/2}} g(N_e, T_e), \text{ см}^{-1}. \end{aligned} \quad (2.74)$$

При измерении спектральной зависимости в волновых числах $\omega = v/c$, где c – скорость света, получается следующая формула:

$$\kappa_v^{\Sigma} = 0.197 \times 10^{-6} \frac{Z^2 j}{\omega^3 T_e^{3/2}} N_i N_e \sum_{n=n^*}^{\infty} \frac{1}{n^3} e^{j/n^2 k T_e} +$$

$$+0.137 \times 10^{-22} \frac{Z^2}{\omega^3 T_e^{1/2}} N_i N_e g(N_e, T_e), \text{ см}^{-1}. \quad (2.75)$$

Полученные соотношения для спектральных коэффициентов испускания и поглощения неравновесной плазмы исследовались в работе (Surzhikov S.T., et al., 2002 (a)).

2.1.5. Сечение непрерывного поглощения в полях ионов H^- , N^- , O^- и C^-

В соответствии с данными (Авилова И.В. и др., 1970) сечение фотоионизации N^- и O^- , отнесенное к давлению отрицательного иона, можно представить в виде

$$\sigma(\omega, T) = 7340 [\sigma(\tilde{\omega})/T], \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}, \quad (2.76)$$

где $\sigma(\tilde{\omega})$ для ионов N^- и O^- имеет вид

$$\sigma_{\text{N}^-}(\tilde{\omega}) = \begin{cases} 0, & \tilde{\omega} < 0.9, \\ 160, & 0.9 \leq \tilde{\omega} < 2, \\ 200(1 - 0.1\tilde{\omega}), & 2 \leq \tilde{\omega} \leq 9; \end{cases} \quad (2.77)$$

$$\sigma_{\text{O}^-}(\tilde{\omega}) = \begin{cases} 0, & \tilde{\omega} < 1.2, \\ 6, & 1.2 \leq \tilde{\omega} < 3, \\ 14, & 2 \leq \tilde{\omega} \leq 6.5, \end{cases}$$

где $\tilde{\omega} = \omega/10000$.

В работе (Каменщиков В.А. и др., 1971) на основе анализа экспериментальных данных предлагается величину σ_{N^-} уменьшить примерно в 20 раз. Экспериментальные данные по сечению фотоотрыва от иона C^- приведены в работе (Semam M.L., et al., 1962). Их можно аппроксимировать следующей зависимостью:

$$\sigma_{\text{C}^-}(\tilde{\omega}) = \begin{cases} 0, & \tilde{\omega} < 1.13, \tilde{\omega} > 2.41, \\ 13, & 1.13 < \tilde{\omega} < 2.41. \end{cases} \quad (2.78)$$

Важным радиационным процессом в водородной плазме (особенно в астрофизических приложениях) является поглощение излучения ионом H^- .

Таблица 2.7

Сечение поглощения H^- (Левинсон И.Б. и др., 1962)

λ , мкм	σ , 10^{-17} см ²	λ , мкм	σ , 10^{-17} см ²
0.1	0.2945	0.9	3.421
0.2	0.8888	1.0	2.896
0.3	1.666	1.1	2.309
0.4	2.567	1.2	1.720
0.5	3.352	1.3	1.172
0.6	3.838	1.4	0.6945
0.7	3.977	1.5	0.3132
0.8	3.81	1.6	0.05643

С использованием данных табл. 2.7, заимствованных из работы (Левинсон И.Б. и др., 1962), сечение поглощения H^- находится в виде

$$\kappa(\omega, T) = 0.734 \times 10^{22} \sigma / T, \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}. \quad (2.79)$$

При этом концентрация отрицательных ионов водорода может быть найдена по формуле (Пеннер С.С., 1963)

$$N_{H^-} = 10^6 N_H p_e \varphi(T), \quad \lg \varphi(T) = -0.12 + 3780/T - 2.5 \lg T, \quad (2.80)$$

где p_e, N_H – давление электронов и концентрация атомов H в см³.

2.2. Общие замечания к использованию различных моделей применительно к расчету спектра непрерывного поглощения

Расчет сечения фотоионизации каждого терма с последующим суммированием по всем учитываемым термам дает величину суммарного сечения

$$\sigma_{\text{см}^2} = \sum_{nl} \sigma_{nlLS}, \text{ см}^2. \quad (2.81)$$

В расчетах суммарных коэффициентов поглощения часто используется размерность см⁻¹. Для получения указанной размерности необходимо воспользоваться следующей процедурой пере-счета:

$$\kappa_{\text{см}^{-1}} = \sigma_{\text{см}^2} N_{\text{см}^{-3}}, \quad (2.82)$$

где $N_{\text{см}^{-3}}$ – числовая концентрация атомов (или ионов), для которых рассчитывается коэффициент поглощения. Удобно выразить $N_{\text{см}^{-3}}$ через давление и температуру:

$$p = N_{\text{см}^{-3}} kT, \quad (2.83)$$

где $k = 1.38 \times 10^{-16}$ эрг/К; T – температура, К.

Тогда

$$\kappa_{\text{см}^{-1}} = \sigma_{\text{см}^2} \times 10^{18} (7341 p_{\text{атм}} / T), \text{ см}^{-1}, \quad (2.84)$$

где $p_{\text{атм}}$ – давление, атм. Для измерения сечения поглощения в единицах 10^{-18} см^2 применяется специальная единица МБарн. Поэтому последняя формула может быть записана в виде

$$\kappa_{\text{см}^{-1}} = \sigma_{\text{МБарн}} (7341 p_{\text{атм}} / T), \text{ см}^{-1}. \quad (2.85)$$

В задачах радиационной газовой динамики можно рекомендовать следующий основной алгоритм расчета суммарного спектра с участием атомных единиц.

1. На основе имеющихся данных по характеристикам энергетических уровней каждого атома и иона определяются:

- наименьшее волновое число ω_{M^*} , начиная с которого учитывается ионизация с отдельных уровней;
- наименьшее волновое число ω_b , начиная с которого учитывается фотоионизация из основных состояний;
- наибольшее волновое число ω_{m^*} , соответствующее первому порогу фотоионизации с возбужденных состояний.

2. В спектральном диапазоне

$$\omega_{M^*} \leq \omega \leq \omega_b$$

применяется метод квантового дефекта (в одной из двух форм).

3. В спектральном диапазоне

$$\omega < \omega_{M^*}$$

используется формула Крамерса.

4. В спектральном диапазоне

$$\omega < \omega_b$$

используется полуэмпирическая модель или метод квантового дефекта с модификацией Пич.

При необходимости ускорить расчеты применяется следующий альтернативный алгоритм: определяются величины ω_{M^*} , ω_b и ω_{m^*} .

5. Во всем спектральном диапазоне расчет производится по полуэмпирическому методу, в котором тормозные процессы и фотоионизация из возбужденных состояний учитывается по единой формуле. Кроме этого, значительно уменьшается число уровней, учитываемых индивидуально. Удовлетворительные результаты получаются при $M^* \approx m^* + 10$.

2.3. Фотоионизация молекул

Непрерывные процессы поглощения в молекулярной плазме в значительной степени определяются фотодиссоциацией и фотоионизацией молекул. Как правило, заметное поглощение, обусловленное указанными процессами, наблюдается в ультрафиолетовой области спектра. Этим, отчасти, объясняется небольшое число экспериментальных данных, в особенности при повышенных температурах.

В расчетных кодах, ориентированных на задачи физической механики, до настоящего времени приходится использовать простейшую ступенчатую аппроксимацию этих процессов, основанную на экспериментальных данных.

Сечения фотоионизации молекул H_2 , CO , C_2 , CN , C_3 задаются в виде

$$\sigma(\omega, T) = 7340 \left[\sigma(\tilde{\omega})/T \right], \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}, \quad (2.86)$$

где

$$\sigma(\tilde{\omega}) = \begin{cases} 0, & \tilde{\omega} < \tilde{\omega}_p, \\ \sigma^*, & \tilde{\omega} \geq \tilde{\omega}_p, \end{cases} \quad \tilde{\omega} = \omega/10000.$$

Величины σ^* и $\tilde{\omega}_p$ представлены в табл. 2.8.

Таблица 2.8

Эмпирические константы, используемые при расчете сечений фотоионизации молекул

Молекула	$\omega_p, 10^4 \text{ см}^{-1}$	σ^*
H ₂	12.449	7
CO	11.467	15
C ₂	9.684	10
CN	11.782	10
C ₃	9.3	5

Сечения фотоионизации N₂, O₂, NO оцениваются по данным (Ватанабе К., 1961), полученным в атмосферных условиях. Их усреднение дает следующие результаты:

$$\sigma_{\text{N}_2}(\tilde{\omega}) = \begin{cases} 2.5 + 273(1/\tilde{\omega} - 0.02), & 13.3 < \tilde{\omega} \leq 50, \\ 17.5 \exp[-241(1/\tilde{\omega} - 0.075)], & 11.9 < \tilde{\omega} \leq 13.3, \\ 1, & 10 < \tilde{\omega} \leq 11.9; \end{cases} \quad (2.87)$$

$$\sigma_{\text{O}_2}(\tilde{\omega}) = \begin{cases} 30, & 12.5 < \tilde{\omega} \leq 21.3, \\ 7, & 11.76 < \tilde{\omega} \leq 12.5, \\ 10 \exp[-115(1/\tilde{\omega} - 0.085)], & 9.524 < \tilde{\omega} \leq 11.76, \\ 0.3 & 7.8 < \tilde{\omega} \leq 9.524; \end{cases} \quad (2.88)$$

$$\sigma_{\text{NO}}(\tilde{\omega}) = \begin{cases} 7.5 + 312.5(1/\tilde{\omega} - 0.02), & 16.68 < \tilde{\omega} \leq 50, \\ 20 - 850(1/\tilde{\omega} - 0.06), & 12.5 < \tilde{\omega} \leq 16.68, \\ 3 + 1417(1/\tilde{\omega} - 0.08), & 10.87 < \tilde{\omega} \leq 12.5, \\ 20 \exp[-78.83(1/\tilde{\omega} - 0.092)], & 8.33 < \tilde{\omega} \leq 10.87, \\ 2.2, & 7.042 < \tilde{\omega} \leq 8.33. \end{cases} \quad (2.89)$$

Следует отметить, что значения сечений фотоионизации в ультрафиолетовой области спектра определяются с низкой точностью. Особенно это относится к области спектра $\Delta\tilde{\omega} = 10 \div 16$, где

вносят свой вклад несколько радиационных процессов, не все из которых к тому же надежно отождествлены. В работе (Тогг М.Р., et al., 1979) представлены данные по суммарным сечениям поглощения и сечениям фотоионизации для ряда атмосферных газов, откуда можно сделать вывод, что механизм фотоионизации надежно отождествлен лишь для $\bar{\omega} < 16$. В формуле (2.88) на участке $\Delta\bar{\omega} = 10 \div 12.5$ учтено поглощение в ридберговских сериях полюс (Ватанабе К., 1961).

Сечения фотоионизации холодных газов могут использоваться для их расчетов сечений при высоких температурах по более обоснованным соотношениям, чем (2.86). Коэффициент поглощения при фотоионизации с j -го уровня энергии, отнесенный к парциальному давлению поглощающей молекулы (с равновесной заселенностью состояний), имеет вид (Мнацаканян А.Х., 1968)

$$\sigma(\omega, T) = \frac{0.734 \times 10^{22} h \omega B W_j}{c_0 T}, \text{ см}^{-1} \text{ атм}^{-1}, \quad (2.90)$$

где $B = (8\pi^3/3h^2) R_j^2$ – коэффициент поглощения Эйнштейна; R_j^2 – квадрат матричного элемента дипольного перехода; W_j – больцмановская вероятность нахождения на уровне j . Выражая R_j^2 в атомных единицах $(a_0 e)^2 = (h^2 e / 4\pi^2 m_e e^2)^2$, получаем

$$\sigma(\omega, T) = \frac{0.734 \times 10^{22} \pi r_0 R_j^2 \omega W_j}{3R_y T} = \frac{1.96 \times 10^4 R_j^2 \omega W_j}{T}, \text{ см}^{-1} \text{ атм}^{-1}, \quad (2.91)$$

где $r_0 = e^2 / m_e c_0^2 \cong 2.818 \times 10^{-13}$ см – классический радиус электрона; $R_y = 2\pi^2 e^4 m_e / h^3 c_0 = 109737$ см⁻¹ – постоянная Ридберга; e, m_e – заряд и масса электрона; c_0 – скорость света в вакууме; h – постоянная Планка; T – температура, К; ω – волновое число, см⁻¹; $a_0 = h^2 / 4\pi^2 m_e e^2 = 0.529 \times 10^{-8}$ см – радиус Бора.

В работе (Мнацаканян А.Х., 1968) при использовании приближения Борна – Оппенгеймера (о независимости вероятностей электронного и колебательного переходов), предложена расчетная формула фотоионизационного молекулярного поглощения:

$$\sigma(\omega, T) = \frac{1.96 \times 10^4 \omega R_e^2(\omega)}{TRy} \sum_{v''v'} W_{v''} q_{v''v'} \chi(\omega - \omega_{v''v'}), \quad (2.92)$$

где $R_e^2(\omega)$ – электронная часть матричного элемента дипольного перехода; $q_{v''v'}$ – вероятность перехода (фактор Франка–Кондона) между колебательными уровнями молекулы (v'') и остаточного иона (v'); $\chi(\omega - \omega_{v''v'})$ – функция Хэвисайда; $W_{v''}$ – вероятность заселения колебательного уровня v'' . Метод расчета сечений фотоионизации при высоких температурах, предложенный в работе (Мнацаканян А.Х., 1968), состоит в определении $R_e^2(\omega)$ из экспериментальных данных для холодного газа, когда с хорошей точностью можно принять $v'' = 0$. В этом случае основная сложность численной реализации (2.92) состоит в определении $q_{v''v'}$ -факторов. Поскольку их численный расчет сопряжен с определенными математическими сложностями решения уравнений Хартри–Фока для колебательных волновых функций, а литературные данные весьма ограничены, приходится использовать различные приближения. Например, в работе (Мнацаканян А.Х., 1968) для перехода $\text{NO}(X^2\Pi) - \text{NO}^+(X^1\Sigma)$ использовались $q_{v''v'}$ для δ -системы $\text{NO}(X^2\Pi - C^2\Pi)$, так как состояние $C^2\Pi$ принадлежит серии ридберговских состояний, ионизационным пределом которых является $\text{NO}^+(X^1\Sigma)$.

Отметим, однако, что данные по сечению фотоионизации $\sigma(\omega, T)$, приведенные в (Мнацаканян А.Х., 1968) для NO , свидетельствуют о слабой температурной зависимости, так что для приближенных оценок можно использовать (2.86).

2.4. Фотодиссоциация молекул

Сечение фотодиссоциации молекулы приближенно рассчитывается по формуле (2.86), где $\sigma(\omega)$ определяется из экспериментов в холодном газе или из более точных расчетов. Например, воспользовавшись результатами экспериментов (Ватанабе К., 1961) в холодном O_2 , сечение фотодиссоциации как функцию $\sigma(\omega)$ можно представить в виде

$$\sigma_{O_2}(\omega) = \begin{cases} 0.4, & 7.628 < \tilde{\omega} \leq 7.8616, \\ 2.2, & 7.452 < \tilde{\omega} \leq 7.628, \\ 7.0, & 7.289 < \tilde{\omega} \leq 7.452, \\ 12.0, & 6.583 < \tilde{\omega} \leq 7.289, \\ 12 \exp[-153(1/\tilde{\omega} - 0.1519)], & 5.714 < \tilde{\omega} \leq 7.8616. \end{cases} \quad (2.93)$$

По аналогии с расчетом сечений фотоионизации (формулы (2.91), (2.92)), в работе (Мнацакян А.Х., 1968) получено более обоснованное, чем (2.86) соотношение для сечения фотодиссоциации:

$$\sigma(\omega, T) = \frac{1.96 \times 10^4 \omega R_e^2(\omega)}{T} \sum_{\nu'} W_{\nu'} q_{\nu'}(\omega), \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}, \quad (2.94)$$

где $q_{\nu'}(\omega)$ плотность факторов Франка – Кондона, определяемая для волновых функций колебательного движения ядер в молекуле и разлетающихся атомов. В расчетах $q_{\nu'}(\omega)$ (Мнацакян А.Х., 1968) потенциальная кривая связанного молекулярного состояния полагается гармонической, а разлетающихся атомов – линейной.

Еще один приближенный метод расчета сечений фотодиссоциации применялся в работе (Стулов В.П. и др., 1995), где потенциальная энергия молекулы O_2 в основном состоянии $X^3\Sigma_g^-$ аппроксимировалась потенциалом Морзе, а потенциал взаимодействия разлетающихся атомов задавался в степенном виде. Применение основных идей работы (Френч Е.П., 1964) позволило отказаться от расчета функций $q_{\nu'}(\omega)$.

2.5. Свободно-свободные переходы в полях нейтральных частиц

Сечение поглощения при свободно-свободном переходе в поле нейтральной частицы $\sigma(\omega, T)$ приближенно выражается через сечение упругого рассеяния электрона на этой частице σ_0 . В расчетах (Авилова И.В. и др., 1970) использовалась формула, полученная в работе (Касьянов В.А. и др., 1965):

$$\sigma(\omega, T) = 0.228 \times 10^{10} T^{-2} \omega^{-3/2} x^{1/2} \exp(x) \kappa_2(x) \sigma_0, \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-2}, \quad (2.95)$$

где $x = 0.72\omega/T$; $\kappa_2(x)$ – функция Бесселя мнимого аргумента; σ_0 в 10^{-16} см²; T в К; ω в см⁻¹.

В работе (Каменщиков В.А. и др., 1971) использовалась модель (Фирсов О.Б. и др., 1960)

$$\sigma(\omega, T) = 0.228 \times 10^{10} T^{-1/2} \omega^{-3} (4 + 4.32\omega/T) \sigma_0, \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}. \quad (2.96)$$

Для получения объемного коэффициента поглощения в см⁻¹ сечение $\sigma(\omega, T)$ следует умножить на парциальное давление электронов и нейтральных частиц.

Сечения σ_0 могут быть оценены по аппроксимационным соотношениям (Dalgarno A., et al., 1966) для N₂, O₂, N, O, соответственно:

$$\begin{aligned} \sigma_{N_2} &= 4\pi a_0^2 10^{16} (0.22 + 4.1\sqrt{E} + 0.26E \lg E + 0.68E), \\ \sigma_{O_2} &= 4\pi a_0^2 10^{16} (1.2 + 2.8\sqrt{E} + 1.3E \lg E - 2.5E), \\ \sigma_N &= 4\pi a_0^2 10^{16} (1 + 4\sqrt{E} + 0.69E \lg E - 3.1E + 0.12E^{3/2}), \\ \sigma_O &= 4\pi a_0^2 10^{16} (0.2 + 0.14\sqrt{E} + 0.11E \lg E + 0.98E - 0.33E^{3/2}), \end{aligned} \quad (2.97)$$

где $E < 1.0$ эВ – тепловая энергия электронов.

Зависимости сечений σ_0 от энергии электронов E в диапазоне $\Delta E = 0.1 + 1.8$ эВ приведены в работе (Шкаровский И. и др., 1969). Оценочные значения величин даны в табл. 2.9.

Таблица 2.9

Усредненное сечение упругого столкновения электронов с нейтральными частицами

Частица	O ₂	N ₂	O	N	H ₂	CO	H ₂ O	CO ₂	H	He
$\sigma, 10^{-16}$ см ²	2.1	14	7	9	14	13	28	14	10	10

2.6. Поглощение молекул NO₂ и C₃

Заметный вклад в поглощение смесей газов, состоящих из кислорода, азота и углерода, могут вносить молекулы NO₂ и C₃. Оно обычно учитывается по эмпирическим зависимостям, по-

сколько эти процессы точно не отождествлены. Аппроксимация данных (Каменщиков В.А. и др., 1971; Churchill D.R., et al., 1966) для NO_2 дает

$$\sigma_{\text{NO}_2}(\omega, T) = 0.1\sigma^* \exp(-A), \text{ см}^2, \quad (2.98)$$

где
$$\sigma_1^* = -178 \left(10^4/\omega - 0.375\right)^2 + 5;$$

$$A_1 = 5119 \left(1/T - 1/3000\right) \left(\omega/10^4 - 3.57\right), \quad 26316 < \omega \leq 33333;$$

$$\sigma_2^* = \sigma_1^*;$$

$$A_2 = 5119 \left(1/T - 1/3000\right) \left(\omega/10^4 - 1.68\right), \quad 22222 < \omega \leq 26316;$$

$$\sigma_3^* = \exp \left[-3.246 \ln \left(10^4/\omega\right) - 1.21 \right];$$

$$A_3 = A_2, \quad 6667 < \omega \leq 22222.$$

В работе (Стулов В.П. и др., 1995) предложена аппроксимация экспериментальных данных (Brewer L., et al., 1962) по сечению поглощения в C_3 , которая может использоваться в формуле (2.93):

$$\sigma_{\text{C}_3}(\omega) = \begin{cases} 0, & \omega < 21000, \quad \omega > 34000, \\ 28 - 31 \left(\omega/10^4 - 2.5\right), & 25000 < \omega \leq 34000, \\ 28 + 70 \left(\omega/10^4 - 2.5\right), & 21000 < \omega \leq 25000. \end{cases} \quad (2.99)$$

ГЛАВА 3

МЕТОДЫ РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ В ЭЛЕКТРОННЫХ ПОЛОСАХ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

В данной главе рассмотрены простейшие методы расчета спектральных оптических свойств двухатомных молекул, обусловленных электронными квантовыми переходами. Излагаемые методы ориентированы, прежде всего, на компьютерную реализацию в расчетных кодах, предназначенных для использования в задачах физической механики.

3.1. Начальные сведения об электронно-колебательно-вращательных спектрах двухатомных молекул

Среди радиационных процессов в высокотемпературных газах и плазме электронные дипольные переходы в двухатомных молекулах занимают особое положение. С этими процессами тесно связаны задачи лучистого теплообмена, диагностики плазмы, исследования вероятностей переходов, а также экспериментальное определение фундаментальных спектроскопических констант молекул. Вместе с этим, исключительная сложность электронных спектров двухатомных молекул, даже по сравнению с атомным линейчатым спектром, и тем более с непрерывным спектром свободно-свободных и связанно-свободных переходов, делает особо привлекательным применение здесь компьютерных технологий.

Определим основные характеристики электронно-колебательно-вращательного спектра. Молекулярные спектры (электронно-колебательно-вращательные, колебательно-вращательные и

вращательные) возникают при переходах между электронными, колебательными и вращательными уровнями энергии. Этим уровням соответствуют молекулярные состояния, связанные с движением электронов, колебанием ядер и вращением молекулы как целого. При анализе молекулярного движения широко используется приближение, в соответствии с которым энергия молекулы представляется в виде суммы энергии вращательного E_J , колебательного E_v и электронного E_e движений. Это означает, что в уравнении Шредингера, описывающем полную волновую функцию, последняя может быть представлена в виде произведения волновых функций электронного и ядерного движений. Ядерная волновая функция, в свою очередь, представляется в виде произведения волновых функций колебательного и вращательного движений. Это приближение носит имя Борна и Оппенгеймера (Ландау Л.Д. и др., 1974; Кондратьев В.Н., 1959; Ельяшевич М.А., 2001; Татевский В.М., 1993; Степанов Н.Ф., 2001).

Отсюда следуют важные практические выводы, которые следует учитывать при расчетах спектров поглощения двухатомных молекул. Во-первых, электронные, колебательные и вращательные спектры двухатомных молекул лежат в разных областях спектра. Во-вторых, колебательно-вращательная структура электронного спектра всегда группируется вокруг местоположения электронного перехода, а вращательная – вблизи колебательного перехода. В результате наложения малых вращательных квантов на колебательные, линии колебательного спектра превращаются в полосы, представляющие собой группы вращательных линий. Согласно работе (Кондратьев В.Н., 1959) серии полос соответствуют колебательно-вращательным переходам с данного колебательного уровня на соседние.

Итак, полную энергию молекулы можно представить в виде суммы

$$E = E_e + E_v + E_J = hc_0 (T_e + G_v + G_J), \quad (3.1)$$

где c_0 – скорость света в вакууме.

Энергия электронного движения вокруг ядер E_e определяется их кинетической энергией и энергией потенциального взаи-

модействия с ядрами и с другими электронами. Она зависит от межъядерного расстояния. Такое расстояние r_e , при котором энергия E_e достигает своего минимума, называется равновесным межъядерным расстоянием. Численные методы расчета функции $E_e(r)$ являются очень громоздкими (см., например, (Барановский В.И. и др., 1976; Степанов Н.Ф., 2001)). Поэтому для $E_e(r)$ целесообразно использовать либо эмпирические соотношения, либо результаты предварительных *ab-initio* расчетов. Важным элементом расчетных методик является задание потенциалов межъядерного взаимодействия двухатомных молекул.

В практике приближенных расчетов используются аналитические зависимости для потенциальных кривых: потенциалы Морзе, гармонический, Ленарда–Джонса и другие. Среди них особенно широкое распространение получили гармонический и морзевский потенциалы. Гармонический потенциал имеет следующий вид:

$$U(r) = \frac{1}{2} K_{el} (r - r_e)^2, \quad (3.2)$$

где K_{el} – постоянная упругой связи (определяемая из условия равенства энергии диссоциации D_e электронной энергии E_e). Основным достоинством гармонического потенциала является то, что он позволяет получить точное решение уравнения Шредингера для колебательной волновой функции, и хорошо обоснован для низколежащих уровней энергии.

Потенциал Морзе имеет следующий вид:

$$U(r) = D_e \left\{ 1 - \exp[-\alpha(r - r_e)] \right\}^2, \quad (3.3)$$

где D_e и α – постоянные, характеризующие данную молекулу (D_e – энергия диссоциации, отсчитываемая от уровня с минимальным потенциалом). Этот потенциал также позволяет получить аналитическое выражение для колебательной волновой функции. В отличие от гармонического потенциала, где решением являются полиномы Эрмита, в случае потенциала Морзе решением являются обобщенные полиномы Лагерра (Кузьменко Н.Е. и др., 1984).

Положение колебательных уровней энергии в случае потенциала Морзе описывается формулой (Герцберг Г., 1974):

$$E_v = hc_0 G_v = hc_0 \left[\omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \right], \quad (3.4)$$

где v – колебательное квантовое число; ω_e – классическая частота собственных колебаний осциллятора; $\omega_e x_e$ – постоянная ангармоничности. Связь между постоянными ($\omega_e, \omega_e x_e$) и (D_e, α) следующая:

$$\omega_e x_e = \frac{\omega_e^2}{D_e}, \quad \alpha = 0.245 \sqrt{M (\omega_e x_e)}, \quad (3.5)$$

где M – масса молекулы в атомных единицах. Постоянная упругой связи K_{el} выражается через D_e и α следующим образом:

$$K_{el} = 2D_e \alpha.$$

Приблизить формулу (3.3) к описанию реальных молекулярных потенциалов позволяет введение дополнительных членов ряда (Хьюбер К.П. и др., 1984)

$$E_v = hc_0 \left[\omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \right. \\ \left. + \omega_e y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 + \omega_e z_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^4 \dots \right]. \quad (3.6)$$

Наиболее точными потенциалами межъядерного взаимодействия являются потенциалы Ридберга – Клейна – Риса (РКР), которые определяются численным методом (Кузьменко Н.Е. и др., 1984; Алехин Д.С. и др., 2005). На рис. 3.1 даны результаты расчетов РКР-потенциалов ряда электронных молекулярных состояний, представляющих большой практический интерес для аэрокосмических приложений*.

* Расчеты выполнены дипломником базовой кафедры Физической и химической механики МФТИ Д.С. Алехиным.

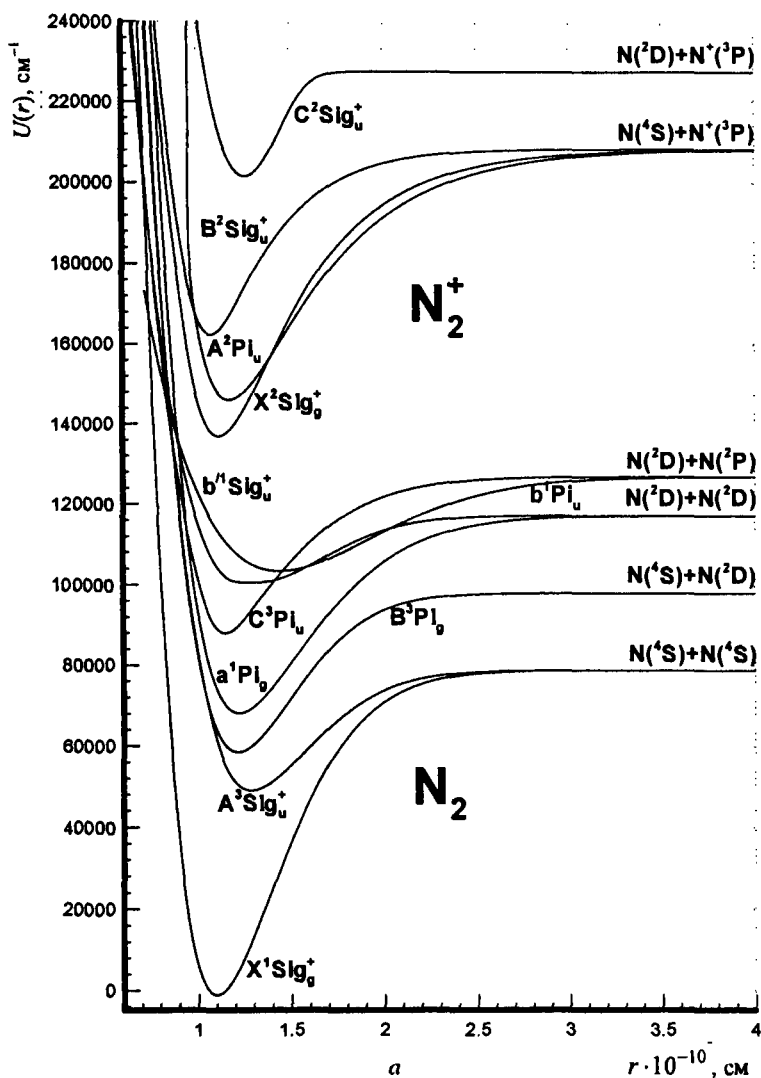


Рис. 3.1. Потенциалы межъядерного взаимодействия, рассчитанные с использованием РКР-модели (Алехин Д.С. и др., 2005) (Начало)

На каждом графике показана зависимость энергии межъядерного взаимодействия (cm^{-1}) от расстояния между ядрами (см). В расчетах потенциалов межъядерного взаимодействия использовалась гибридная расчетная методика, состоящая в совместном

использовании численных методов и компьютерной системы аналитических вычислений Maple-9.

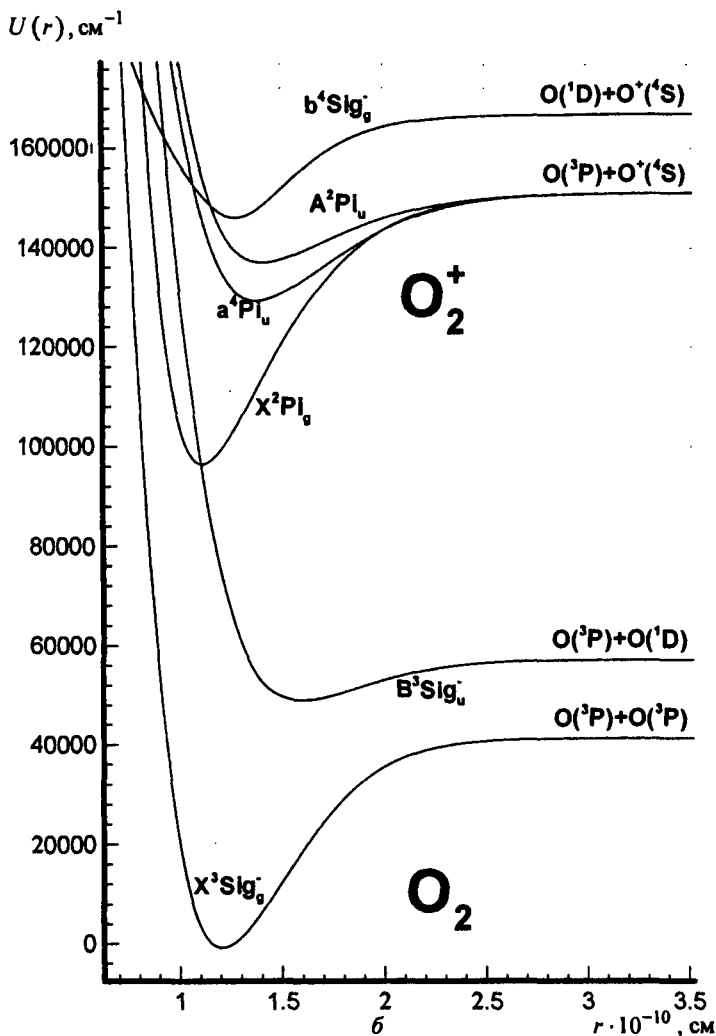


Рис. 3.1. (Продолжение)

Подробности разработанного алгоритма поиска точек сшивки потенциальных кривых внутри и вне потенциальной ямы приведены в работе (Алехин Д.С. и др., 2005). Там же представлены

спектроскопические константы, использовавшиеся при расчете энергии электронно-колебательных состояний. Как правило, они заимствовались из работы (Хьюбер К.П. и др., 1984). Однако следует учесть, что для ряда электронных состояний имеется неопределенность в задании указанных постоянных, что, несомненно, отразится на результатах расчета потенциальных кривых.

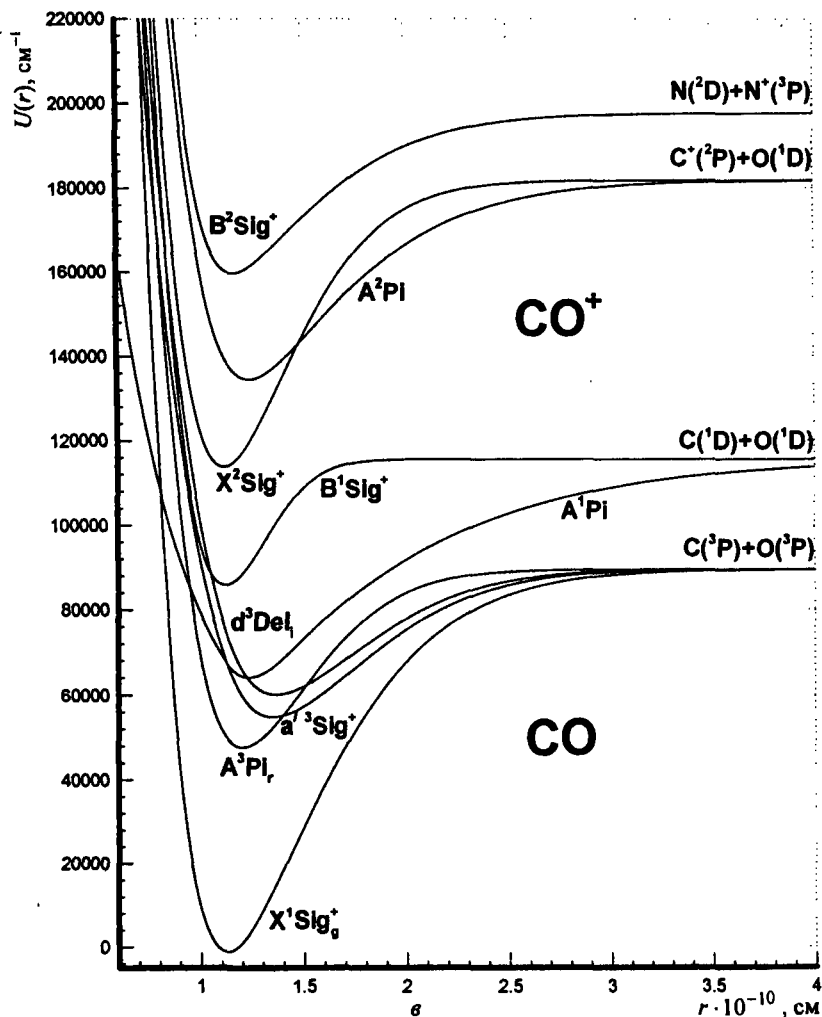


Рис. 3.1. (Продолжение)

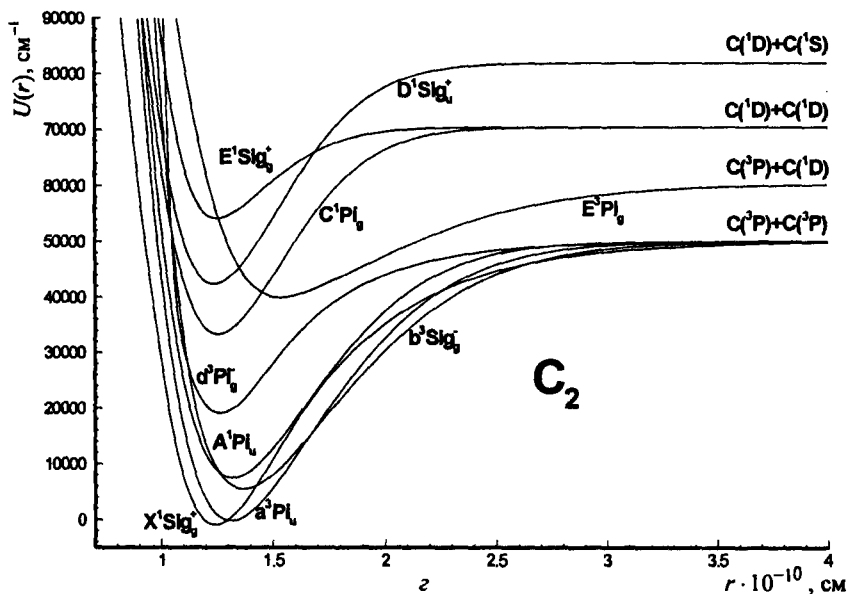


Рис. 3.1. (Продолжение)

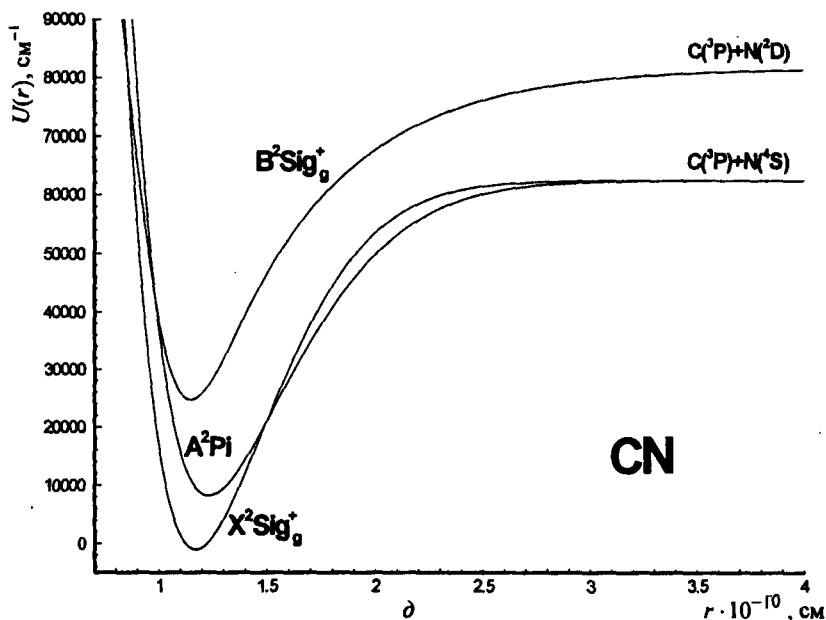


Рис. 3.1. (Окончание)

Энергия вращательного движения для жесткого ротатора находится по следующей формуле (Ельяшевич М.А., 2001; Кондратьев В.Н., 1959):

$$E_J = hc_0 [B_0 J(J+1)] = hc_0 G_J, \quad (3.7)$$

где J – вращательное квантовое число полного момента; B_0 – вращательная постоянная. Каждый вращательный уровень имеет вырождение по магнитному квантовому числу равное $(2J+1)$.

На энергию уровней помимо отмеченных взаимодействий между электронным, колебательным и вращательным движениями, значительное влияние оказывает спиновое движение. В приближении Борна – Оппенгеймера (которое также часто называется *адиабатическим приближением*) оператор полного момента молекулы складывается из оператора орбитального момента \hat{L} , оператора момента вращения \hat{R} и спинового момента электронов \hat{S} (Ельяшевич М.А., 2001; Кондратьев В.Н., 1959; Ландау Л.Д. и др., 1974). Характер энергетического спектра молекулы зависит от типа связи между этими моментами. Особенность классификации уровней энергии двухатомной молекулы объясняется тем, что в отличие от атомов, где электрическое поле обладает центральной симметрией, в двухатомной молекуле поле обладает аксиальной симметрией относительно оси, проходящей через два ядра. Поэтому здесь сохраняется проекция орбитального момента Λ на эту ось. По ней вводится классификация электронных термов двухатомных молекул: $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$ – называются $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$ состояниями (Герцберг Г., 1974; Радциг А.А. и др., 1980).

Каждое электронное состояние характеризуется полным спином S всех электронов. Если $S \neq 0$, то каждый уровень имеет $(2S+1)$ -кратное вырождение. А сама величина $(2S+1)$ называется мультиплетностью. Квантовое число Σ проекции суммарного спина S на межъядерную ось принимает значения $\Sigma = S, S-1, \dots, 1-S, -S$.

Третье квантовое число, положенное в основу классификации молекулярных состояний (Герцберг Г., 1974), определяется как $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$.

Классификация молекулярных термов с отличным от нуля спином, предложенная Гундом, основывается на установлении относительной роли, которую играет взаимодействие спина с орбитальным движением и с вращением. Поскольку основной характеристикой вращательного движения является расстояние между двумя соседними вращательными уровнями, то Гунд предложил рассмотреть два крайних случая: «а» и «b» соответственно тому, велика или мала энергия спин-орбитального взаимодействия по сравнению с разностями вращательных уровней. Установлено, что случай связи «b» встречается чаще у самых легких молекул (мал момент инерции – велико расстояние между вращательными уровнями, взаимодействие спина с осевым полем мало) и у Σ -термов, где мало взаимодействие спинового движения с осевым полем.

Возможны и промежуточные типы связей. Кроме этого, одно и то же электронное состояние может перейти от одного типа связи к другому по мере увеличения расстояния между вращательными уровнями (Ландау Л.Д. и др., 1974).

В расчетах синтетического спектра коэффициента поглощения вращательных линий электронно-колебательных переходов может оказаться необходимым учет и других тонких эффектов. Например, следует иметь в виду наличие в спектрах Λ -удвоения. Если провести отражение молекулы в плоскости, проходящей через ось, то ее энергия не изменится, а получившееся состояние не будет вполне тождественным с исходным (в случае $\Lambda \neq 0$). Если $\Lambda = 0$, то при отражении состояние молекулы не изменится, поэтому Σ -термы вырождены. На самом деле факт двукратного вырождения уровней при $\Lambda = 0$ является весьма приближенным. Из-за влияния вращения молекулы на электронное состояние происходит расщепление уровня на два близких. Это явление называют Λ -удвоением.

Расчеты с выделением мультиплетного расщепления, спин-спинового расщепления и Λ -удвоения характерны для молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Гурвич Л.В. и др., 1978; Kovacs I., 1969). В задачах переноса излучения (в особенности в задачах радиационной газовой динамики) никогда не только не

учитывают тонкую структуру спектра, но и используют его осреднение полностью по вращательной и даже по колебательной структуре. Однако этот факт, тем не менее, не дает основания для отказа от рассмотрения в некоторых случаях тонкой структуры спектра.

В большинстве практически важных случаев, рассматриваемых в механике излучающего газа, уровни вращательной энергии могут быть описаны в вырожденных и мультиплетных состояниях формулой

$$\frac{E_J}{hc_0} \cong B_v J(J+1) - D_v J^2 (J+1)^2, \quad (3.8)$$

$$B_v \cong B_e - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + \gamma \left(v + \frac{1}{2} \right)^2, \quad D_v \cong \bar{D}_e + \beta_e \left(v + \frac{1}{2} \right),$$

где B_e – вращательная постоянная в равновесном положении; \bar{D}_e – постоянная центробежного растяжения. Поэтому принимается, что статистический вес уровня, соответствующего квантовому числу J , для состояния с $\Lambda = 0$ и суммарным спином S , равен $(2J+1)(2S+1)$. В случае $\Lambda > 0$ из-за Λ -удвоения, статистический вес равен $2(2J+1)(2S+1)$.

Отметив основные особенности описания электронного спектра двухатомных молекул, перейдем теперь к анализу соотношений, позволяющих рассчитать положение и параметры вращательных линий колебательных полос. При этом обратим внимание на те особенности вращательной структуры, которые будут существенно использованы в дальнейшем.

Учитывая соотношение (3.1) для полной внутренней энергии молекулы, волновые числа отдельных линий электронного спектра представим формулой

$$\omega = (T_e' - T_e'') + (G_v' - G_v'') + (G_J' - G_J'') = \omega_e + \omega_v + \omega_J, \quad (3.9)$$

где штрихом отмечены верхние энергетические состояния, а двумя штрихами – нижние. Во избежание недоразумений в трактовке понятия вращательной линии целесообразно придерживаться определения (Кузьменко Н.Е. и др., 1984), считая, что вращательная

линия соответствует переходу между уровнями, вырожденными только по M . Расщепление уровня на $(2J + 1)$ -компоненту трактуется как возникновение $(2J + 1)$ -й составляющей вращательной линии. Снятие вырождения по Λ трактуется как возникновение двух вращательных линий.

Разность $(G_{e'} - G_{e''})$ называется волновым числом электронного перехода. Нулевой линией или началом колебательной полосы называют величину

$$\omega_{v',v''} = G_{e'} - G_{e''} + G_{v'} - G_{v''}, \quad (3.10)$$

которая соответствует переходу молекулы между состояниями с нулевой вращательной энергией.

В пределах колебательной полосы вращательные линии образуют структуру, называемую ветвями колебательных полос, число которых бывает разным. Выделяют три основных типа ветвей: Q -ветвь образуется при вращательных переходах с $\Delta J = 0$, R -ветвь образуется при $\Delta J = +1$, P -ветвь образуется при $\Delta J = -1$. Для некоторых ветвей в зависимости от знака разности $B_{v'} - B_{v''}$, вращательные линии по мере возрастания квантового числа могут сначала смещаться в красную или фиолетовую область спектра, а затем, достигнув некоторого положения (так называемого «канта») – в обратном направлении. При этом образуется характерная вращательная структура спектра с участками сильного сгущения линий вблизи канта и разряжения их в хвосте ветви. Если учитывать тонкую структуру спектра колебательных полос (Kovacs I., 1969), связанную с различным типом взаимодействий вращательного и спинового движений, то количество ветвей возрастает:

для синглетных переходов – 3 ветви,

для дуплетных переходов – 12 ветвей,

для триплетных переходов – 27 ветвей, и т.д.

Кроме положения вращательную линию характеризуют еще два параметра: интегральный коэффициент поглощения в линии $\alpha_{j,j'}$ и ее полуширина. Интегральный коэффициент поглощения электронно-колебательно-вращательной линии определяется, в свою очередь, вероятностью квантовых переходов и представляется в виде

$$\alpha_{J',J''} = h\omega_{J',J''} B_{J',J''}^{mn} N_{J''} c_0^{-1} = \frac{8\pi^3 h \omega_{J',J''} S_e q_{v',v''} S_{J',J''} N_{J''}}{3h^2 c_0 \kappa'' (2J'' + 1)}, \quad (3.11)$$

где $\omega_{J',J''}$ – волновое число центра линии; $B_{J',J''}^{mn}$ – коэффициент Эйнштейна для вынужденного поглощения при переходе из электронного состояния m в электронное состояние n ; $N_{J''}$ – число молекул во вращательном состоянии с квантовым числом J'' ; $S_e = S_e(r_{v',v''})$ – сила электронного перехода; $q_{v',v''}$ – вероятность колебательного перехода (фактор Франка – Кондона); $S_{J',J''}$ – вероятность вращательного перехода (фактор Хенля – Лондона); κ'' – коэффициент, определяемый нормировкой факторов Хенля – Лондона.

В условиях ЛТР заселенность $N_{J''}$ определится из условия Больцмановского распределения частиц по энергии:

$$N_{J''} = N g_I (2J + 1) Q_{in}^{-1} Q_n^{-1} \exp[-(E_m + E_{v'} + E_{J''})/kT], \quad (3.12)$$

где N – общее число частиц; g_I, Q_n – ядерный статистический вес и статистическая сумма (табл. 3.1); Q_{in} – внутренняя статистическая сумма:

$$Q_{in} = \sum_e Q_e \sum_v Q_v \sum_J Q_J, \quad Q_e = (2 - \delta_{0,\Lambda}) (2S + 1) \exp(-E_e/kT),$$

$$Q_v = \exp(-E_v/kT), \quad Q_J = (2J + 1) \exp(-E_J/kT). \quad (3.13)$$

Таблица 3.1 а

**К расчету заселенностей энергетических состояний
двухатомных молекул**

	Гомоядерные молекулы	Гетероядерные молекулы
g_I	$g_I^s = (I+1)(2I+1)$ $g_I^a = I(2I+1)$	Q_n
Q_n	$(2I+1)^2/2$	$(2I_1+1)(2I_2+1)$

Таблица 3.1 б

Спины ядер

Элементы	H	He	C	N	O	Si	Ar
I	1/2	0	0	1	0	0	0

Таблица 3.1 в

Симметрия (a, s) и четность (+, -) вращательных состояний двухатомных молекул

Гомоядерные молекулы					Гетероядерные молекулы						
J	0	1	2	3	...	J	0	1	2	3	...
Σ_g^+	+	-	+	-		Σ^+	+	-	+	-	
Σ_u^+	+	-	+	-		Σ^-	-	+	-	+	
Π_g		+, -	+, -	+, -		Π		+-	-+	+-	
Π_u		+, -	-, +	+, -							
		a, s	s, a	a, s							

Особенности расчета статистических сумм двухатомных молекул обсуждаются в работах (Гурвич Л.В. и др., 1978; Годнев И.Н., 1956; Giordano D., et al., 1994).

Электронная сила перехода S_e так же, как и $q_{v',v''}$, и $S_{J',J''}$, по физическому смыслу является вероятностью перехода. Строгие соотношения для них в общем виде позволяет получить квантово-механическая теория излучения (Кузнецова Л.А. и др., 1980).

Сила оптического перехода в молекуле S_{mn} непосредственно связана с коэффициентом Эйнштейна в (3.11)

$$B^{mn} = 8\pi^3 S_{mn} / 3h^2 g_m,$$

где g_m – статистический вес состояния m . Дальнейшие преобразования силы перехода S_{mn} к произведению вероятностей электронного, колебательного и вращательных переходов связаны с разделением переменных в волновой функции и вычислением квадратов матричных элементов. Представление волновой функции в виде соответствующего произведения приводит в конечном виде к обсуждаемому виду силы электронно-колебательно-вращательного перехода.

Подробный обзор работ по расчету и нормировкам вероятностей электронных, колебательных и вращательных переходов выполнен в работах (Кузнецова Л.А. и др., 1980; Кузьменко Н.Е. и др., 1984). Вывод соотношений для вероятностей переходов можно найти также в работе (Пеннер С.С., 1963).

3.2. Расчет сил электронных переходов S_e

В литературе, посвященной этому вопросу, для описания вероятностей электронных переходов в экспериментальных и теоретических исследованиях используются различные характеристики: силы осцилляторов, силы электронных переходов, квадраты матричных элементов дипольных моментов. Связь между ними установлена в работе (Кузьменко Н.Е. и др., 1984).

Наиболее надежными способами определения сил электронных переходов являются экспериментальные методы. На опыте и в расчетах установлено, что приближение Борна – Оппенгеймера является чрезмерно грубым для многих молекулярных систем, поэтому силы электронных переходов приходится определять с учетом межъядерного расстояния $S_e(r)$. Аппроксимации $S_e(r)$ строятся относительно переменной, называемой r -центроидой:

$$r_{v',v''} = \int \psi_{v'} r \psi_{v''} dr / \int \psi_{v'} \psi_{v''} dr, \quad (3.14)$$

где ψ_v – волновая функция колебательного состояния; r – межъядерное расстояние. Однако в расчетных кодах, предназначенных для механики излучающего газа, более удобным оказывается применение зависимостей $S_e(\lambda)$ (λ – длина волны), однозначно связанных с $S_e(r_{v',v''})$. Аппроксимации $S_e(\lambda)$, точность которых по отношению к аппроксимациям $S_e(r_{v',v''})$ не хуже 10%, приведены для 35 электронных переходов в работе (Кузьменко Н.Е. и др., 1982). Некоторые из них, вместе с постоянными значениями S_e , заимствованными из работы (Кузьменко Н.Е. и др., 1984), даны в табл. 3.2. Табличные значения силы перехода справедливы лишь в некотором диапазоне изменения длин волн. Вне этого диапазона значение S_e полагается постоянным и не зависящим от длины

волны. Этот прием является весьма приближенным. Однако при отсутствии других данных им можно пользоваться, так как на краях полос вероятность колебательных переходов падает.

Таблица 3.2

Силы электронных переходов двухатомных молекул

Молекула	Электронный переход	S_e , атомные единицы, λ , нм	Спектральный диапазон, $\Delta\lambda$, нм
C ₂	d ³ Π - a ³ Π	$18.4(1 - 4.33 \times 10^{-3} \lambda + 3.01 \times 10^{-6} \lambda^2)^2$	435 ÷ 680
CN	A ² Π - X ² Σ	$0.304(1 + 0.215 \times 10^{-3} \lambda + 0.0603 \times 10^{-6} \lambda^2)^2$	560 ÷ 1505
CN	B ² Σ - X ² Σ	$0.857(1 + 0.108 \times 10^{-3} \lambda)^2$	360 ÷ 460
CO	A ¹ Π - X ¹ Σ	$0.0104(\lambda \times 10^{-3})^{-2.15}$	128 ÷ 250
CO	B ¹ Σ - A ¹ Π	$0.585(1 + 0.0162 \times 10^{-3} \lambda)^2$	410 ÷ 560
CO	b ³ Σ - a ³ Π	$953(1 - 7.077 \times 10^{-3} \lambda + 17.57 \times 10^{-6} \lambda^2 - 15.38 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	265 ÷ 350
CO ⁺	A ² Π - X ² Π	$20.37(1 - 6.41 \times 10^{-3} \lambda + 12.29 \times 10^{-6} \lambda^2 - 7.7 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	325 ÷ 550
CO ⁺	B ² Σ - X ² Σ	$3.1 \exp(-12.15 \times 10^{-3} \lambda)$	200 ÷ 275
H ₂	B ¹ Σ - X ¹ Σ	$2.36(1 - 23.9 \times 10^{-3} \lambda + 71.8 \times 10^{-6} \lambda^2)^2$	90 ÷ 115
H ₂	C ¹ Π - X ¹ Σ	$0.024(1 + 55.0 \times 10^{-3} \lambda)$	85 ÷ 111
N ₂	B ³ Π - A ³ Σ	$0.355(1 + 0.366 \times 10^{-3} \lambda - 0.316 \times 10^{-6} \lambda^2)^2$	540 ÷ 7300
N ₂	C ³ Π - B ³ Π	$457(1 - 8.046 \times 10^{-3} \lambda + 19.65 \times 10^{-6} \lambda^2 - 15.76 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	280 ÷ 470

Продолжение табл. 3.2

Молекула	Электронный переход	S_e , атомные единицы, λ , нм	Спектральный диапазон, $\Delta\lambda$, нм
N_2	$A^3\Sigma - X^1\Sigma$	$625 \times 10^{-8} (1 - 11.8 \times 10^{-3} \lambda + 44.22 \times 10^{-6} \lambda^2 - 50.47 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	155 ÷ 390
N_2^+	$A^2\Pi - X^2\Sigma$	$0.516 (1 - 0.461 \times 10^{-3} \lambda + 0.169 \times 10^{-6} \lambda^2 - 0.0262 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	550 ÷ 4190
N_2^+	$B^2\Sigma - X^2\Sigma$	$380 (1 - 6.735 \times 10^{-3} \lambda + 15.55 \times 10^{-6} \lambda^2 - 11.62 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	305 ÷ 525
NO	$A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$	$60.9 (1 - 12.55 \times 10^{-3} \lambda + 52.7 \times 10^{-6} \lambda^2 - 71.1 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	185 ÷ 300
NO	$B^2\Sigma - X^2\Pi$	$0.75 (1 - 9.94 \times 10^{-3} \lambda + 41.6 \times 10^{-6} \lambda^2 - 47.4 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	170 ÷ 450
NO^+	$A^1\Pi - X^1\Sigma$	$0.023 (1 + 44.2 \times 10^{-3} \lambda - 266 \times 10^{-6} \lambda^2)^2$	130 ÷ 165
O_2	$B^3\Sigma_u^+ - X^3\Sigma_g^-$	$0.117 \times 10^{-6} (\lambda \times 10^{-3})^{-1.74}$	250 ÷ 500
O_2	$B^2\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$	$5.5 (1 - 3.09 \times 10^{-3} \lambda + 6.18 \times 10^{-6} \lambda^2 - 4.99 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	175 ÷ 450
O_2^+	$A^2\Pi - X^2\Pi$	$0.39 (\lambda \times 10^{-3})^{0.58}$	190 ÷ 1250
O_2^+	$b^4\Sigma - a^4\Pi$	$9.15 (1 - 3.898 \times 10^{-3} \lambda + 3.942 \times 10^{-6} \lambda^2 - 1.348 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	530 ÷ 1210
OH	$A^2\Sigma - X^2\Pi$	$468.9 (1 - 9.041 \times 10^{-3} \lambda + 28.02 \times 10^{-6} \lambda^2 - 29.57 \times 10^{-9} \lambda^3)^2$	280 ÷ 343
C_2	$b^3\Sigma_g^- - a^3\Pi_u$	0.65	1100 ÷ 2700
C_2	$e^3\Pi_g - a^3\Pi_u$	0.4	237 ÷ 328

Окончание табл. 3.2

C ₂	D ¹ Σ _u ⁺ - X ¹ Σ _g ⁺	0.38	231 ÷ 241
C ₂	c ¹ Π _g - A ¹ Π _u	1.73	339 ÷ 411
C ₂	E ¹ Σ _g - A ¹ Π _u	2.26	207 ÷ 222
CO	B ¹ Σ ⁺ - X ¹ Σ ⁺	0.03	110 ÷ 115
CO	c ¹ Σ ⁺ - A ¹ Π	0.37	104 ÷ 111
CO	c ¹ Σ ⁺ - A ¹ Π	0.54	368 ÷ 521
CO	E ¹ Π - X ¹ Σ ⁺	0.22	105 ÷ 108
CO	e ³ Σ ⁻ - a ³ Π	1.23	427 ÷ 453
CO	a ³ Σ ⁺ - a ³ Π	0.405	390 ÷ 860
CO	c ³ Π - a ³ Π	3.4	230 ÷ 271
CO	d ³ Δ - a ³ Π	0.65	377 ÷ 750
CO ⁺	B ² Σ ⁺ - A ² Π	0.104	330 ÷ 420
N ₂	a ¹ Π _g - X ¹ Σ _g ⁺	0.000034	109 ÷ 260
N ₂	b ¹ Σ _u ⁺ - X ¹ Σ _g ⁺	0.6	83 ÷ 96
N ₂	b ¹ Π _u - X ¹ Σ _g ⁺	0.8	85 ÷ 99
N ₂	D ³ Σ _u ⁺ - B ³ Π _g	1.68	225 ÷ 291
N ₂	c ¹ Π _u - X ¹ Σ _g ⁺	0.12	86 ÷ 96
NO	C ² Π - A ² Σ	53.2	1205 ÷ 1235
NO	C ² Π - X ² Π	0.36	184 ÷ 210
NO	B ² Δ - X ² Π	0.116	140 ÷ 200
NO	D ² Σ ⁺ - A ² Σ ⁺	12.0	1085 ÷ 1130
NO	D ² Σ ⁺ - X ² Π	0.32	170 ÷ 190
C ₂	A ¹ Π _u - X ¹ Σ _g ⁺	0.38	672 ÷ 1549

Использование результатов *ab-initio* расчетов сил электронных переходов позволяет значительно расширить спектральную область определения S_e и более корректно задать спектральную область, занимаемую электронно-колебательной полосой в суммарном спектре поглощения и испускания.

3.3. Расчет вероятностей вращательных переходов. Факторы Хенля – Лондона

Обзор методов расчета и нормировки факторов Хенля – Лондона представлен в работе (Кузьменко Н.Е. и др., 1984). Имеются обширные таблицы расчетных формул (Kovacs I., 1969). Следует иметь в виду работу (Whiting E.E, et al., 1973), где представлены уточнения таблиц (Kovacs I., 1969). В зарубежной литературе широко используется программа (Whiting E.E, 1973).

Исследовать закономерности лучистого теплообмена в физической механике позволяют упрощенные соотношения, представленные в (Пеннер С.С., 1963).

Обозначим вероятность вращательного перехода из нижних электронного (m), колебательного (v'') и вращательного (J'') состояний с проекцией орбитального момента Λ'' в верхние электронное (n), колебательное (v') и вращательное (J') состояния с Λ' , следующим образом: $S_{m, v'', J'', \Lambda''}^{n, v', J', \Lambda'}$. Тогда в зависимости от комбинаций квантовых чисел J', J'' и Λ', Λ'' в случае $\Lambda \neq 0$ имеются соотношения

$$S_{m, v'', J'', \Lambda''}^{n, v', J', \Lambda'} = \begin{cases} \frac{(2J''+1)\Lambda^2}{J''(J''+1)}, & \Lambda' = \Lambda'' = \Lambda, \\ \frac{(J''+1+\Lambda'')(J''-\Lambda'')(2J''+1)}{4J''(J''+1)}, & \Lambda' = \Lambda'' + 1, \\ \frac{(J''+1-\Lambda'')(J''+\Lambda'')(2J''+1)}{4J''(J''+1)}, & \Lambda' = \Lambda'' - 1; \end{cases} \quad (3.15)$$

$$S_{m, v'', J'', \Lambda''}^{n, v', J'+1, \Lambda'} = \begin{cases} \frac{(J''+1+\Lambda'')(J''+1-\Lambda'')}{(J''+1)}, & \Lambda' = \Lambda'' = \Lambda, \\ \frac{(J''+2+\Lambda'')(J''+1+\Lambda'')}{4(J''+1)}, & \Lambda' = \Lambda'' + 1, \\ \frac{(J''+2-\Lambda'')(J''+1-\Lambda'')}{4(J''+1)}, & \Lambda' = \Lambda'' - 1; \end{cases} \quad (3.16)$$

$$S_{m, \nu', J', \Lambda'}^{n, \nu, J, \Lambda} = \begin{cases} \frac{(J'' + \Lambda'')(J'' - \Lambda'')}{J''}, & \Lambda' = \Lambda'', \\ \frac{(J'' - 1 - \Lambda'')(J'' - \Lambda'')}{4J''}, & \Lambda' = \Lambda'' + 1, \\ \frac{(J'' - 1 + \Lambda'')(J'' + \Lambda'')}{4J''}, & \Lambda' = \Lambda'' - 1. \end{cases} \quad (3.17)$$

Напомним, что факторы Хенля – Лондона, характеризующие переходы при постоянном вращательном квантовом числе $J' = J''$ (3.15), соответствуют Q -ветви, а с увеличением квантового числа $J' = J'' + 1$ (3.16) соответствуют R -ветви, и с уменьшением $J' = J'' - 1$ (3.17) – P -ветви. Эти формулы получены в приближении симметричного волчка. Если $\Delta\Lambda = 0$, то можно использовать весьма удобную формулу Хенля – Лондона (Пеннер С.С., 1963):

$$S_{m, \nu', J', \Lambda'}^{n, \nu, J, \Lambda} = \frac{(J' + \Lambda'')(J' - \Lambda'') \delta_{J'-1, J'}}{J'} + \frac{(J' + 1 + \Lambda'')(J' + 1 - \Lambda'') \delta_{J'+1, J'}}{(J' + 1)} + \frac{(2J' + 1) \Lambda''^2 \delta_{J', J'}}{J'(J' + 1)}, \quad (3.18)$$

где δ_{ij} – дельта-символ Кронекера.

При расчете вращательной структуры электронно-колебательных полос необходимо иметь критерий ограничения числа учитываемых линий. В качестве одного из таких критериев удобно использовать линейную зависимость максимального вращательного числа от соответствующего колебательного квантового числа (Гурвич Л.В. и др., 1978):

$$J_{\max}(\nu) = J_{\lim} \left[1 + \frac{(\nu + 1/2)}{(\nu_{\max} + 3/2)} \right], \quad (3.19)$$

где ν_{\max} и J_{\lim} являются молекулярными постоянными, характерными для электронного состояния. Если эти постоянные неизвестны, то для оценки максимального вращательного квантового числа можно приравнять вращательную энергию данного состояния разности между колебательными энергиями текущего и последующего колебательных состояний.

3.4. Расчет вероятностей колебательных переходов. Факторы Франка – Кондона

Для нахождения вероятности колебательного перехода необходимо решить уравнение Шредингера относительно волновой функции колебательного движения ядер. Применение программ расчета факторов Франка – Кондона (q -факторов) в рамках расчетных кодов физической механики неэффективно из-за низкой экономичности. Поэтому используются либо табличные данные (из специально организованной локальной базы данных), либо приближенные методы расчета q -факторов.

В работе (Кузьменко Н.Е. и др., 1984) проанализированы, рекомендованы для практического использования и представлены в виде таблиц Деландера значения q -факторов более чем для 400 электронных переходов. При введении таблиц факторов Франка – Кондона в базу данных расчетного кода ключевыми являются только три параметра: имя электронного перехода, значения ν'' и ν' . В задачах теплообмена излучением точность табличного представления q -факторов оказывается вполне достаточной. Однако следует иметь в виду, что для некоторых молекулярных систем, особенно при больших значениях колебательных квантовых чисел, необходимо учитывать колебательно-вращательные взаимодействия. Критерии учета такого взаимодействия обсуждаются в (Кузьменко Н.Е. и др., 1984).

3.5. Приближенный расчет факторов Франка – Кондона для низколежащих колебательных уровней

В этом частном, но практически важном случае, применяется приближение гармонического осциллятора, в котором получены аналитические формулы (Nicholls R.W., 1982), проверенные для большего числа полос в (Кузьменко Н.Е. и др., 1984). Эти соотношения являются однопараметрическими и исключительно удобны для использования. Единственный параметр u определяется следующим образом:

$$u = \frac{s^2}{2}, \quad s = 0.172 \sqrt{M} \tilde{\omega}_e (r_{e'} - r_{e''}), \quad \tilde{\omega}_e = \frac{2 \sqrt{\omega_{e'} \omega_{e''}}}{\sqrt{\omega_{e'} + \omega_{e''}}}, \quad (3.20)$$

а формулы для расчета q -факторов имеют вид

$$q(0, v) = \frac{u^v \exp(-u)}{0!v!}, \quad v \geq 0;$$

$$q(1, v) = \frac{u^{v-1} \exp(-u)}{1!v!} (u-v)^2, \quad v \geq 1;$$

$$q(2, v) = \frac{u^{v-2} \exp(-u)}{2!v!} \left[(u-v)^2 - v \right]^2, \quad v \geq 2;$$

$$q(3, v) = \frac{u^{v-3} \exp(-u)}{3!v!} \left\{ (u-v)^3 - v \left[3(u-v) + 2 \right] \right\}^2, \quad v \geq 3;$$

$$q(4, v) = \frac{u^{v-4} \exp(-u)}{4!v!} \times \\ \times \left\{ (u-v)^4 - v \left[6(u-v)^2 + 8(u-v) - 3(v-2) \right] \right\}^2, \quad v \geq 4;$$

$$q(5, v) = \frac{u^{v-5} \exp(-u)}{5!v!} \left\{ (u-v)^5 - v \left[10(u-v)^3 + 20(u-v)^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - 15(u-v)(v-2) - 4(5v-6) \right] \right\}^2, \quad v \geq 5.$$

Приведенные соотношения можно применять только при $v < 6$.

3.6. Расчет факторов Франка – Кондона для высоколежащих колебательных уровней

Для очень грубой оценки может использоваться простая модель осреднения. За основу расчетов берется правило сумм (Кузьменко Н.Е. и др., 1984) q -факторов:

$$\sum_{v'} q_{v', v''} = \sum_{v''} q_{v', v''} = 1. \quad (3.21)$$

Когда одно из колебательных чисел, например ν' , оказывается меньше 6, расчет $q_{\nu',\nu''}$ проводится по формуле

$$q_{\nu',\nu''} = \frac{1 - \sum_{\nu''}^6 q_{\nu',\nu''}}{\nu_{\max} - 6}. \quad (3.22)$$

Другими словами, с учетом правила сумм q -факторы принимаются постоянными вне области $(\nu' \times \nu'') = (6 \times 6)$. Следует подчеркнуть, что такой метод можно использовать только для предварительных грубых оценок.

Если $\nu > 6$, то можно использовать квазиклассическое приближение (Биберман Л.М. и др., 1960; Бутырская Е.В. и др., 1980).

3.7. Коэффициенты поглощения электронных переходов двухатомных молекул, усредненные по вращательной структуре

Спектральные коэффициенты поглощения и испускания двухатомных молекул используются при решении широкого круга задач радиационного переноса. В разных задачах требуется различная степень подробности описания молекулярного спектра. Своей спецификой обладают и задачи переноса теплового излучения. Отличительной особенностью таких задач является необходимость определения радиационных характеристик (плотности лучистой энергии, плотности радиационных потоков, дивергенции радиационных потоков), усредненных (интегрированных) в достаточно широких (по сравнению с шириной вращательной линии) спектральных диапазонах.

Можно указать три характерных размера спектральных диапазонов, в пределах которых определяются интегральные радиационные характеристики:

$$\Delta\omega_1 \sim 10 \div 100 \text{ см}^{-1},$$

$$\Delta\omega_2 \sim 200 \div 2000 \text{ см}^{-1},$$

$$\Delta\omega_3 \sim 5000 + 20000 \text{ см}^{-1} \text{ и более.}$$

Первый случай отвечает спектральным диапазонам, в которых производится усреднение по вращательной структуре. Такая подробность описания спектра широко используется при спектральной диагностике состояния газа и низкотемпературной плазмы за ударными волнами, в струях продуктов сгорания авиационных и ракетных двигателей, в струях плазмотронов различного типа (Park Ch., 1990; Laux C.O., et al., 1995; Schopemann A.T., et al., 1995). Спектральное разрешение порядка $\Delta\omega_1$ можно считать наиболее высоким в задачах переноса теплового излучения.

Второй диапазон соответствует тем случаям, когда приемлемым оказывается усреднение молекулярного спектра по колебательной структуре. Такие диапазоны используются, как правило, в многогрупповых моделях спектра (модели с числом участков усреднения больше $\sim 10 - 20$), применяющихся при решении задач теплообмена излучением в различных энергетических устройствах, а также в радиационной газовой динамике (Park Ch., 1990; Surzhikov S.T., 1996; Суржиков С.Т., 1997 (а, б)). И, наконец, третий диапазон соответствует малогрупповым моделям, в которых число участков усреднения спектра не превосходит ~ 10 . Такие модели наиболее широко применяются в задачах радиационной газовой динамики с сильным радиационно-газодинамическим взаимодействием, которые отличаются исключительно высокой трудоемкостью, а следовательно, требуют наиболее экономичных спектральных моделей.

Для трех указанных классов спектральных моделей имеются общие проблемы и первая из них – обоснование допустимости использования того или иного типа усреднения спектральных коэффициентов поглощения. Суть этой проблемы проще всего пояснить на примере использования моделей усреднения по вращательной структуре спектра. В результате такого усреднения в спектральном диапазоне $\Delta\omega_1$ вводится некоторый средний коэффициент поглощения. При решении задач переноса излучения этот коэффициент поглощения считается функцией координаты расчетной точки. Он используется при интегрировании уравнения переноса излучения вне зависимости от оптической толщины ис-

следуемых объемов. Однако это справедливо только для оптически тонких слоев. А в случаях переноса излучения в линейчатом спектре в оптических слоях промежуточной и большой оптической толщины усредненный коэффициент поглощения можно вводить только как нелокальную характеристику среды, определяемую поведением спектрального коэффициента поглощения на всем оптическом пути. Тем не менее, модели усреднения широко применяются в практике расчетов переноса излучения, и методическая проблема вычислительного характера состоит в разработке способов оценки точности таких моделей в каждом конкретном случае.

Вторая не менее важная задача связана с информационным обеспечением вычислительных моделей достоверной исходной информацией, фундаментальными спектроскопическими и радиационными характеристиками двухатомных молекул. Если спектроскопические константы для большого числа двухатомных молекул приведены в ряде хорошо известных справочников (Гурвич Л.В. и др., 1978; Хьюбер К.П. и др., 1984), то справочников с радиационными константами практически нет.

Следующая проблема возникает при решении задач, требующих достаточно подробного описания спектра. В этих случаях оказывается необходимым позаботиться об использовании согласованных значений вероятностей электронных и вращательных переходов, статистических весов вращательных уровней, учете чередования интенсивностей в спектрах гомоядерных молекул.

3.7.1. Интегральные коэффициенты поглощения вращательных линий

В соответствии с общепринятыми в настоящее время рекомендациями (Whiting E.E., et al., 1980) вращательным уровнем двухатомной молекулы называется уровень, вырожденный только по магнитному квантовому числу $gJ = (2J + 1)$. Для мультиплетных электронных состояний каждый колебательный уровень имеет $(2 - \delta_{0,\Lambda})(2S + 1)$ вращательных уровней с одним и тем же зна-

чением J . Переходу между двумя вращательными уровнями, определенными таким способом и принадлежащими различным электронно-колебательным термам, соответствует вращательная линия в электронном спектре. Ее интегральный коэффициент поглощения может быть записан как

$$\alpha_{J',J''} = \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) N_{J''} \omega_{J',J''} \left| \langle v' | R_e(r) | v'' \rangle \right|^2 \frac{S_{J',J''}}{2J''+1}, \quad (3.23)$$

где $\omega_{J',J''}$ – волновое число центра линии; $\langle v' |$ и $| v'' \rangle$ – колебательные волновые функции верхнего и нижнего электронных состояний соответственно; $R_e(r)$ – момент электронного перехода, зависящий от межъядерного расстояния; $N_{J''}$ – заселенность вращательного уровня J'' ; $S_{J',J''}$ – фактор Хенля–Лондона; h – постоянная Планка; c – скорость света.

Следует подчеркнуть, что имеется однозначная связь между нормировкой факторов Хенля–Лондона и определением момента электронного перехода. В соответствии с рекомендациями (Whiting E.E., et al., 1980) для спин-разрешенных переходов

$$\sum_{J'} S_{J',J''} = (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''}) (2S+1) (2J''+1), \quad (3.24)$$

где S – квантовое число суммарного спина электронов; Λ – квантовое число, отвечающее собственному значению оператора проекции орбитального момента электронов на межъядерную ось; δ – символ Кронекера ($\delta_{0\Lambda} = 1$, если $\Lambda = 0$; $\delta_{0\Lambda} = 0$, если $\Lambda \neq 0$).

В уравнении (3.24) суммирование факторов Хенля–Лондона выполняется для всех разрешенных переходов с $(2 - \delta_{0,\Lambda}) (2S+1)$ вращательных уровней с данным значением J .

Если пренебречь зависимостью момента электронного перехода от межъядерного расстояния (т.е. воспользоваться *адиабатическим* приближением), то для интегральных коэффициентов поглощения спин-разрешенных переходов получим

$$\alpha_{J',J''} = \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) \omega_{J',J''} \frac{S_e}{g} q_{v',v''} S_{J',J''} \frac{N_{J''}}{2J''+1}. \quad (3.25)$$

Здесь $q_{v',v''}$ – вероятность колебательного перехода (фактор Франка–Кондона); S_e – сила электронного перехода. Эта величина часто используется при расчете переноса излучения, с моментом электронного перехода она связана следующим соотношением:

$$S_e = gR_e^2, \quad g = (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})(2S+1). \quad (3.26)$$

В условиях локального термодинамического равновесия

$$N_{J''} = N \frac{g_I^{a,s} (2J''+1)}{Q_\Sigma Q_n} \exp \left[-\frac{hc}{kT} (E_{e''} + E_{v''} + E_{J''}) \right], \quad (3.27)$$

где $E_{e''}$, $E_{v''}$, $E_{J''}$ – энергия электронного, колебательного и вращательного состояний; h , k – постоянные Планка и Больцмана; T – температура; N – объемная концентрация молекул, находящихся на всех энергетических уровнях; Q_n – ядерная статистическая сумма; Q_Σ – полная внутренняя статистическая сумма.

Статистические суммы рассчитываются по следующим формулам:

$$Q_n = (2I_1 + 1)(2I_2 + 1)\sigma^{-1}, \quad (3.28)$$

$$Q_\Sigma = \sum_e Q_e \sum_v Q_v \sum_J Q_J, \quad (3.29)$$

$$Q_e = (2 - \delta_{0,\Lambda})(2S+1) \exp \left(-\frac{hc}{kT} E_e \right),$$

$$Q_v = \exp \left(-\frac{hc}{kT} E_v \right),$$

$$Q_J = (2J+1) \exp \left(-\frac{hc}{kT} E_J \right),$$

где v, J – колебательное и вращательное квантовые числа; I_1, I_2 – спины ядер; σ – число симметрии (1 – для гетероядерных молекул, 2 – для гомоядерных молекул); $g_I^{a,s}$ – ядерный статистический вес; индекс «e» обозначает электронное состояние.

Для гетероядерных молекул

$$g_I^{a,s} = Q_n$$

Для гомоядерных молекул:

– для антисимметричного вращательного уровня

$$g_I^{a,s} = g_I^a = I(2I+1),$$

– для симметричного вращательного уровня

$$g_I^{a,s} = g_I^s = (I+1)(2I+1).$$

Признаки симметрии для различных вращательных состояний приведены в работах (Herzberg G., 1971; Кузнецова Л.А. и др., 1980). Значения ядерных спинов даны на стр. 133, 134 (п. 3.1) и в работе (Радциг А.А. и др., 1980).

Анализ формулы (3.29) показывает, что с вычислительной точки зрения здесь имеются определенные проблемы: в явном виде не определены пределы суммирования по всем энергетическим состояниям. Верхний предел суммирования по электронным состояниям определяется, как правило, из знания структуры электронных уровней энергии в молекуле. Наиболее полная информация об электронной структуре приведена в работе (Хьюбер К.П. и др., 1984). Предельное значение колебательных квантовых чисел для каждого электронного состояния может быть оценено при сопоставлении колебательной энергии уровня с энергией диссоциации D_e , отвечающей данному электронному состоянию. Аналогично можно оценить наибольшее значение вращательного квантового числа, полагая, что предельная вращательная энергия ограничена величиной

$$E_{J,\text{lim}} = D_e - E_v. \quad (3.30)$$

Энергии колебательных и вращательных уровней двухатомных молекул приближенно могут быть вычислены с использованием следующих уравнений:

$$E_v = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (3.31)$$

$$E_J = B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + \dots ;$$

$$B_v = B_e - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + \gamma_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots, \quad (3.32)$$

$$D_v = D_e + \beta_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + \dots,$$

где $\omega_e, \omega_e x_e, B_e, D_e, \alpha_e, \beta_e, \gamma_e$ – фундаментальные спектроскопические константы (Гурвич Л.В. и др., 1978; Хьюбер К.П. и др., 1984).

3.7.2. Модели расчета спектральных коэффициентов поглощения

Подробный анализ этих моделей выполнен в работах (Surzhikov S.T., 1996; Суржиков С.Т., 1989; Кузнецова Л.А. и др., 1998 (а, б, в))

Модель 1. Модель перекрывающихся линий (The «just-overlapping» line model; Keck J.C., et al., 1959; Armstrong B.H., et al., 1961; Churchill D.R., et al., 1966; Gofden S.A., 1967; Fairbairn A.R., 1966). В условиях локального термодинамического равновесия интегральный коэффициент поглощения вращательной линии для гетероядерных молекул рассчитывается по формуле

$$\alpha_{J', J''} = \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) \omega_{J', J''} \frac{S_e}{g} q_{v', v''} S_{J', J''} \frac{N}{Q_\Sigma} \times \exp \left[-\frac{hc}{kT} (E_{e'} + E_{v'} + E_{J'}) \right]. \quad (3.33)$$

Тогда сумма интегральных коэффициентов поглощения для всех линий с данным значением J''

$$\alpha_{J''} = \sum_{J'} \alpha_{J', J''} = \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) \bar{\omega}_{J''} S_e q_{v', v''} (2J'' + 1) N \frac{1}{Q_\Sigma} \times \exp \left[-\frac{hc}{kT} (E_{e'} + E_{v'} + E_{J'}) \right]. \quad (3.34)$$

В (3.34) использовано правило сумм (3.24) и введено среднее значение волнового числа $\bar{\omega}_{J''}$.

Усредненный коэффициент поглощения определяется следующим уравнением:

$$\kappa_{e,v',v'',J''} = \frac{1}{\Delta\omega} \sum_{J'} \alpha_{J',J''} . \quad (3.35)$$

Запишем уравнение для волнового числа центра вращательной линии

$$\omega_{J',J''} = \Delta E_e + \Delta E_v + B_{v'} J' (J' + 1) - B_{v''} J'' (J'' + 1) = \Delta E_e + \Delta E_v + \\ + (B_{v'} - B_{v''}) J''^2 + B_{v'} \Delta J (\Delta J + 1) + (B_{v'} - B_{v''} + 2\Delta J B_{v'}) J'' , \quad (3.36)$$

где $\Delta E_e = E_{e'} - E_{e''}$ и $\Delta E_v = E_{v'} - E_{v''}$ — разности электронных и колебательных энергий для верхнего и нижнего состояний; $\Delta J = J' - J''$.

В приведенном уравнении (3.36) эффекты спин-орбитального, спин-вращательного и спин-спинового взаимодействий не учитываются.

В соответствии с правилами отбора $\Delta J = 0, \pm 1$, имеется три типа ветвей вращательных линий:

$\Delta J = 0$ (Q -ветви):

$$\omega_{J''}^{(Q)} = \Delta E_e + \Delta E_v + \Delta B_{v'} J''^2 + \Delta B_{v''} J'' , \quad (3.37)$$

$\Delta J = -1$ (P -ветви):

$$\omega_{J''}^{(P)} = \Delta E_e + \Delta E_v + \Delta B_{v'} J''^2 - (B_{v'} + B_{v''}) J'' , \quad (3.38)$$

$\Delta J = +1$ (R -ветви):

$$\omega_{J''}^{(R)} = \Delta E_e + \Delta E_v + \Delta B_{v'} J''^2 - (B_{v''} - 3B_{v'}) J'' + 2B_{v'} , \quad (3.39)$$

где $\Delta B_v = B_{v'} - B_{v''}$.

Расстояние между соседними линиями для каждого типа ветвей определяются соотношениями:

$$\Delta\omega^{(Q)} = \Delta B_{v'} J''^2 - 2(B_{v''} - B_{v'}) , \quad (3.40)$$

$$\Delta\omega^{(P)} = \Delta B_{v'} J''^2 - 2B_{v''} , \quad (3.41)$$

$$\Delta\omega^{(R)} = \Delta B_v J''^2 - 2(B_{v''} - 2B_{v'}) . \quad (3.42)$$

Для каждого вращательного уровня J'' найдем средние величины $\bar{\omega}$ и $\Delta\omega$:

$$\bar{\omega}_{J''} = \frac{1}{3} \left(\omega_{J''}^{(Q)} + \omega_{J''}^{(P)} + \omega_{J''}^{(R)} \right) = \Delta E_e + \Delta E_v + \Delta B_v J''^2 + \Delta B_v J'' + \frac{2}{3} B_{v'} , \quad (3.43)$$

$$\overline{\Delta\omega}_{J''} = \frac{1}{3} \left(\Delta\omega_{J''}^{(Q)} + \Delta\omega_{J''}^{(P)} + \Delta\omega_{J''}^{(R)} \right) = 2\Delta B_v (J'' - 1) . \quad (3.44)$$

Если в колебательных полосах отсутствуют Q -ветви, то

$$\bar{\omega}_{J''} = \frac{1}{2} \left(\omega_{J''}^{(P)} + \omega_{J''}^{(R)} \right) = \Delta E_e + \Delta E_v + \Delta B_v J''^2 + \Delta B_v J'' + B_{v'} , \quad (3.45)$$

$$\overline{\Delta\omega}_{J''} = \frac{1}{2} \left(\Delta\omega_{J''}^{(P)} + \Delta\omega_{J''}^{(R)} \right) = 2\Delta B_v J'' . \quad (3.46)$$

Таким образом, во всех случаях можно принять, что

$$\bar{\omega}_{J''} \approx \Delta E_e + \Delta E_v + \Delta B_v J''^2 + \Delta B_v J'' + B_{v'} , \quad (3.47)$$

$$\overline{\Delta\omega}_{J''} \approx 2\Delta B_v J'' . \quad (3.48)$$

В соответствии с (3.35) и (3.48) средний коэффициент поглощения может быть записан в виде

$$\begin{aligned} \kappa_{e,v'',v',J''} = & \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) \bar{\omega}_{J''} S_e q_{v'',v'} N \frac{2J''+1}{2Q_\Sigma \Delta B_v J''} \times \\ & \times \exp \left[-\frac{hc}{kT} (E_{e''} + E_{v''} + E_{J''}) \right] . \end{aligned} \quad (3.49)$$

Так как максимум поглощения в ветви приходится на квантовые числа $J'' > 10$, то можно приближенно положить

$$\frac{2J''+1}{2\Delta B_v J''} \approx \frac{1}{\Delta B_v} .$$

Из (3.47) можно записать

$$J''(J''+1) \approx \frac{\bar{\omega}_{J''} - \Delta E_e - \Delta E_v - B_{v'}}{\Delta B_v}.$$

Тогда

$$E_{J''} = B_{v'} J''(J''+1) \approx \frac{B_{v'} (\bar{\omega}_{J''} - \Delta E_e - \Delta E_v) - B_{v'} B_{v'}}{\Delta B_v}. \quad (3.50)$$

Комбинируя (3.49) и (3.50), получаем

$$\begin{aligned} \kappa_{e,v',v'',J} = & \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) \frac{\bar{\omega}_{J''} S_e q_{v',v''} N}{Q_\Sigma \Delta B_v} \exp \left[-\frac{hc}{kT} (E_{e''} + E_{v''}) \right] \times \\ & \times \exp \left[-\frac{hc B_{v'}}{kT \Delta B_v} (\bar{\omega}_{J''} - \Delta E_e + \Delta E_v - B_{v'}) \right]. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Искомый коэффициент поглощения, усредненный по вращательной структуре, находится при суммировании (3.51) по всем колебательным полосам, линии которых дают вклад в поглощение при $\omega = \bar{\omega}_{J''}$:

$$\begin{aligned} \kappa_e = \bar{\kappa}_\omega = & \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) \frac{\omega S_e N}{Q_\Sigma} \exp \left[-\frac{hc E_{e''}}{kT} \right] \sum_{v''} \sum_{v'} \frac{q_{v',v''}}{|\Delta B_v|^*} \exp \left[-\frac{hc E_{v''}}{kT} \right] \times \\ & \times \exp \left[-\frac{hc B_{v''}}{kT \Delta B_v} (\omega_{v',v''} - \Delta E_e + \Delta E_v - B_{v''}) \right]. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Символ $|\Delta B_v|^*$ означает необходимость учета оттенения полос. При суммировании учитываются только те слагаемые, которые удовлетворяют следующим неравенствам:

$$\begin{aligned} \omega > \omega_{v',v''}, & \quad \text{если } B_{v''} < B_{v'} \text{ (фиолетовое оттенение),} \\ \omega < \omega_{v',v''}, & \quad \text{если } B_{v''} > B_{v'} \text{ (красное оттенение);} \\ \omega_{v',v''} = & \Delta E_e + \Delta E_v. \end{aligned}$$

Определим сечение поглощения, усредненное по вращательной структуре, следующим образом:

$$\sigma_{\omega} = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\Delta\omega} \frac{\bar{\kappa}_{\omega}}{N} d\omega. \quad (3.53)$$

Для узких спектральных интервалов ($20 \div 50 \text{ см}^{-1}$) можно использовать

$$\sigma_{\omega} = \bar{\kappa}_{\omega} / N, \quad (3.54)$$

где $\omega^* = 0.5(\omega_{\min} + \omega_{\max})$, $\Delta\omega = [\omega_{\min}, \omega_{\max}]$.

Окончательно формула для расчета усредненных сечений поглощения (с учетом поправки на вынужденное испускание и числовых значений констант, входящих в (3.52)) имеет следующий вид:

$$\sigma_{\omega} = A \frac{\omega S_e}{Q_{\Sigma}} \exp\left[-\frac{1.44 E_e^*}{T}\right] \left[1 - \exp\left(-\frac{1.44\omega}{T}\right)\right] \times \\ \times \sum_{\nu'} \sum_{\nu''} \frac{q_{\nu',\nu''}}{|\Delta B_{\nu}|^*} \exp\left\{-\frac{1.44}{T} \left[\frac{B_{\nu'}}{\Delta B_{\nu}} (\omega - \omega_{\nu',\nu''} - B_{\nu'}) + E_{\nu'}\right]\right\}, \text{ см}^2, \quad (3.55)$$

где $A = 2.69 \times 10^{-18}$.

Чтобы сечение (коэффициент) поглощения представить в размерности $(\text{см} \cdot \text{атм})^{-1}$, т.е. как коэффициент поглощения, отнесенный к парциальному давлению, необходимо воспользоваться следующей формулой пересчета:

$$\kappa_{\omega, (\text{см} \cdot \text{атм})^{-1}} = \sigma_{\omega, \text{см}^2} \frac{7340 \times 10^{18}}{T}.$$

Тогда

$$\kappa_{\omega} = C \frac{\omega S_e}{T Q_{\Sigma}} \exp\left[-\frac{1.44 E_e^*}{T}\right] \left[1 - \exp\left(-\frac{1.44\omega}{T}\right)\right] \sum_{\nu'} \sum_{\nu''} \frac{q_{\nu',\nu''}}{|\Delta B_{\nu}|^*} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1.44}{T} \left[\frac{B_{\nu'}}{\Delta B_{\nu}} (\omega - \omega_{\nu',\nu''} - B_{\nu'}) + E_{\nu'}\right]\right\}, (\text{см} \cdot \text{атм})^{-1}, \quad (3.56)$$

где $C = 1.97 \times 10^4$.

В таком виде расчетная формула для κ_ω записана в книге (Каменщиков В.А. и др., 1971). Практически в таком же виде она используется и в работе (Авилова И.В. и др., 1970):

$$\kappa_\omega = C \frac{S_e}{TQ_\Sigma} \exp\left[-\frac{1.44E_e}{T}\right] \left[1 - \exp\left(-\frac{1.44\omega}{T}\right)\right] \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\omega - \frac{\Delta\omega}{2}}^{\omega + \frac{\Delta\omega}{2}} \sum_{\nu'} \sum_{\nu''} \frac{q_{\nu',\nu''}}{|\Delta B_{\nu'}|^*} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1.44}{T} \left[\frac{B_{\nu''}}{\Delta B_{\nu'}} (\omega - \omega_{\nu',\nu''} - B_{\nu'}) + E_{\nu''}\right]\right\} d\omega, \text{ (см} \cdot \text{атм)}^{-1}. \quad (3.57)$$

Эти соотношения еще раньше были получены и использованы в работах (Keck J.C., et al., 1959; Пеннер С.С., 1963; Armstrong В.Н., et al., 1961; Churchill D.R., et al., 1966; Gofden S.A., 1967; Fairbairn A.R., 1966).

Формулы (3.56) и (3.57) были выведены для расчета усредненных сечений и коэффициентов поглощения гетероядерных молекул. Можно показать, что они справедливы и для гомоядерных молекул, в спектрах которых наблюдается чередование интенсивностей, обусловленное разной заселенностью симметричных и антисимметричных уровней вращательной энергии. Напомним, что для Σ -состояний все $(2S+1)$ уровней с данным значением J имеют одинаковую симметрию. Для состояний с $\Lambda \neq 0$ компоненты Λ -дублета имеют разную симметрию, поэтому для данного значения J имеем $(2S+1)$ симметричных и $(2S+1)$ антисимметричных вращательных уровней.

Рассмотрим 1-й случай: электронные переходы гомоядерных молекул не содержат Σ -состояний. Запишем сумму интегральных коэффициентов поглощения вращательных линий с данным значением J'' , суммируя отдельно соответствующие величины для симметричных и антисимметричных вращательных линий:

$$\sum_{J'} \alpha_{J',J''} = \sum_{J'} \alpha_{J',J''}^s + \sum_{J'} \alpha_{J',J''}^a = \frac{B}{2} \left[\bar{\omega}_{J''}^s (2J''+1) \frac{g^s}{Q_n} \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{J''}^s\right) + \right. \\ \left. + \bar{\omega}_{J''}^a (2J''+1) \frac{g^a}{Q_n} \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{J''}^a\right) \right]. \quad (3.58)$$

Здесь индексы «s» и «a» отмечают величины, относящиеся соответственно к симметричным и антисимметричным уровням и вращательным линиям; B – константа для данной колебательной полосы:

$$B = \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) S_e q_{v',v''} \exp \left[-\frac{hc}{kT} (E_{e'} + E_{v'}) \right]. \quad (3.59)$$

Поскольку энергии компонент Λ -дублета отличаются не более чем на $1-2 \text{ см}^{-1}$ (а в рамках данной модели считаются не различающимися), можем записать

$$\bar{\omega}_{J'}^s = \bar{\omega}_{J'}^a = \bar{\omega}_{J'} \text{ и } E_{J'}^s = E_{J'}^a = E_{J'}.$$

Кроме того,

$$\frac{g^s}{Q_n} + \frac{g^a}{Q_n} = 2, \quad (3.60)$$

следовательно,

$$\sum_{J'} \alpha_{J',J'} = B \bar{\omega}_{J'} (2J' + 1) \exp \left(-\frac{hc}{kT} E_{J'} \right). \quad (3.61)$$

Из сравнения уравнений (3.34) и (3.61) следует, что для рассматриваемого типа электронных переходов гомоядерных молекул получили то же исходное уравнение модели, что и для гетероядерных молекул. Это позволяет в конечном итоге использовать уравнения (3.56) и (3.57) для расчета усредненных сечений и коэффициентов поглощения.

Рассмотрим 2-й случай. Ему соответствуют электронные переходы, одно или оба состояния которых имеют тип Σ . Для простоты примем, что нижнее состояние является Σ -состоянием. Для гетероядерных молекул для данной колебательной полосы запишем сумму интегральных коэффициентов поглощения вращательных линий со значениями квантовых чисел J'' и $J'' + 1$:

$$\begin{aligned} \sum_{J''} \alpha_{J'',J''} + \sum_{J''} \alpha_{J'',J''+1} = B \left[\bar{\omega}_{J''} (2J'' + 1) \exp \left(-\frac{hc}{kT} E_{J''} \right) + \right. \\ \left. + \bar{\omega}_{J''+1} (2J'' + 2) \exp \left(-\frac{hc}{kT} E_{J''+1} \right) \right]. \quad (3.62) \end{aligned}$$

С точностью до нескольких процентов

$$\bar{\omega}_{J''} (2J'' + 1) \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{J''}\right) \cong \bar{\omega}_{J''+1} (2J'' + 2) \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{J''+1}\right) \quad (3.63)$$

и, следовательно, с этой точностью

$$\sum_{J'} \alpha_{J', J''} + \sum_{J'} \alpha_{J', J''+1} \cong 2B \bar{\omega}_{J''} (2J'' + 1) \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{J''}\right). \quad (3.64)$$

Для гомоядерных молекул симметрия вращательных уровней J'' и $J'' + 1$ для Σ -состояний различна. Предположим, что уровни J'' являются симметричными. Тогда для гомоядерных молекул можно записать

$$\sum_{J'} \alpha_{J', J''}^s + \sum_{J'} \alpha_{J', J''+1}^a = B \left[\bar{\omega}_{J''}^s (2J'' + 1) \frac{g^s}{Q_n} \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{J''}^s\right) + \bar{\omega}_{J''+1}^a (2J'' + 2) \frac{g^a}{Q_n} \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{J''+1}^a\right) \right]. \quad (3.65)$$

Учитывая (3.60) и (3.63), получаем

$$\sum_{J'} \alpha_{J', J''}^s + \sum_{J'} \alpha_{J', J''+1}^a \cong 2B \bar{\omega}_{J''}^s (2J'' + 1) \exp\left(-\frac{hc}{kT} E_{J''}^s\right). \quad (3.66)$$

Уравнение (3.66) для гомоядерных молекул записано с той же точностью, что и уравнение (3.64) для гетероядерных молекул и полностью аналогично ему. Таким образом, и в этом случае различная заселенность симметричных и антисимметричных уровней, обусловленная различием их статистических весов, приводит лишь к перераспределению интенсивностей между симметричными и антисимметричными линиями. Суммарная интенсивность остается неизменной, равной соответствующей величине для гетероядерных молекул. Из этого следует, что усредненные сечения и коэффициенты поглощения для электронных спектров гомоядерных молекул, рассчитанные с учетом и без учета чередования интенсивностей, практически совпадут, если интервал усреднения достаточно велик. В него должно попасть примерно равное коли-

чество симметричных и антисимметричных вращательных линий. Для электронных переходов первого типа это выполняется всегда (если не иметь в виду описание высоко разрешенных спектров). Для переходов второго типа величина приемлемого интервала усреднения определяется расстоянием между вращательными линиями с квантовыми числами J'' и $J'' + 1$, которое в соответствии с (3.48) зависит от $\Delta B_{v''}$ и J'' .

Модель 2. Поглощение «серой» колебательной полосы. Эта модель была предложена в работе (Суржиков С.Т., 1989). За основу берется выражение для интегрального коэффициента поглощения колебательной полосы (Кузнецова Л.А. и др., 1980):

$$\alpha_{v',v''} = \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) \omega S_e q_{v',v''} N \frac{kT}{hcQ_\Sigma} \exp \left[-\frac{hc}{kT} (E_{e'} + E_{v'}) \right]. \quad (3.67)$$

Вводится средний коэффициент поглощения в пределах полосы

$$\kappa_{v',v''} = \alpha_{v',v''} / \Delta\omega_{v',v''}. \quad (3.68)$$

Здесь $\Delta\omega_{v',v''}$ – ширина полосы.

В выборе величины $\Delta\omega_{v',v''}$ имеется определенный произвол.

Пусть $\Delta\omega_{v',v''} = 0.5 (\omega_{v'+1,v''} - \omega_{v'-1,v''}) = \omega'_e - \omega_e x'_e (2v' + 1)$, тогда выражение для коэффициента поглощения в модели «серой» полосы может быть записано следующим образом:

$$\begin{aligned} \kappa_\omega = & 1.44C \frac{\omega S_e}{Q_\Sigma} \exp \left[-\frac{1.44E_{e'}}{T} \right] \left[1 - \exp \left(-\frac{1.44\omega}{T} \right) \right] \times \\ & \times \sum_{v''} \sum_{v'} \frac{q_{v',v''}}{B_{v''} \Delta\omega_{v',v''}} \exp \left(-\frac{1.44}{T} E_{v'} \right), \quad (\text{см} \cdot \text{атм})^{-1}. \quad (3.69) \end{aligned}$$

Модель 3. Аналитическое представление контура колебательной полосы. За основу в данной модели берется выражение (3.67) для интегрального коэффициента поглощения колебательной полосы. В пределах полосы можно записать спектральный коэффициент поглощения, усредненный по вращательной структуре следующим образом:

$$\kappa_{\omega, \nu', \nu''} = \alpha_{\nu', \nu''} f(\omega, \omega_{\nu', \nu''}), \quad (3.70)$$

где $f(\omega, \omega_{\nu', \nu''})$ – профиль колебательной полосы

Положим, что справедливы допущения, принятые при выводе уравнений Модели 1. Все линии колебательной полосы, соответствующие разрешенным переходам с $(2 - \delta_{0, \Lambda})(2S + 1)$ вращательных уровней с данным значением вращательного квантового числа J'' , имеют близкие значения, как самих волновых чисел, так и их разностей. Это означает, что рассматривается полоса как бы состоящая из одной ветви, положения вращательных линий в которой определяются уравнением (3.37), интегральные интенсивности таких суммарных вращательных линий определяются уравнением (3.33), а средние коэффициенты поглощения этих суммарных линий уравнением (3.35).

В этом приближении функцию контура полосы можно записать следующим образом:

$$f(\omega, \omega_{\nu', \nu''}) = f(J'') = \alpha (2J'' + 1) \exp \left[-\frac{hc}{kT} B_{\nu''} J'' (J'' + 1) \right], \quad (3.71)$$

где α – коэффициент, обеспечивающий условие нормировки

$$\int_{\Delta\omega_{\nu', \nu''}} f(\omega, \omega_{\nu', \nu''}) d\omega = 1. \quad (3.72)$$

Считая, что J могут принимать любые положительные действительные значения, можем найти J_{\max} , при котором достигается максимум функции $f(J)$ из условия

$$\frac{\partial f(J'')}{\partial J''} = 0,$$

из которого можно получить

$$J''_{\max} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{2kT}{hcB_{\nu''}}} - 1 \right). \quad (3.73)$$

Наибольшее значение функции контура равно

$$f(J_{\max}^n) = \alpha (2J_{\max}^n + 1) \exp \left[-\frac{hc}{kT} B_{\nu'} J_{\max}^n (J_{\max}^n + 1) \right].$$

Определим ширину полосы $\Delta\omega_{\nu',\nu''}$. Для примера рассмотрим случай фиолетового оттенения ($B_{\nu'} < B_{\nu''}$, $\omega > \omega_{\nu',\nu''}$).

Пусть $\Delta\omega_{\nu',\nu''} = \omega_{J^*}^{\max} - \omega_{J^*}^{\min}$, где

$$\omega_{J^*}^{\max} \approx \Delta E_e + \Delta E_{\nu'} + \Delta B_{\nu'} (\varphi J_{\max}^n)^2 + \Delta B_{\nu'} \varphi J_{\max}^n + B_{\nu'},$$

$$\omega_{J^*}^{\min} \approx \Delta E_e + \Delta E_{\nu'} + \Delta B_{\nu'} J_h^2 + \Delta B_{\nu'} J_h + B_{\nu'}.$$

Здесь J_h^n – вращательное квантовое число, соответствующее канту полосы; φ – параметр, определяющий ширину полосы (например, $\varphi = 2$).

Учитывая, что $J_{\max}^n \gg J_h^n$ и $J_{\max}^n \gg 1$, получаем приближенное выражение

$$\Delta\omega_{\nu',\nu''} = |\Delta B_{\nu'}| \varphi^2 J_{\max}^2. \quad (3.75)$$

Тогда для каждого значения

$$\omega \approx \omega_{\nu',\nu''} + \Delta B_{\nu'} (J^*)^2 + \Delta B_{\nu'} J^* + B_{\nu'}, \quad (3.76)$$

принадлежащего спектральному диапазону $\omega \in [\omega_{J^*}^{\min}, \omega_{J^*}^{\max}]$, можно определить соответствующее вращательное квантовое число

$$J^* \approx \left(\sqrt{1 + 4b} - 1 \right) / 2,$$

где $b = (\omega - \omega_{\nu',\nu''} - \Delta B_{\nu'}) / |\Delta B_{\nu'}|$, а затем и относительное значение коэффициента поглощения в полосе

$$k_{\nu',\nu''}(\omega) = f(J^*) / f(J_{\max}^n).$$

Аналогичные соотношения получаются и при красном оттенении полос.

В окончательном виде расчетная формула для коэффициента поглощения, усредненного по вращательной структуре, будет иметь вид

$$\kappa_{\omega} = 1.44C \frac{\omega S_e}{Q_{\Sigma}} \exp\left(-\frac{1.44 E_{e^*}}{T}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{1.44\omega}{T}\right)\right] \times \\ \times \sum_{v'} \sum_{v''} \frac{q_{v',v''} k_{v',v''}(\omega)}{|\Delta B_{v'}|^* 0.5\varphi^2} \exp\left(-\frac{1.44}{T} E_{v''}\right), (\text{см}\cdot\text{атм})^{-1}. \quad (3.77)$$

Модель 4. Полуэмпирический метод Френча. В методе (Френч Е.П., 1964) вводится средний на участке волновых чисел $\Delta\omega$ коэффициент поглощения, который равен частному от деления интегрального поглощения на величину $\Delta\omega$. Интегральный коэффициент поглощения в колебательной полосе ($v''v'$), согласно (Кузнецова Л.А. и др., 1980) (при соблюдении ЛТР), записывается в виде

$$\kappa_{v',v''} = \int \alpha_{v',v''}(\omega) d\omega = \pi r_0 S_e q_{v',v''} L_0 Q_{\text{in}}^{-1} \exp\left(-\frac{E_{v''}}{kT}\right), \text{см}^{-1}\cdot\text{атм}^{-1}, \quad (3.78)$$

где $L_0 = 2.6868 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ – число Лошмидта.

Для энергии колебательного уровня берется выражение (3.4) и разрешается относительно колебательного квантового числа

$$v = \frac{(\omega_e x_e - \omega_e) \pm \sqrt{(\omega_e x_e - \omega_e)^2 - 4\omega_e x_e \left(\frac{E_v}{hc} - \frac{\omega_e}{2} + \frac{\omega_e x_e}{4}\right)}}{2\omega_e x_e}. \quad (3.79)$$

Использование потенциала Морзе позволяет получить следующую связь:

$$v = -\frac{1}{2} + \frac{\omega_e}{2\omega_e x_e \left[1 - \sqrt{1 - \{1 - \exp[-\alpha(r - r_e)]\}^2}\right]}. \quad (3.80)$$

В формуле (3.80) надо оставить знак минус, поскольку в противном случае вблизи положения равновесия ($r \cong r_e$) получим $v \gg 1$.

Подход работы (Френч Е.П., 1964) опирается на принцип Франка – Кондона (Ельяшевич М.А., 2001; Кондратьев В.Н., 1959), в соответствии с которым наибольшей вероятностью обладают переходы при неизменном взаимном расположении ядер, что связано с превосходством скорости электронного перехода над скоростью ядерного движения. Поэтому, задавая r как параметр пе-

рехода, легко определить числа ν' и ν'' , а также соответствующее этому переходу волновое число

$$\omega_{\nu''\nu'} = \omega_{00} + \nu''\omega_{e'} - \nu'\omega_{e'} + \omega_{e'}x_{e'}(\nu'^2 + \nu') - \omega_{e''}x_{e''}(\nu''^2 + \nu''). \quad (3.81)$$

Для удобства вычислений в работе (Френч Е.П., 1964) делается допущение о континуальном характере колебательных квантовых чисел в диапазоне $[-1/2; -1/2 + \omega_{e'}/(2\omega_{e'}x_{e'})]$. Средний коэффициент поглощения, отвечающий заданному r , вычисляется в предположении, что $\omega_{\nu''\nu'} = \omega_{\nu''\nu'}(r)$ является центром спектрального диапазона $\Delta\omega = (\omega_{e'} + \omega_{e''})/2$, занимаемого одной колебательной полосой.

Результирующее выражение для коэффициента поглощения записывается в виде

$$\kappa(r) = \frac{4.76 \times 10^6 S_e \exp\left(-\frac{E_{\nu''\nu'}}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{1.44\omega_{e'}}{T}\right)\right]}{\omega_{e'} + \omega_{e''}}, \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}. \quad (3.82)$$

Здесь выражение в круглых скобках соответствует колебательной составляющей статистической суммы по состояниям, а величина $q_{\nu''\nu'}$ положена постоянной и равной 0.1.

В работе (Белевцев А.А. и др., 1977) метод Френча развивается в части учета зависимости q -факторов от межъядерного расстояния. Модификация метода Френча, предложенная в работе (Стулов В.П. и др., 1995), заключается в способе выбора нормировочной постоянной. Такой подход носит полуэмпирический характер и во многих случаях он может быть достаточно точным.

Обсуждаемый метод является весьма экономичным. Однако он обладает двумя недостатками. Во-первых, в своем исходном варианте метод не учитывает зависимость вероятности колебательного перехода от межъядерного расстояния. Во вторых, метод требует применения специальной процедуры пересчета от текущего волнового числа к межъядерному расстоянию. Любая модификация метода приводит к тому, что трудоемкость его реализации становится соизмеримой с трудоемкостью любой другой модели.

Модель 5. Line-by-line расчет коэффициентов поглощения, усредненных по вращательной структуре. Расчет коэффициентов поглощения, усредненных по вращательной структуре, в этой модели производится по формуле

$$\bar{\kappa}_{\omega} = \frac{1}{\Delta\omega} \sum_{\nu''} \sum_{\nu'} \sum_{J''} \sum_{J'} \alpha_{J',J''}, \quad (3.83)$$

где $\Delta\omega$ – интервал усреднения; $\alpha_{J',J''}$ – интегральный коэффициент поглощения вращательной линии. Суммирование в (3.83) относится ко всем вращательным линиям, попадающим в интервал $\Delta\omega$.

С учетом числовых значений констант получим следующую расчетную формулу:

$$\bar{\kappa}_{\omega} = \frac{2.69 \times 10^{-18} N}{\Delta\omega Q_{\Sigma}} \sum_{\nu''} \sum_{\nu'} \sum_{J''} \sum_{J'} \omega_{J',J''} S_e q_{\nu',\nu''} S_{J',J''} \frac{g_l^{a,s}}{Q_n} \times \\ \times \exp\left[-\frac{hc}{kT}(E_{e''} + E_{\nu''} + E_{J''})\right] \left[1 - \exp\left[-\frac{hc\omega_{J',J''}}{kT}\right]\right], \text{ см}^{-1}. \quad (3.84)$$

Определение усредненного коэффициента поглощения в соответствии с (3.84) имеет тесную связь со способом расчета интегральной поглощательной способности однородного слоя толщиной L

$$A = \int_{\Delta\omega} \left[1 - \exp\left(-\sum_j \kappa_{\omega,j} L\right)\right] d\omega = \left[1 - \exp(-\bar{\kappa}_{\Delta\omega} L)\right] \Delta\omega, \quad (3.85)$$

где $\kappa_{\omega,j}$ – спектральный коэффициент поглощения в линиях, попавших в спектральный диапазон $\Delta\omega$; $\bar{\kappa}_{\Delta\omega}$ – средний коэффициент поглощения в $\Delta\omega$. Откуда в приближении оптически тонкого слоя ($\sum_j \kappa_{\omega,j} L \ll 1$, $\bar{\kappa}_{\Delta\omega} L \ll 1$) имеем

$$\bar{\kappa}_{\Delta\omega} = \frac{1}{\Delta\omega} \sum_j \int_{\Delta\omega} \kappa_{\omega,j} d\omega = \frac{1}{\Delta\omega} \sum_j \alpha_j, \quad (3.86)$$

где

$$\alpha_j = \int_{\Delta\omega} \kappa_{\omega,j} d\omega \approx \int_0^{\infty} \kappa_{\omega,j} d\omega.$$

Таким образом, понятие усредненного по вращательной структуре коэффициента поглощения обоснованно можно использовать лишь в случае оптически тонких сред. Это необходимо иметь в виду при использовании усредненных коэффициентов поглощения при расчете переноса теплового излучения.

Несмотря на относительную простоту формулы (3.86), ее использование для расчета усредненных коэффициентов поглощения представляет собой существенно более трудоемкую задачу, чем расчет по формулам (3.56), (3.57), (3.69), (3.77). Сложность расчетов состоит не только в селекции и суммировании большого числа спектральных линий, но, в первую очередь, в необходимости расчета параметров каждой электронно-колебательно-вращательной линии: ее волнового числа $\omega_{j',j''}$ и фактора Хенля – Лондона $S_{j',j''}$. При этом для большинства молекулярных систем положение вращательных линий не может быть определено с использованием формул типа (3.36). Более того, истинная структура молекулярного спектра существенно сложнее той, которая предсказывается формулами указанного типа.

Тем не менее, в расчетах переноса теплового излучения нет необходимости добиваться хорошего соответствия экспериментальных и расчетных данных по $\omega_{j',j''}$. Однако, допуская определенные погрешности в расчете местоположения линий, необходимо стремиться к адекватному описанию вращательной структуры спектра (учет всех ветвей вращательной структуры). В соответствии с определением вращательного уровня в (Whiting E.E., et al., 1980) для переходов типа (1П-1Σ) необходимо учитывать 3 ветви, для (2П-2Σ) – 12 ветвей, для (3П-3Σ) – 27 ветвей и т.д.

С точностью, достаточной для задач переноса теплового излучения, вращательная структура электронных спектров может быть рассчитана с использованием правил отбора, приводимых, например, в работах (Герцберг Г., 1974; Кузнецова Л.А. и др., 1980; Kovacs I., 1969), и с помощью следующих формул (Kovacs I., 1969) для вращательных термов.

1. Синглетные состояния:

$$F(J'') = \omega_{v',v''} + B_{v''} [J''(J''+1) - \Lambda''^2] - D_{v''} [J''(J''+1) - \Lambda''^2]. \quad (3.87)$$

2. Дублетные состояния:

$$T_{J''-1/2}(J'') = \omega_{v',v''} + B_{v''} \left[\left(J'' + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda''^2 - \frac{1}{2} \sqrt{\Lambda''^2 Y'' (Y'' - 4) + 4 \left(J'' + \frac{1}{2} \right)^2} \right],$$

$$T_{J''+1/2}(J'') = \omega_{v',v''} + B_{v''} \left[\left(J'' + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda''^2 + \frac{1}{2} \sqrt{\Lambda''^2 Y'' (Y'' - 4) + 4 \left(J'' + \frac{1}{2} \right)^2} \right], \quad (3.88)$$

где $Y'' = A''/B_{v''}$; A'' — константа спин-орбитального взаимодействия.

2а. $^2\Sigma$ -состояния:

$$F_{J'', -\frac{1}{2}}(N'') = \omega_{v',v''} + B_{v''} N'' (N''+1) - D_{v''} N''^2 (N''+1)^2 + \frac{1}{2} \gamma'' N'',$$

$$F_{J'', +\frac{1}{2}}(N'') = \omega_{v',v''} + B_{v''} N'' (N''+1) - D_{v''} N''^2 (N''+1)^2 - \frac{1}{2} \gamma'' N'', \quad (3.89)$$

где γ — константа спин-вращательного взаимодействия.

3. Триплетные состояния:

$$T_{J'', -\frac{1}{2}}(J'') = \omega_{v',v''} + B_{v''} \left[-\Lambda''^2 + \frac{2}{3} + J''(J''+1) - \sqrt{y_1'' + 4J''(J''+1)} - \frac{2}{3} \frac{y_2'' - 2J''(J''+1)}{y_1'' + 4J''(J''+1)} \right],$$

$$T_{J''}(J'') = \omega_{v',v''} + B_{v''} \left[-\Lambda''^2 + \frac{2}{3} + J''(J''+1) + \frac{4}{3} \frac{y_2'' - 2J''(J''+1)}{y_1'' + 4J''(J''+1)} \right],$$

$$T_{J''+\frac{1}{2}}(J'') = \omega_{v',v''} + B_{v''} \left[-\Lambda''^2 + \frac{2}{3} + J''(J''+1) + \sqrt{y_1'' + 4J''(J''+1)} - \frac{2}{3} \frac{y_2'' - 2J''(J''+1)}{y_1'' + 4J''(J''+1)} \right], \quad (3.90)$$

где $y_1'' = \Lambda''^2 Y''(Y'' - 4) + \frac{4}{3}$, $y_2'' = \Lambda''^2 Y''(Y'' - 1) - \frac{4}{9}$.

3а. $^3\Sigma$ -состояния:

$$\begin{aligned} F_{J''-1}(N'') &= \omega_{v',v''} + B_{v''} N''(N''+1) - \\ &\quad - D_{v''} N''^2 (N''+1)^2 + \gamma'' N'' - \epsilon'' \frac{N''}{2N''+3}, \\ F_{J''}(N'') &= \omega_{v',v''} + B_{v''} N''(N''+1) - D_{v''} N''^2 (N''+1)^2 - \gamma'' + \epsilon'', \\ F_{J''+1}(N'') &= \omega_{v',v''} + B_{v''} N''(N''+1) - \\ &\quad - D_{v''} N''^2 (N''+1)^2 - \gamma''(N''+1) - \epsilon'' \frac{N''+1}{2N''-1}. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Здесь ϵ – константа спин-спинового взаимодействия.

Аналитические формулы для расчета факторов Хенля – Лондона, систематизированные в монографии И. Ковача (Kovacs I., 1969), не приводятся здесь из-за их громоздкости. Следует также иметь в виду, что для П- Σ переходов нормировка факторов Хенля – Лондона, принятая И. Ковачем, не соответствует соглашению (Whiting E.E., et al., 1980).

Как уже отмечалось, в настоящее время для расчета факторов Хенля – Лондона широко используется программа Е. Вайтинга (Whiting E.E., 1973), реализующая предложенный Ж. Хоугеном (Hougen J.T., 1970) алгоритм их вычисления. Программа была использована для проверки аналитических формул (Kovacs I., 1969), сводка обнаруженных типографских и авторских ошибок приведена в работе (Whiting E.E., et al., 1973). Кроме того, были отмечены некоторые расхождения результатов аналитических и численных расчетов для триплетных переходов, обусловленные при-

ближениями, принятыми при выводе аналитических формул для триплетных состояний.

Line-by-line расчет усредненных коэффициентов поглощения возможен в двух вариантах:

- 1) с учетом мультиплетной структуры электронных состояний;
- 2) в «синглетном» приближении, когда в спектре возможна только одна ветвь каждого типа.

Вторая модель значительно экономичнее, но достаточно груба для ряда молекулярных систем. Величина ошибки, вносимая в результаты расчетов за счет использования этой упрощенной модели, зависит от характера комбинирующих электронных состояний.

Модель 6. *Line-by-line* расчет спектрального коэффициента поглощения. В этой модели коэффициент поглощения определяется следующей формулой:

$$\kappa_{\omega} = \sum_{v''} \sum_{v'} \sum_{J''} \sum_{J'} \kappa_{v'',v',J'',J'}(\omega, \omega_{J',J'}), \quad (3.92)$$

$$\kappa_{v'',v',J'',J'} = \alpha_{J',J''} f(\omega, \omega_{J',J''}), \quad (3.93)$$

где $\omega_{J',J''}$ – волновое число центра вращательной линии; $\kappa_{v'',v',J'',J'}$ – спектральный коэффициент поглощения вращательной линии; $f(\omega, \omega_{J',J''})$ – профиль спектральной линии.

Суммирование в (3.92) производится по всем линиям, дающим вклад в поглощение при $\omega \in \Delta\omega$.

Интегральный коэффициент поглощения определяется как

$$\alpha_{J',J''} = 2.69 \times 10^{-18} \omega_{J',J''} S_e q_{v',v''} S_{J',J''} N \frac{g_l^{a,s}}{Q_{\Sigma} Q_n} \times \exp \left[-\frac{hc}{kT} (E_{e''} + E_{v'} + E_{J''}) \right]. \quad (3.94)$$

Профиль линии предполагается доплеровским, лоренцевским или фойгтовским. В вычислительных экспериментах целесообразно использовать параметрический способ задания полуширины вращательных линий: $\gamma_L = a_c \gamma_D$, где γ_D, γ_L – доплеровская и лоренцевская полуширины; a_c – параметр уширения.

Спектральные коэффициенты поглощения, рассчитанные в соответствии с (3.92), часто называют «синтетическим» спектром поглощения.

После расчета синтетического спектра может быть рассчитан усредненный коэффициент поглощения по формуле

$$\bar{\kappa}_{\omega} = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\Delta\omega} \kappa_{\omega} d\omega.$$

Очевидно, что значения усредненных коэффициентов поглощения (3.84) и (3.92) должны совпадать при выполнении условия $\max(\gamma) \ll \Delta\omega$, что накладывает ограничение на величину $\Delta\omega$ снизу.

3.8. О необходимости проведения методических вычислительных экспериментов

Основной целью развития вычислительных кодов оптических свойств в физической механике является повышение экономичности расчетов переноса излучения и совершенствование методик спектральной диагностики высокотемпературных газовых и плазменных смесей. В основе этих задач лежит проблема расчета переноса интегральных радиационных характеристик в спектральных диапазонах различных размеров. Разнообразие расчетных моделей спектральных коэффициентов поглощения вызывает необходимость обоснованного выбора той или иной модели. Для решения этой задачи необходимо выполнить методические расчеты или так называемые вычислительные эксперименты, которые можно представить в виде нескольких групп. Конечной целью этих методических вычислительных экспериментов является сравнение результатов расчетов переноса теплового излучения при изменении тех или иных параметров расчета. Первая задача вычислительного эксперимента – выбор оптимальной модели усреднения вращательной структуры спектра. При ее решении сравниваются результаты расчета, выполненного с использованием *line-by-line* коэффициентов поглощения, и аналогичные результаты, полученные при использовании многогрупповых (или каких-

либо иных) моделей переноса, основанных на моделях усреднения спектра по вращательной структуре. Для такого сравнения в качестве простейшей можно выбрать задачу о поглощательной способности отрезка луча в неоднородной (однородной) среде:

$$A_e = \int_{\Delta\Omega} \left[1 - \exp \left(- \int_{x_1}^{x_2} \kappa_{\omega} (x') dx' \right) \right] d\omega, \quad (3.95)$$

где объемный спектральный коэффициент поглощения $\kappa_{\omega}(x)$ определяется по формулам (3.92)–(3.94), а размер спектрального диапазона $\Delta\Omega$ диктуется потребностями решаемой прикладной задачи.

С использованием групповых моделей спектра величина поглощательной способности находится по формуле

$$A_a = \sum_{g=1}^G \left[1 - \exp \left(- \int_{x_1}^{x_2} \kappa_{\omega, g} (x') dx' \right) \right] \Delta\omega_g, \quad (3.96)$$

где G – число спектральных диапазонов $\Delta\omega_g$, на которые разбивается спектральная область $\Delta\Omega$.

Погрешность, получаемая при использовании усредненных моделей спектра, рассчитывается по формуле

$$\varepsilon_1 = |A_a - A_e| / A_e. \quad (3.97)$$

Поглощательная способность A_a может быть рассчитана для разных моделей усреднения, поэтому в результате получаем несколько чисел ε_1 , сравнение которых позволяет выбрать лучшую модель. Погрешности, вносимые моделями усреднения, в значительной степени зависят от характера комбинирующих электронных состояний. При наличии сильных спин-орбитальных взаимодействий хотя бы для одного из этих состояний использование моделей усреднения вращательной структуры, так же как и расчет спектра в синглетном приближении может оказаться слишком грубым. Для этих случаев целесообразнее усреднение проводить для электронных подсистем, но при этом необходимо учесть, что

лишь часть силы электронного перехода приходится на каждую подсистему.

Второй задачей вычислительного эксперимента является установление зависимости результатов расчета переноса излучения от «качества» исходной информации. Например, сила электронного перехода, необходимая при расчетах коэффициентов поглощения, может быть определена с использованием различных моделей ее описания:

$$S_e(r), S_e(r_{v',v''}), S_e(\lambda), S_e = \text{const},$$

где r – межъядерное расстояние; $r_{v',v''}$ – r -центроида $v'v''$ -полосы; λ – длина волны $v'v''$ -полосы.

Среди перечисленных моделей расчета спектральных коэффициентов поглощения, две обладают особенно высокой трудоемкостью. Это модели *line-by-line* расчета коэффициентов с усреднением и без усреднения вращательной структуры. Поэтому второй тип методических вычислительных экспериментов, направленный на выяснение влияния исходных данных на результаты расчетов поглощательной способности, целесообразно выполнять на примере какой-либо групповой модели усреднения по вращательной структуре. В этом случае можно ограничиться также сравнением спектральных зависимостей усредненных коэффициентов поглощения.

Третий тип методических вычислительных экспериментов имеет целью выяснение влияния на поглощательную способность учета мультиплетной структуры вращательных переходов. При этом необходимо проведение расчетов по соотношению (3.95), поскольку при вычислении коэффициентов поглощения, усредняемых на достаточно большом спектральном интервале, учет или неучет мультиплетной структуры не должен сказываться вследствие выполнения правила сумм для вероятностей вращательных переходов.

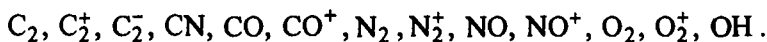
Четвертый тип вычислительных экспериментов – уточнение влияния чередования интенсивностей в спектрах гомоядерных молекул на поглощательную способность. Очевидно, что это че-

редование будет по-разному сказываться для электронных переходов, включающих и не включающих Σ -состояния, поэтому расчеты должны быть выполнены для разных типов электронных переходов.

3.9. Базы данных спектральных коэффициентов поглощения двухатомных молекул, усредненных по вращательной структуре

Такие базы данных создавались при исследовании спектральных оптических свойств горячих газов и низкотемпературной плазмы (см., например, работы (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971)). По мере развития и совершенствования расчетных моделей, появления новой экспериментальной и расчетной информации создавались новые базы данных.

В работе (Кузнецова Л.А. и др., 1997) представлена база данных сечений поглощения 53 электронных и колебательных систем полос следующих двухатомных молекул:



Усреднение сечений поглощения по вращательной структуре выполнялось по модели Q -ветви для каждой системы в 300 спектральных точках. Для каждой системы полос в указанной работе приводятся спектральные сечения поглощения для пяти значений температур (1000, 5000, 10000, 15000 и 20000 К), использованные спектроскопические константы и функции дипольных моментов электронных переходов для электронных систем и функции дипольных моментов для колебательных полос.

База данных тех же спектральных сечений поглощения, основанная на последних результатах *ab initio* расчетов электронных сил переходов и *line-by-line* модели усреднения коэффициентов поглощения представлены в работе (Кузнецова Л.А. и др., 1999).

В основу базы данных, представленной в работе (Кузнецова Л.А. и др., 1999), положено следующее расчетное соотношение:

$$\sigma_{\omega} = (N\Delta\omega)^{-1} \sum_{J'} \sum_{J''} \alpha_{J',J''}, \quad (3.98)$$

где σ_{ω} – усредненное сечение поглощения; $\Delta\omega$ – интервал усреднения; N – объемная концентрация поглощающих молекул; $\alpha_{J',J''}$ – интегральный коэффициент поглощения вращательной линии; J'', J' – вращательные квантовые числа нижнего и верхнего состояний. Здесь суммирование производится по всем вращательным линиям, попавшим в спектральный диапазон $\Delta\omega$.

Как уже отмечалось, спектральный диапазон усреднения в этой модели должен удовлетворять следующим двум условиям:

1) величина $\Delta\omega$ должна во много раз превосходить ширины вращательных линий, попавших в этот спектральный диапазон. Это условие позволяет заменить интеграл от спектрального коэффициента поглощения во вращательной линии по волновому числу на интегральный коэффициент поглощения в данной линии, а интегрирование по спектру всех линий – на сумму их интегральных коэффициентов поглощения;

2) величина $\Delta\omega$ должна быть заметно меньше, чем характерный размер колебательной полосы. Выполнение этого условия гарантирует малое искажение рассчитываемых контуров колебательных полос, связанное с усреднением коэффициента поглощения на чрезмерно широком спектральном интервале (последнее часто имеет место при построении малогрупповых моделей).

Уравнение для интегрального коэффициента поглощения вращательной линии в электронном спектре двухатомной молекулы использовалось в виде

$$\alpha_{J',J''} = \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) N_{J''} \omega_{J',J''} \left| \langle v' | R_e(r) | v'' \rangle \right|^2 \frac{S_{J',J''}}{2J'' + 1}, \quad (3.99)$$

где $\omega_{J',J''}$ – волновое число центра линии; $\langle v' |$ и $| v'' \rangle$ – колебательные волновые функции верхнего и нижнего электронных состояний, соответственно; $R_e(r)$ – момент электронного перехода, зависящий от межъядерного расстояния; $N_{J''}$ – заселенность вращательного уровня J'' ; $S_{J',J''}$ – фактор Хенля – Лондона.

Поскольку вычисление сечений поглощения необходимо проводить в широком спектральном диапазоне (а, следовательно, и широком диапазоне межъядерных расстояний), в указанных

расчетах предпочтение было отдано *ab-initio* функциям $R_e(r)$. Таким образом, в используемой модели расчета сечений поглощения матричные элементы электронно-колебательных переходов вычисляются усреднением *ab-initio* зависимостей $R_e(r)$ по колебательным волновым функциям комбинирующих электронных состояний. Колебательные волновые функции определяются из решений уравнений Шредингера с РКР межатомными потенциалами. Аналогично рассчитывались и матричные элементы колебательных переходов, при этом вместо функций моментов электронных переходов $R_e(r)$ использовались функции дипольных моментов $M(r)$.

Сечения поглощения базы данных (Кузнецова Л.А. и др., 1999) были рассчитаны по формулам (3.98) и (3.99). Они приведены на рис. 3.2 – 3.11 для электронно-колебательно-вращательных и колебательно-вращательных полос, указанных в табл. 3.3. В первой колонке таблицы приведен условный номер сечения. Трехзначная цифра указывает номер рисунка и номер кривой, отвечающей сечению поглощения полосы, информация о которой дана в остальных колонках: спектроскопическое обозначение верхнего и нижнего электронных уровней (при их совпадении – рассчитывалась колебательно-вращательная полоса), спектральный диапазон $\Delta\Omega$, в котором рассчитывалось сечение, а также диапазон изменения колебательных квантовых чисел верхнего (v') и нижнего (v'') электронных состояний. Для каждой системы полос представлена спектральная зависимость сечений поглощения при $T = 5000$ К. Усреднение сечений по вращательной структуре производилось в 300-х спектральных группах, величина каждой из которых определялась по формуле $\Delta\omega = \Delta\Omega/300$. Подробная информация по использованным спектроскопическим постоянным верхнего и нижнего электронных состояний, а также библиографические ссылки на использованные результаты *ab-initio* расчетов функций дипольных моментов электронных переходов приведены в работе (Кузнецова Л.А. и др., 1999).

Представленные спектральные зависимости сечений поглощения двухатомных молекул удобно использовать в задачах оптической диагностики низкотемпературной плазмы. Они могут

служить полезным дополнением к информации, приведенной в хорошо известной книге по идентификации молекулярных спектров (Pearse R.W.B., et al., 1963).

Таблица 3.3

Параметры расчета сечений поглощения молекулярных систем

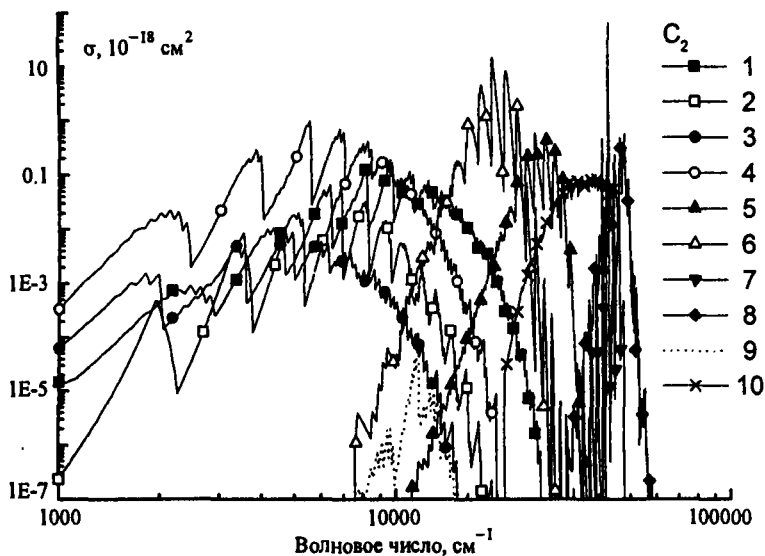
№ сечения	Молекула, электронный переход, название системы	Спектральный диапазон, см ⁻¹	Диапазоны изменения	
			ν'	ν''
Молекула C ₂				
3.2.1	C ₂ , A ¹ Π _u - X ¹ Σ _g ⁺ Филипса	100 ÷ 27000	15	15
3.2.2	C ₂ , B ¹ Σ _g ⁺ - A ¹ Π _u	100 ÷ 22000	10	10
3.2.3	C ₂ , B ¹ Δ _g - A ¹ Π _u	100 ÷ 17000	10	15
3.2.4	C ₂ , b ³ Σ _g ⁻ - a ³ Π _u Баллика - Рамзая	100 ÷ 20000	12	12
3.2.5	C ₂ , C ¹ Π _g - A ¹ Π _u Деландра - Д'Азамбуа	8000 ÷ 42000	10	15
3.2.6	C ₂ , d ³ Π _g - a ³ Π _u Свана	3500 ÷ 35000	12	15
3.2.7	C ₂ , D ¹ Σ _u ⁺ - X ¹ Σ _g ⁺ Малликена	38000 ÷ 48000	15	15
3.2.8	C ₂ , E ¹ Σ _g ⁺ - A ¹ Π _u	28000 ÷ 60000	10	15
3.2.9	C ₂ , E ¹ Σ _g ⁺ - D ¹ Σ _u ⁺	100 ÷ 23000	10	10
3.2.10	C ₂ , e ³ Π _g - a ³ Π _u Фокса - Герцберга	21000 ÷ 48500	10	12
Молекула C ₂ ⁻				
3.3.1	C ₂ ⁻ , A ² Π _u - X ² Σ _g ⁺	100 ÷ 15000	10	10
3.3.2	C ₂ ⁻ , B ² Σ _u ⁺ - X ² Σ _g ⁺	10000 ÷ 30000	10	10
Молекула C ₂ ⁺				
3.4.1	C ₂ ⁺ , B ⁴ Σ _u ⁻ - A ⁴ Π _g	1000 ÷ 23000	10	12
3.4.2	C ₂ ⁺ , B ⁴ Σ _u ⁻ - X ⁴ Σ _g ⁻	10000 ÷ 30000	10	10
Молекула CN				
3.5.1	CN, A ² Π - X ² Σ ⁺ Красная	1000 ÷ 24000	15	15
3.5.2	CN, B ² Σ ⁺ - A ² Π	1000 ÷ 45000	15	15
3.5.3	CN, B ² Σ ⁺ - X ² Σ ⁺ Фиолетовая	17000 ÷ 37000	15	15
3.5.4	CN, X ² Σ ⁺ - X ² Σ ⁺	1000 ÷ 10000	25	25
Молекула CO				
3.6.1	CO, a ³ Σ ⁺ - a ³ Π Асунди	100 ÷ 20000	12	12
3.6.2	CO, A ¹ Π - X ¹ Σ ⁺ 4-положительная	30000 ÷ 85000	20	29

Продолжение табл. 3.3

№ сечения	Молекула, электронный переход, название системы	Спектральный диапазон, см ⁻¹	Диапазоны изменения	
			ν'	ν''
3.6.3	CO, $V^1\Sigma^+ - A^1\Pi$ Ангстрема	5000 + 52000	15	20
3.6.4	CO, $V^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ Хопфильда – Бердже	74000 + 100000	15	25
3.6.5	CO, $b^3\Sigma^- - a^3\Pi$ 3 – положительная	16000 + 51000	10	21
3.6.6	CO, $d^3\Delta - a^3\Pi$ Триплетная	100 + 28 000	15	12
3.6.7	CO, $e^3\Sigma^- - a^3\Pi$ Германа	100 + 30000	15	12
3.6.8	CO, $X^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$	100 + 8000	25	25
Молекула CO ⁺				
3.7.1	CO ⁺ , $A^2\Pi - X^2\Sigma^+$ Кометная-хвостовая	100 + 50000	20	20
3.7.2	CO ⁺ , $B^2\Sigma^+ - A^2\Pi$ Балдета – Джонсона	5000 + 46000	15	20
3.7.3	CO ⁺ , $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 1 - отрицательная	11000 + 60000	15	20
3.7.4	CO ⁺ , $X^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$	10 + 10000	15	15
Молекула NO				
3.8.1	NO, $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ γ - система	16000 + 62000	8	22
3.8.2	NO, $B^2\Delta - X^2\Pi$ β' - система	35000 + 68000	7	22
3.8.3	NO, $B^2\Pi - X^2\Pi$ β - система	16000 + 60000	15	22
3.8.4	NO, $C^2\Pi - A^2\Sigma^+$	1000 + 20000	4	8
3.8.5	NO, $C^2\Pi - X^2\Pi$ δ - система	20000 + 65000	4	22
3.8.6	NO, $D^2\Sigma^+ - A^2\Sigma^+$	3500 + 15000	4	8
Молекула N ₂				
3.8.7	NO, $D^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ ϵ - система	20000 + 65000	4	22
3.8.8	NO, $X^2\Pi - X^2\Pi$	100 + 15000	25	25
3.9.1	N ₂ , $a^1\Pi_g - a^1\Sigma_u^-$ МакФарлана	100 + 20000	21	21
3.9.2				
3.9.3	N ₂ , $A^3\Sigma_u^- - X^1\Sigma_g^+$ Вегарда – Каплана	1000 + 75000	21	21
3.9.4	N ₂ , $b^1\Sigma_u^- - X^1\Sigma_g^+$ Бержа – Хопфильда 2	54000 + 120000	25	25
3.9.5	N ₂ , $B^3\Sigma_u^- - B^3\Pi_g$ «Y» - полосы	100 + 20000	21	21
3.9.6				
3.9.7	N ₂ , $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^-$ 1 - положительная	1000 + 25000	21	21
3.9.8	N ₂ , $b^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ Берджа – Хопфильда 1	74000 + 105000	1	12
3.9.9	N ₂ , $W^3\Delta_u - B^3\Pi_g$ Полосы Ву – Бенеша	10 + 20000	21	21
3.9.10				
3.9.11	N ₂ , $D^3\Sigma_u^- - B^3\Pi_g$ 4 – положительная	28500 + 50000	0	10

Окончание табл. 3.3

3.9.12	$N_2, E^3\Sigma_g^+ - A^3\Sigma_u^+$	30000 + 50000	1	10
3.9.13	$N_2, E^3\Sigma_g^+ - B^3\Pi_g$	15000 + 40000	1	15
3.9.14	$N_2, E^3\Sigma_g^+ - C^3\Pi_u$	500 + 10000	1	4
3.9.15	$N_2, C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$ 2-положительная	10000 + 40000	4	19
Молекула N_2^+				
3.10.1	$N_2^+, A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ Майнела	1000 + 38000	20	20
3.10.2	$N_2^+, B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ 1-отрицательная	7000 + 40000	10	20
3.10.3	$N_2^+, C^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ 2-отрицательная	27000 + 95000	15	20
Молекула NO^+				
3.11.1	$NO^+, A^1\Pi - X^1\Sigma^+$	39000 + 90000	15	22
Молекула O_2^+				
3.11.2	$O_2^+, A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$ 2-отрицательная	8000 + 52700	21	21
3.11.3	$O_2^+, b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ 1-отрицательная	1000 + 30500	15	20
Молекула O_2				
3.11.4	$O_2, B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ Шумана-Рунге	22000 + 57000	14	21

Рис. 3.2. Сечение поглощения молекулы C_2 при $T = 5000 \text{ K}$

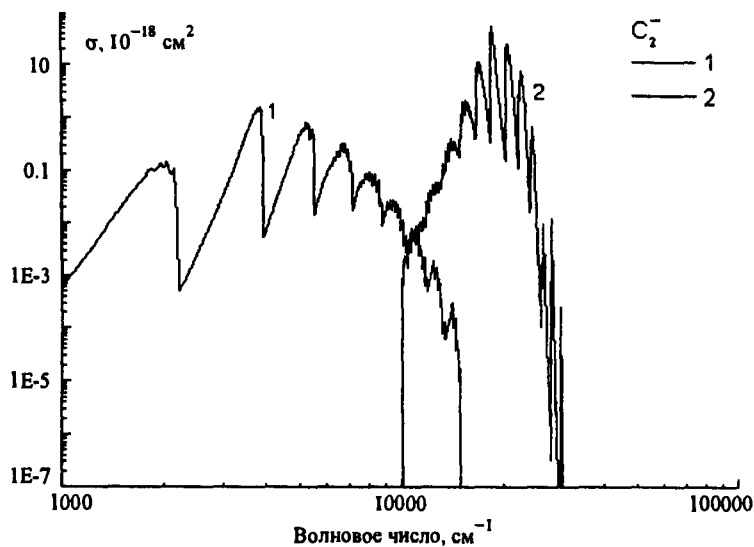


Рис. 3.3. Сечение поглощения молекулы C_2^- при $T = 5000 \text{ K}$

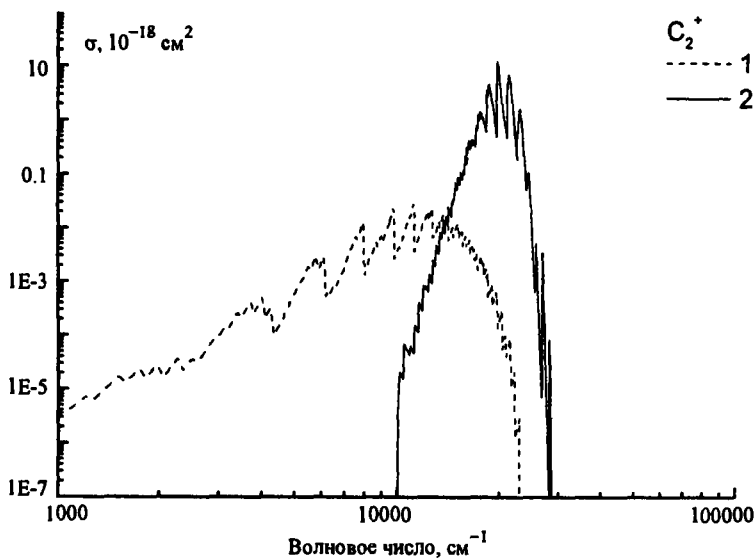


Рис. 3.4. Сечение поглощения молекулы C_2^+ при $T = 5000 \text{ K}$

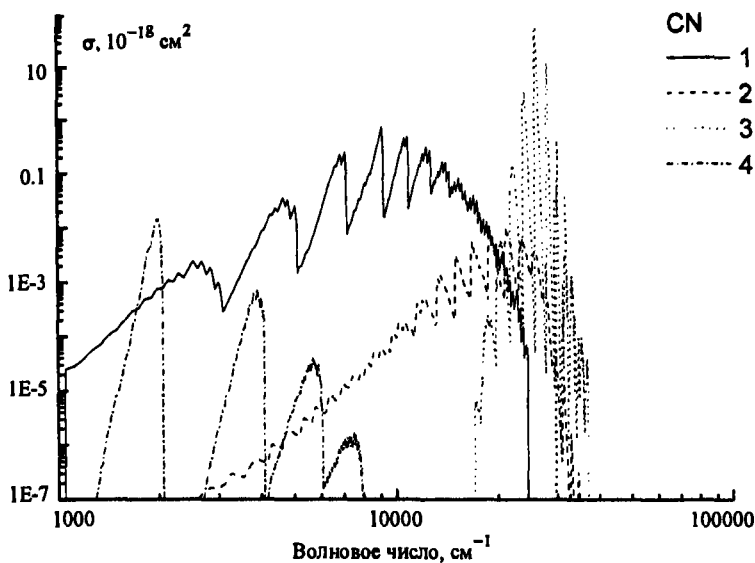


Рис. 3.5. Сечение поглощения молекулы CN при $T = 5000$ К

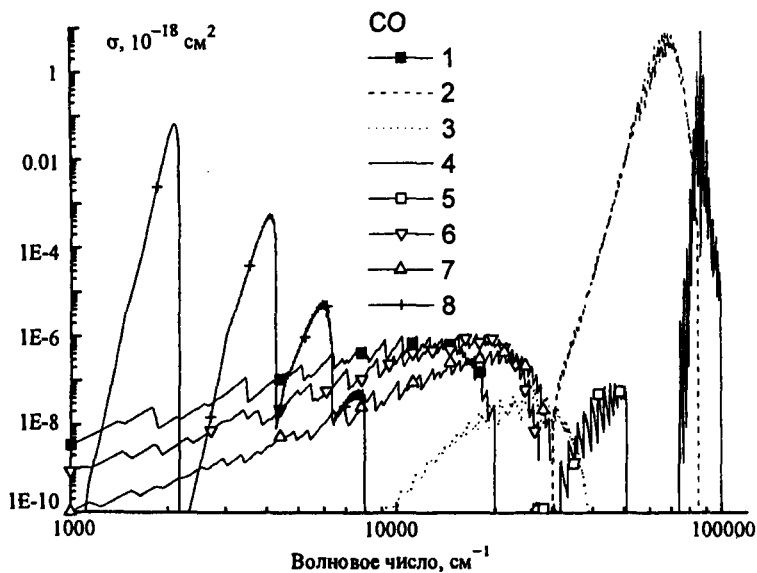


Рис. 3.6. Сечение поглощения молекулы CO при $T = 5000$ К

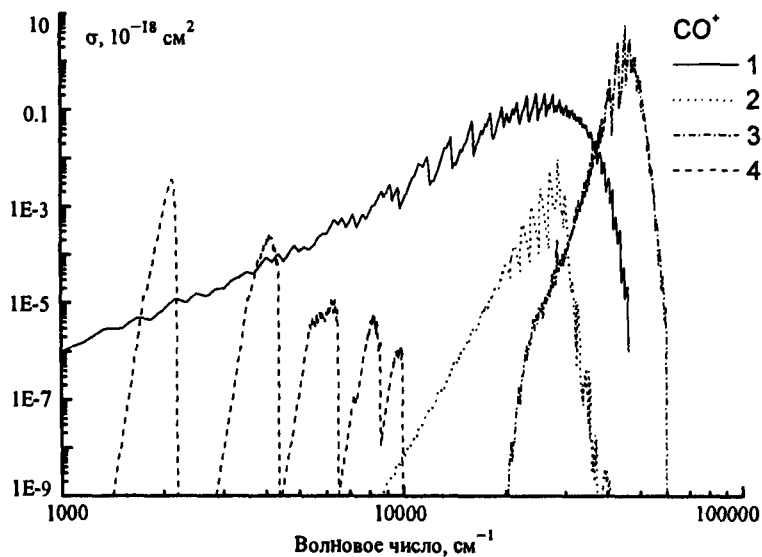


Рис. 3.7. Сечение поглощения молекулы CO^+ при $T = 5000 \text{ K}$

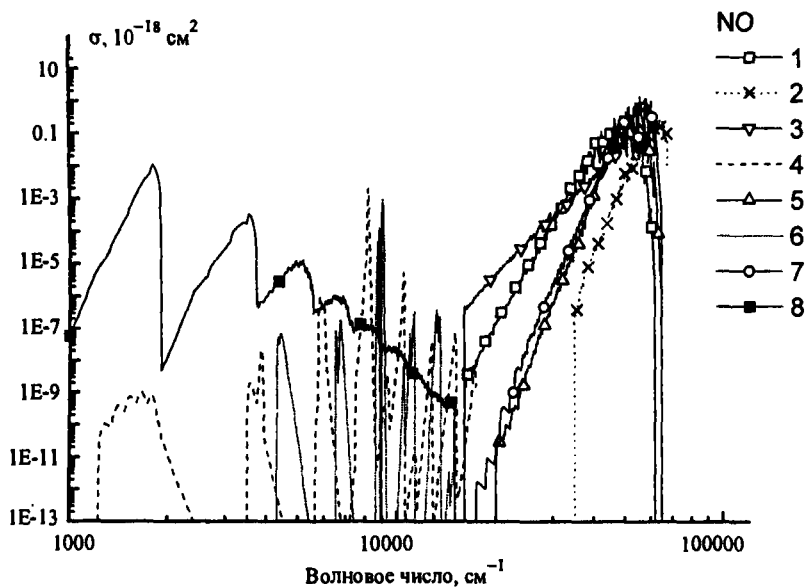


Рис. 3.8. Сечение поглощения молекулы NO при $T = 5000 \text{ K}$

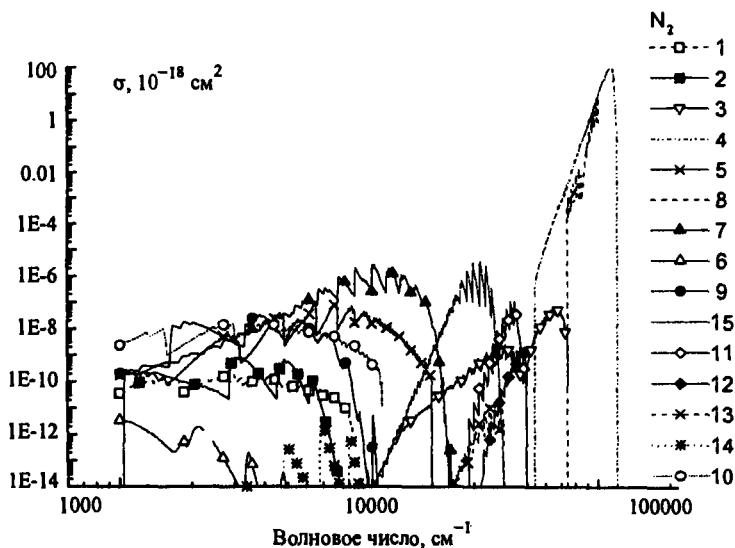


Рис. 3.9. Сечение поглощения молекулы N_2 при $T = 5000 \text{ K}$

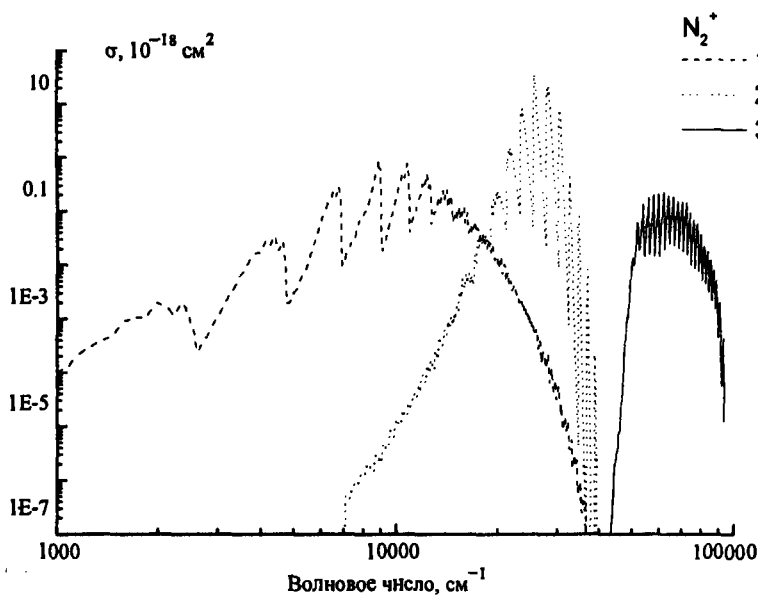


Рис. 3.10. Сечение поглощения молекулы N_2^+ при $T = 5000 \text{ K}$

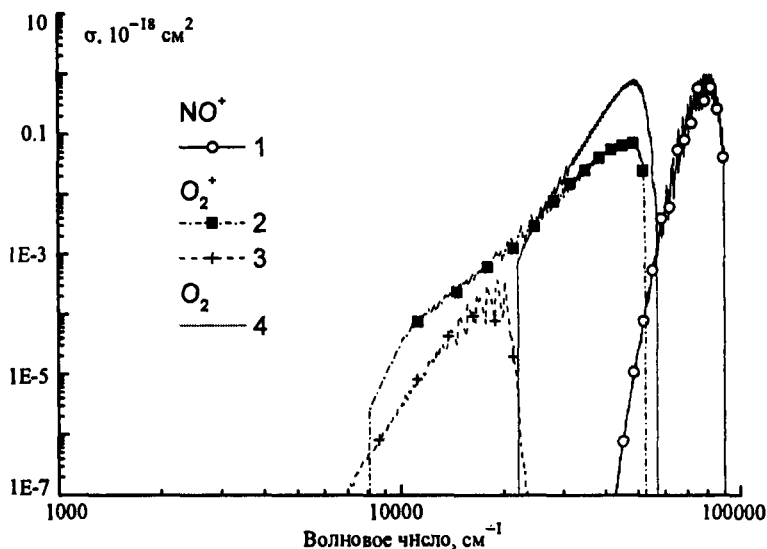


Рис. 3.11. Сечение поглощения молекул NO^+ , O_2 , O_2^+ при $T = 5000 \text{ K}$

3.10. Сечения поглощения двухатомных молекул, усредненные по колебательной структуре

Кроме рассмотренных выше соотношений, предназначенных для расчета сечений поглощения двухатомных молекул, можно получить еще более простые, в которых проведено сглаживание колебательной структуры. В работе (Биберман Л.М. и др., 1966) получена одна из таких формул для сглаженного по колебательной структуре коэффициента поглощения:

$$\kappa(\omega, T) = \frac{\pi r_0 N \omega R_e^2}{3 R_y \Delta \omega} \sum_{v'', v'} q_{v'', v'} W_{v'', v'}, \quad (3.100)$$

где N – концентрация молекул в единице объема; $\Delta \omega$ – спектральный диапазон, в котором проводится усреднение.

Рассмотрим вывод этого соотношения. В соответствии с указанной работой интегральное поглощение в колебательной полосе ($v'' \rightarrow v'$) имеет вид

$$\alpha_{v''} = \pi r_0 N_{v''} f_{v'', v'}, \quad (3.101)$$

где N_{v^*} – число поглощающих молекул в единице объема, находящихся в энергетическом состоянии с колебательным квантовым числом v^* ; f_{v^*,v^*} – сила осциллятора в поглощении. Определив f_{v^*,v^*} по формуле (Кузнецова Л.А. и др., 1980)

$$f_{v^*,v^*} = \frac{8\pi^2 m_e c_0}{3 h e^2} \frac{S_e(\omega)}{(2S+1)(2-\delta_{0,\Lambda^*})} q_{v^*,v^*} \omega_{v^*,v^*},$$

проведя суммирование (3.101) по колебательным полосам и усреднив на $\Delta\omega$, приходим к (3.100). Заметим, что

$$R_e^2 = \frac{S_e(\omega)}{(2S+1)(2-\delta_{0,\Lambda^*})},$$

т.е. сила электронного перехода нормируется на мультиплетность и фактор Λ -удвоения, а S_e измеряется в атомных единицах. Таким образом, это соотношение имеет следующий физический смысл: среднее в спектральном диапазоне сечение поглощения определяется делением суммарного интегрального поглощения во всех колебательных полосах, попавших в спектральный диапазон $\Delta\omega$, на величину этого диапазона.

Если $\kappa(\omega, T)$ измерять в $\text{атм}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$, то

$$\kappa(\omega, T) = 1.96 \times 10^4 \frac{\omega}{\Delta\omega} \frac{S_e(\omega)}{Q(T)} \sum_{v^*,v^*} q_{v^*,v^*} \exp\left[-hc_0 \frac{(E_{e^*} + E_{v^*})}{kT}\right]. \quad (3.102)$$

Заметим, что соотношения типа (3.102) исключительно полезны при построении малогрупповых спектральных моделей, когда на всю колебательную полосу приходится лишь несколько спектральных точек. Тем не менее, здесь, как и прежде, оказывается важным вопрос о задании величины спектрального диапазона, на котором определена электронная полоса. Так что вопрос об использовании результатов *ab-initio* расчетов остается актуальным и в данных моделях.

ГЛАВА 4

СЕЧЕНИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРИ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДАХ В МОЛЕКУЛАХ

Эти оптические характеристики необходимы при расчетах теплообмена излучением в инфракрасной области спектра ($\Delta\lambda \cong 1 + 50$ мкм, $\Delta\omega \cong 200 + 10000$ см⁻¹), где имеются колебательные полосы двух- и многоатомных молекул. В предыдущей главе было показано, что методы, развитые для расчета спектральных сечений поглощения в электронных полосах двухатомных молекул могут использоваться для расчета сечений поглощения колебательно-вращательных полос.

4.1. Проблемы построения моделей поглощения колебательных полос

Анализ колебательных полос таких практически важных в аэрофизике молекул, как NO, CO, HCl, OH, HF, дан в работе (Каменщиков В.А. и др., 1971).

Численное моделирование оптических коэффициентов многоатомных молекул представляет собой более сложную задачу, чем рассмотренные выше. По этой причине в практике расчетов течений излучающих газов используются некоторые средние характеристики, а их детальный расчет является предметом исследований молекулярной спектроскопии высокого разрешения.

Среди многоатомных молекул, представляющих интерес для механики излучающих газов, в первую очередь, можно назвать те, которые входят в состав атмосферного воздуха (CO₂, CH₄, N₂O, O₃, NO₂, H₂O) или находят применение в прикладных исследованиях (SF₆, HCN, C₆H₆, CS₂, SO₂, NH₃ и др.). Для них имеется дос-

таточно обширная экспериментальная и расчетная информация (Гуди Р., 1966; Зуев В.Е., 1970; Зуев В.Е. и др., 1986; Смирнов Б.М. и др., 1976; Rothman L.S., et al., 1992), которая, как правило, относится к поглощению холодными газами и используется с целью определения поглощательных способностей атмосферы. Оптические характеристики высокотемпературных газов известны в меньшей степени, но активно исследуются при разработке газовых лазеров и анализе излучательных способностей продуктов сгорания. Примерами различных подходов к решению этой задачи могут служить работы: (Ludwig C.V., 1971) – экспериментальное измерение поглощения в H_2O , (Головнев И.Ф. и др., 1984) – полинейчатый расчет поглощения в CO_2 , (Дорошенко В.М. и др., 1981; Хмелинин Б.А. и др., 1975) – расчет спектральной зависимости сечений поглощения, осредненных по вращательной структуре, так называемых «узкополосных» моделей, (Тамонис М., 1981; Тьен К.Л., 1975; Эдвардс Д.К., 1969; Эдвардс Д.К. и др., 1962, 1967; Edwards D.K., 1976) – расчет так называемых «широкополосных» моделей оптических коэффициентов, когда весь спектр определяется малым числом функций частоты.

Важной особенностью математического моделирования оптических характеристик двух- и многоатомных молекул при колебательно-вращательных переходах является необходимость корректного учета линейчатой структуры спектра. Следствием этого является то, что сечение поглощения не может характеризовать процесс переноса излучения и необходимо введение в рассмотрение новых функций (плотность линий и т.п.). Таким образом, речь идет уже не о моделях оптических свойств, а о моделях переноса для конкретных молекулярных полос. Некоторые из них рассмотрены в работе (Суржиков С.Т., 2004 (б)) в главах, посвященных применению статистических моделей к расчету переноса излучения в атомарных и молекулярных газах.

В частном, но практически важном случае повышенных давлений, молекулярные линии сильно перекрываются, что позволяет обойтись без учета линейчатой структуры. Одним из наиболее широко распространенных методов является метод эквивалентной полосы (Каменщиков В.А. и др., 1971; Пенниер С.С., 1963; Пласти-

нин Ю.А., 1969), где усредненный коэффициент поглощения определяется как частное от деления интегрального поглощения в полосе на ее ширину. Сведения об интегральных коэффициентах поглощения берутся обычно из эксперимента, а ширина полосы рассчитывается по фундаментальным спектроскопическим константам с учетом кантов полос. Таким образом, метод является двухпараметрическим, и в условиях умеренных оптических толщин и повышенных давлений ($p \geq 0.6$ атм для CO_2 , H_2O , $p \geq 6$ атм для CO , $p \geq 8$ атм для NO , $p \geq 13$ атм для HC , OH , $p \geq 30$ атм для HF (Каменщиков В.А. и др., 1971)) дает приемлемые результаты.

В случаях, когда необходимо знание зависимости коэффициентов поглощения от волнового числа целесообразно использовать табличные данные (Ludwig С.В., 1971; Хмелинин Б.А. и др., 1975; Ludwig С.В., et al., 1973, 1981) или приближенные аппроксимации типа (Тамонис М., 1981; Эдвардс Д.К., 1969; Эдвардс Д.К. и др., 1962, 1967; Edwards D.К., 1976; Felske J.D., et al., 1974). Например, Д.К. Эдвардсом с соавторами предложена аппроксимация для среднего коэффициента поглощения, отнесенного к плотности ρ в кг/м^3 при атмосферном давлении

$$\bar{\kappa}(\omega) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\Delta\omega} \kappa_\omega d\omega = \frac{C_1}{C_3 \sqrt{T/T_0}} \exp \left[- \left(\frac{|\omega - \omega_0|}{C_3 \sqrt{T/T_0}} \right)^m \right], \text{ м}^2/\text{кг}, \quad (4.1)$$

где $m = 1$ или 2 ; C_1 и C_3 определены в табл. 4.1 для ряда молекул. Заметим, что $C_1 \rho \times 10^{-6}$ можно трактовать как интегральное поглощение в полосе, C_3 – как ее ширину. Это позволяет относительно просто построить аппроксимацию вида (4.1) для полос, отсутствующих в литературе, но для которых имеются экспериментальные или более точные расчетные данные. Обратим внимание, что для пересчета к другим давлениям следует вводить дополнительные эмпирические константы. В особенности это следует делать при расчете излучательных способностей.

Весьма удобна для компьютерного использования модель, предложенная в работе (Li W., et al., 1995).

Используется также модель работы (Адзериho К.С. и др., 1987), где предложена аппроксимация табличных данных для смесей газов CO_2 , H_2O и CO в виде

$$\bar{\kappa}(\omega) = 0.3t^{-2} \sum_{m=1}^3 p_m \exp \left[A_m(\omega) + B_m(\omega) t^{-1} + C_m(\omega) t^{-2} \right], \quad (4.2)$$

где p_m – парциальное давление компонентов; $t = T/10^3$. Частотная зависимость $A_m(\omega)$, $B_m(\omega)$ и $C_m(\omega)$ дана в работе (Адзериho К.С. и др., 1987).

Таблица 4.1

g	H_2O			CO_2		
	$\omega_g, \text{см}^{-1}$	$C_{1,g}, \text{м}^2/\text{кг}$	$C_{3,g}, \text{см}^{-1}$	$\omega_g, \text{см}^{-1}$	$C_{1,g}, \text{м}^2/\text{кг}$	$C_{3,g}, \text{см}^{-1}$
1	1600	41.2	$52\sqrt{T/100}$	1060	$0.76F_1$	$12.4\sqrt{T/100}$
2	3750	23.3	$65\sqrt{T/100}$	2410	$0.76F_1$	$12.4\sqrt{T/100}$
3	5350	$3F_{011}$	$46\sqrt{T/100}$	3750	110	$11.5\sqrt{T/100}$
4	7250	$2.5F_{101}$	$46\sqrt{T/100}$	5200	$4F_2$	$24\sqrt{T/100}$
$F_{\nu_1\nu_2\nu_3} = \left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT} \sum_{i=1}^3 \nu_i \omega_i\right) \right] \prod_{i=1}^3 \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\omega_i}{kT}\right) \right]^{\nu_i},$ $\omega_1 = 3652 \text{ см}^{-1}, \quad \omega_2 = 1595 \text{ см}^{-1}, \quad \omega_3 = 3756 \text{ см}^{-1}$						
$F_1(T) = \frac{\left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT}(\omega_3 - \omega_1)\right) \right] \left[\exp\left(-\frac{hc}{kT}\omega_1\right) - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{2hc}{kT}\omega_1\right) \right]}{\left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT}\omega_1\right) \right] \left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT}\omega_3\right) \right]},$ $F_2(T) = \frac{\left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT}(\omega_3 + \omega_1)\right) \right]}{\left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT}\omega_1\right) \right] \left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{kT}\omega_3\right) \right]},$ $\omega_1 = 1351 \text{ см}^{-1}, \quad \omega_2 = 667 \text{ см}^{-1}, \quad \omega_3 = 2396 \text{ см}^{-1}$						

4.2. «Стандартные» модели поглощения

В исследованиях по радиационному теплообмену и спектральной диагностике струй продуктов сгорания наиболее широкое применение нашли следующие модели оптических свойств нагретых газов: стандартизованная модель NASA инфракрасного излучения, базы данных вращательных линий молекулярных компонентов продуктов сгорания, широкополосные и узкополосные модели усредненных по вращательной структуре коэффициентов поглощения, теоретические модели, основанные на квантово-химических расчетах.

Стандартная модель NASA (Ludwig C.B., et al., 1981) может быть использована как эталонная для целей расчета переноса теплового излучения усредненного в спектральных диапазонах $\Delta\omega \sim 25 \text{ см}^{-1}$. Усредненные коэффициенты поглощения H_2O и CO_2 , рассчитанные по данной модели, показаны на рис. 4.1 – 4.3.

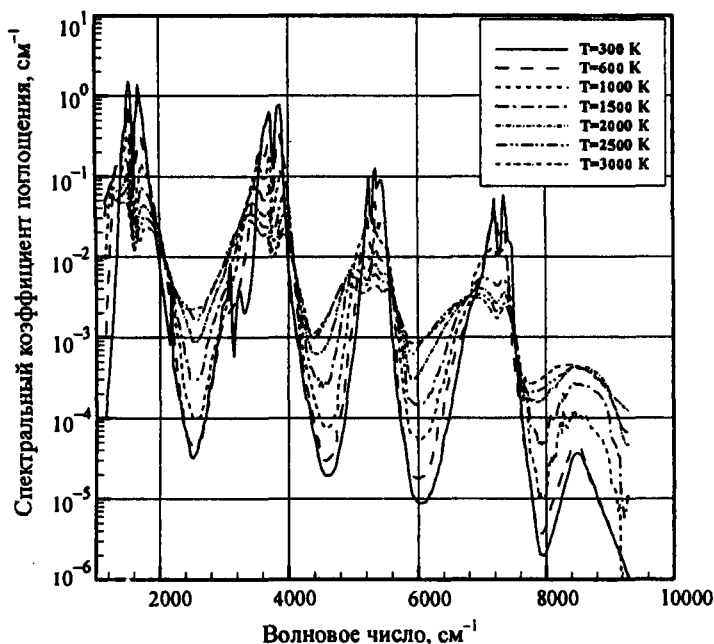


Рис. 4.1. Коэффициент поглощения H_2O при $p = 1 \text{ атм}$. Модель NASA (Ludwig C.B., et al., 1981)

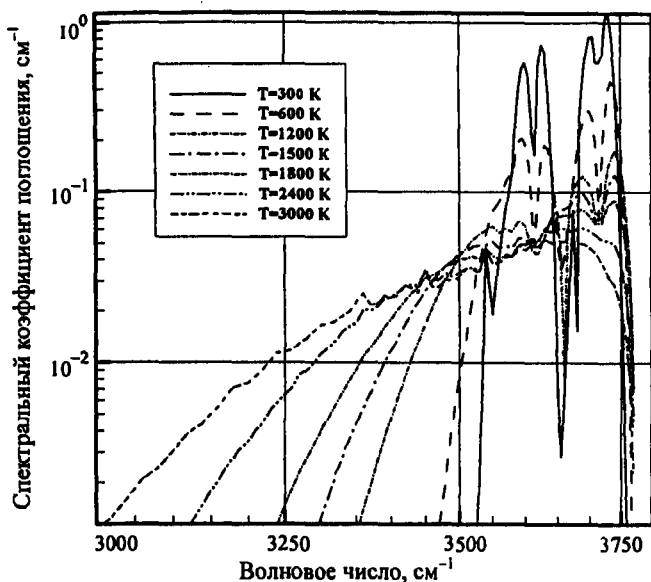


Рис. 4.2. Коэффициент поглощения CO₂ (полоса 2.7 мкм) при $p = 1$ атм. Модель NASA (Ludwig C.B., et al., 1981)

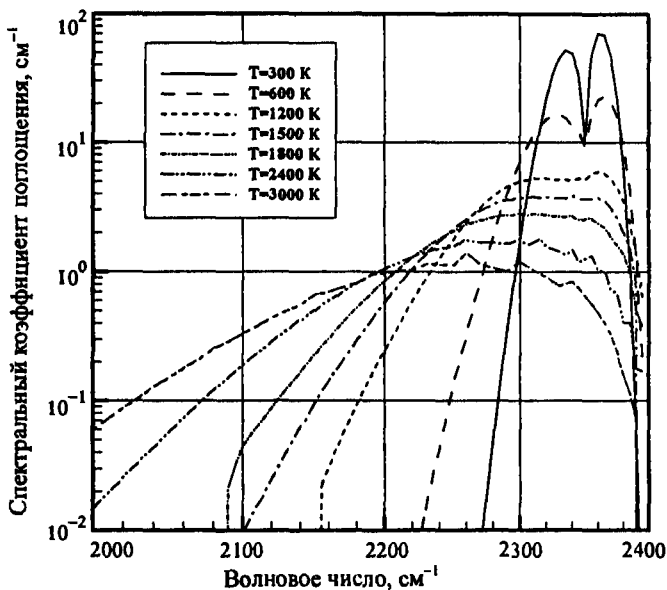


Рис. 4.3. Коэффициент поглощения CO₂ (полоса 4.3 мкм) при $p = 1$ атм. Модель NASA (Ludwig C.B., et al., 1981)

База данных HITRAN (Rothman L.S., et al., 1992) используется для *line-by-line* и усредненного расчета коэффициентов поглощения молекул, содержащихся в атмосферном воздухе, таких как: H_2O и CO_2 . Однако эта база данных была разработана применительно к проблемам атмосферной оптики и не содержит вращательных линий, образованных при квантовых переходах между высоковозбужденными энергетическими состояниями.

Пример *line-by-line* расчетов с использованием базы данных HITRAN показан на рис. 4.4 и 4.5. Если сравнить усредненные по вращательной структуре спектральные коэффициенты поглощения, показанные на рис. 4.1 и 4.4, 4.5, то видно, что вблизи центров колебательных полос H_2O согласие достаточно хорошее, а в окнах прозрачности база данных HITRAN дает сильно заниженные значения коэффициента поглощения, что объясняется неучетом высоковозбужденных колебательных уровней. Этот же результат получается при расчетах коэффициентов поглощения всех других молекулярных компонент базы данных HITRAN.

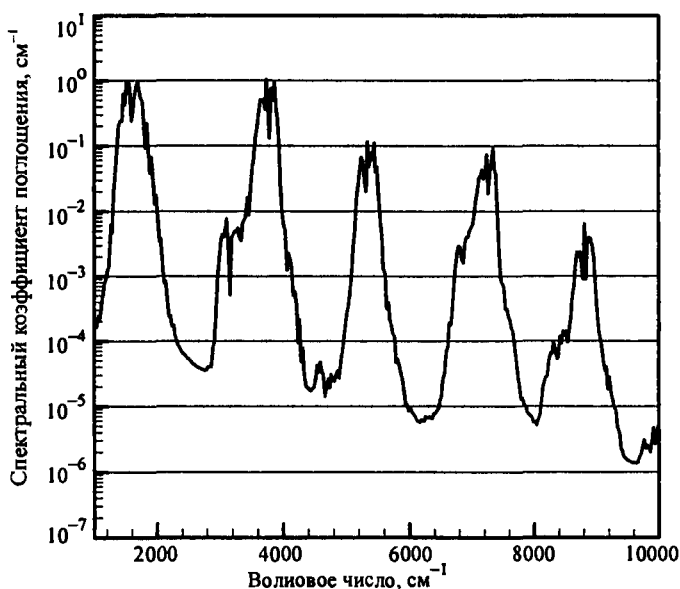


Рис. 4.4. Коэффициент поглощения H_2O при $T = 300$ К и $p = 1$ атм, рассчитанный усреднением данных из базы данных HITRAN (Rothman L.S. et al., 1992)

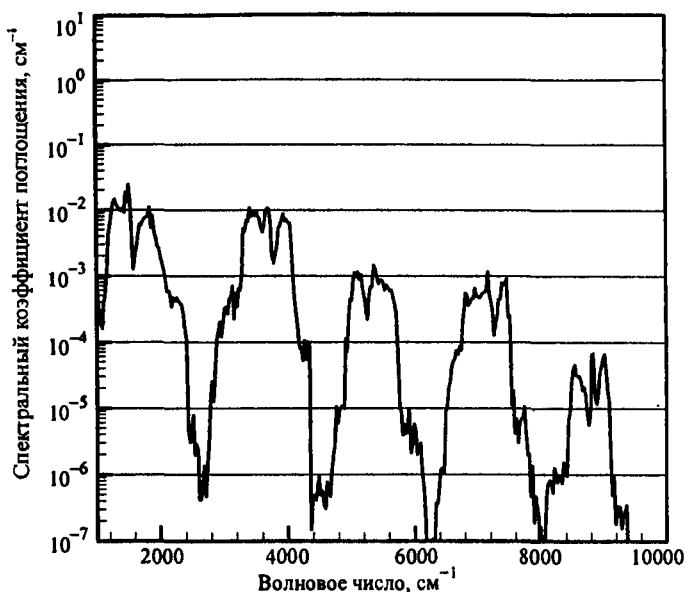


Рис. 4.5. Коэффициент поглощения H_2O при $T = 3000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$, рассчитанный усреднением данных из базы данных HITRAN (Rothman L.S. et al., 1992)

На рис. 4.6 и 4.7 представлены расчетные данные (Хмелинин Б.А. и др., 1975) для усредненных коэффициентов поглощения. Указанная расчетная модель основана на применении упрощенных моделей квантовой механики и квазиклассической физики, использующих в качестве исходных данных фундаментальные спектроскопические постоянные. Несложно убедиться в хорошем соответствии этих расчетных данных «эталонной» модели (Ludwig C.V., et al., 1981). Развитие моделей, подобных (Хмелинин Б.А. и др., 1975), является важным для решения задач о переносе неравновесного излучения.

Рис. 4.8 и 4.9 показывают усредненные спектральные коэффициенты поглощения, полученные с использованием аналитических широкополосных моделей спектра (Тьен К.Л., 1975; Edwards D.K., 1976; Edwards D.K., et al., 1973, 1976; Felske J.D., et al., 1974). Модель (Edwards D.K., et al., 1973), по которой выполнены расчеты, результаты которых показаны на рис. 4.8 и 4.9, дает лишь один из примеров широкополосных моделей.

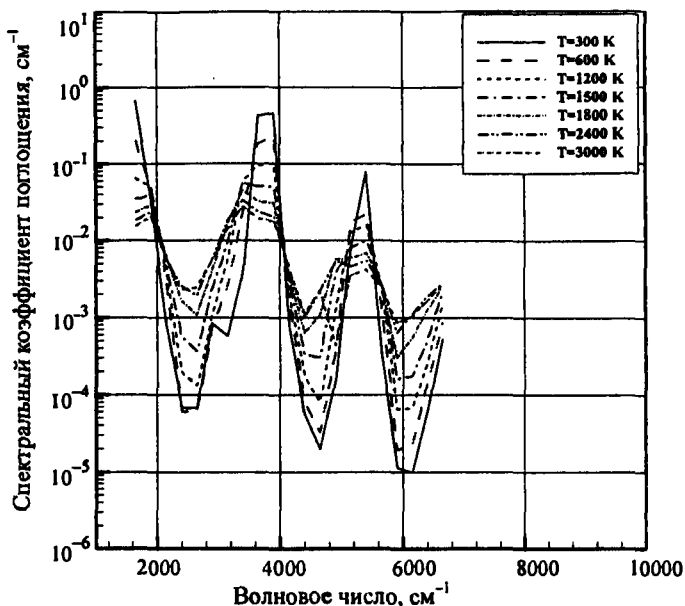


Рис. 4.6. Коэффициент поглощения H_2O при $p = 1$ атм. Модель Хмелинина - Пластинина

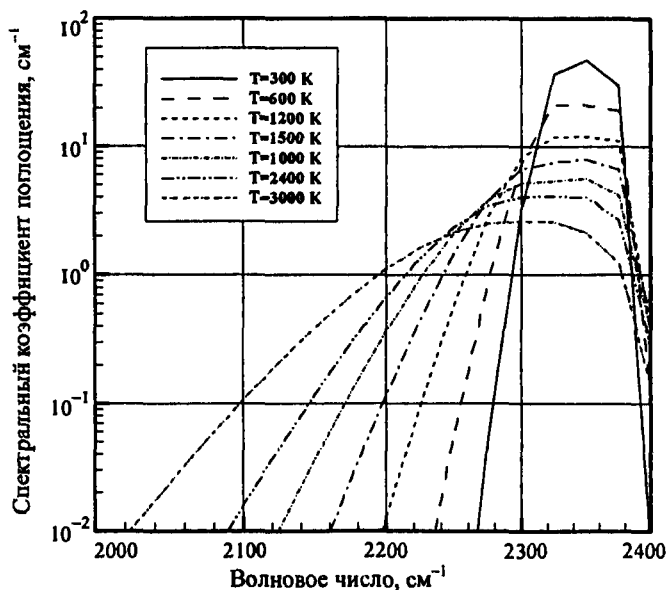


Рис. 4.7. Коэффициент поглощения CO_2 (полоса 4.3 мкм) при $p = 1$ атм. Модель Хмелинина - Пластинина

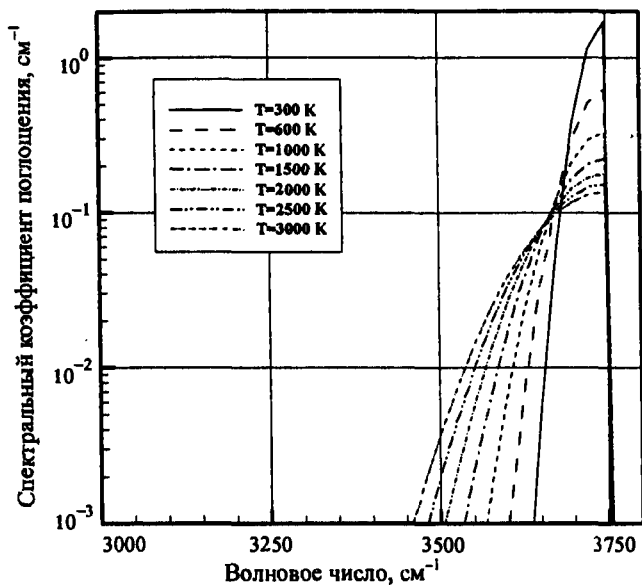


Рис. 4.8. Коэффициент поглощения CO₂ (полоса 2.7 мкм) при $p=1$ атм. Модель Эдвардса – Балакришнана

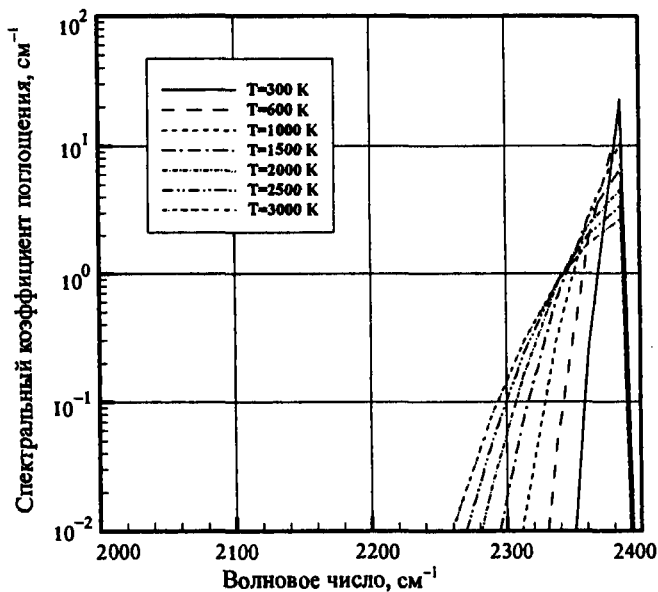


Рис. 4.9. Коэффициент поглощения CO₂ (полоса 4.3 мкм) при $p=1$ атм. Модель Эдвардса – Балакришнана

Преимущество моделей данного класса перед другими моделями состоит в том, что это – аналитические модели. На основе этих моделей легко создавать приближенные расчетные инженерные методики. Эти модели позволяют также достаточно просто аппроксимировать экспериментальные данные по поглощательным способностям молекул, для которых отсутствуют расчетные данные.

В работе (Суржиков С.Т., 2002) предложены широкополосные модели коэффициентов поглощения для молекул H_2O и CO_2 .

Спектральный коэффициент поглощения CO_2 рассчитывается по формулам

$$\kappa(\omega, T) = \sum_{i=1}^7 \kappa_i(\omega, T), \quad (4.3)$$

$$\kappa_i(\omega, T) = 0.01\rho \frac{C_{1,i}}{C_{3,i}} \exp\left[-\frac{|\omega - \omega_i|}{C_{3,i}}\right], \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}, \quad (4.4)$$

при $q_i = 0$;

$$\kappa_i(\omega, T) = 0.01\rho \frac{C_{1,i}}{C_{3,i}} \exp\left[-\left(\frac{\omega_i - \omega}{C_{3,i}}\right)^2\right], \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}, \quad (4.5)$$

при $q_i \neq 0$, $\omega \leq \omega_i$;

$$\kappa_i(\omega, T) = 0, \text{ при } q_i \neq 0, \omega > \omega_i.$$

Здесь ρ – плотность CO_2 , г/м^3 . Остальные переменные даны в табл. 4.2. На рис. 4.10 и 4.11 показаны примеры расчетов по данной модели.

Спектральный коэффициент поглощения H_2O рассчитывается по формулам

$$\kappa(\omega, T) = 0.01\rho \sum_{i=1}^{16} \frac{C_{1,i}}{C_{3,i}} \exp\left[-\frac{|\omega - \omega_i|}{C_{3,i}}\right], \text{ см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}. \quad (4.6)$$

Здесь ρ – плотность H_2O , г/м^3 . Остальные переменные даны в табл. 4.3. На рис. 4.12 показаны примеры расчетов по данной модели.

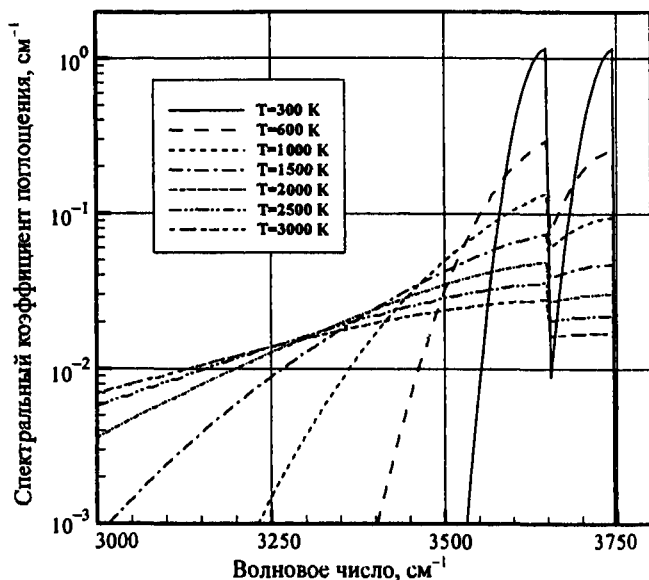


Рис. 4.10. Коэффициент поглощения CO₂ (полоса 2.7 мкм) при $p=1$ атм. Широкополосная модель (Суржиков С.Т., 2002)

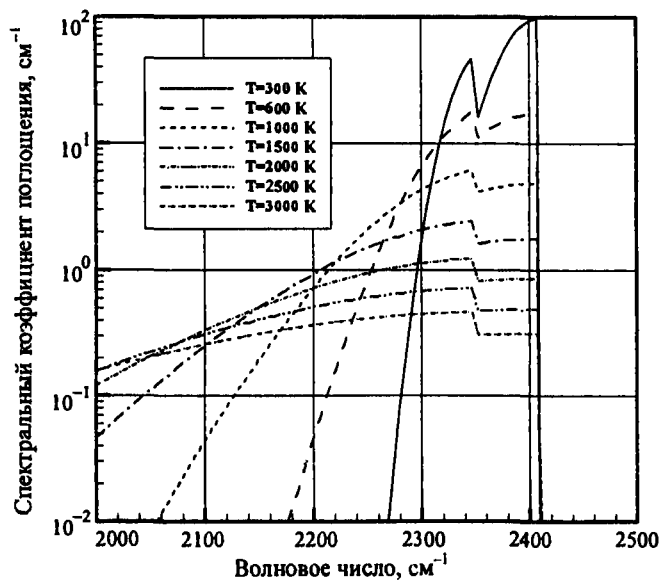


Рис. 4.11. Коэффициент поглощения CO₂ (полоса 4.3 мкм) при $p=1$ атм. Широкополосная модель (Суржиков С.Т., 2002)

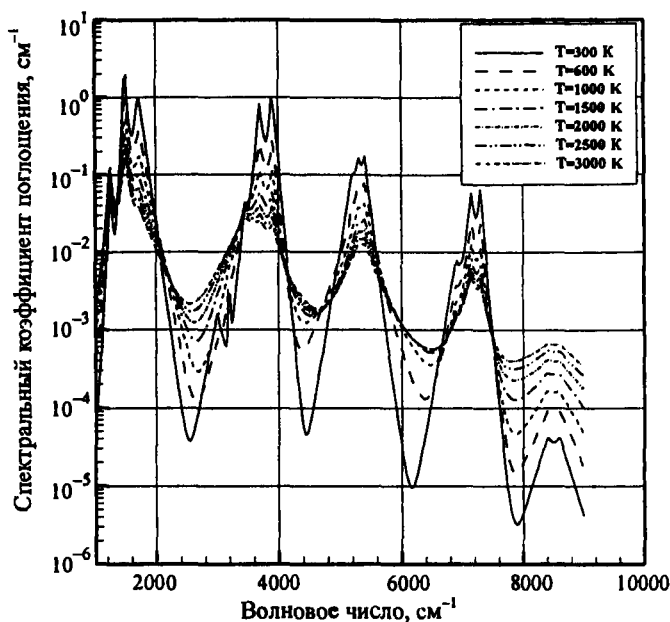


Рис. 4.12. Коэффициент поглощения H_2O при $p = 1$ атм. Широкополосная модель (Суржиков С.Т., 2002)

Таблица 4.2

Полоса	C_1	C_3	ω_i, cm^{-1}	q_i
1	19.	$12.9\sqrt{T/100}$	667.	0
2	$0.76F_1$	$12.4\sqrt{T/100}$	960.	0
3	$0.76F_1$	$12.4\sqrt{T/100}$	1060.	0
4	$60(273/T)^{0.35}$	$15.5\sqrt{T/100}(T/273)^{0.5}$	2350.	1
5	$250(273/T)^{0.5}$	$23.5\sqrt{T/100}(T/273)^{0.5}$	2410.	1
6	$3F_2(273/T)^{0.15}$	$24\sqrt{T/100}(T/273)^{0.75}$	3650.	1
7	$3F_2(273/T)^{0.25}$	$24\sqrt{T/100}(T/273)^{0.5}$	3750.	1

Примечание: $F_1 = S_1 S_2 / Q_3 Q_4$, $S_1 = 1 - \exp[-1.44((\Omega_3 - \Omega_1)/T)]$,
 $S_2 = \exp[-1.44(\Omega_1/T)] - 0.5 \exp[-1.44(2\Omega_1/T)]$, $F_2 = Q_1 / Q_3 Q_4$,
 $Q_1 = 1 - \exp[-1.44((\Omega_3 + \Omega_1)/T)]$, $Q_3 = 1 - \exp[-1.44(\Omega_1/T)]$,
 $Q_4 = 1 - \exp[-1.44(\Omega_3/T)]$, $\Omega_1 = 1351 \text{ cm}^{-1}$, $\Omega_3 = 2396 \text{ cm}^{-1}$.

Таблица 4.3

Параметры широкополосной модели H₂O

Номер полосы	C_1	C_3	$\omega_i, \text{см}^{-1}$
1	$0.05(T/T_0)^{1.5}$	$22(T/T_0)^{0.2}$	1250.
2	$10.2(T/T_0)^{0.1}$	$22(T/T_0)^{0.3}$	1500.
3	11.2	$42(T/T_0)^{0.5}$	1720.
4	0.025	$50(T/T_0)^{0.7}$	3000.
5	0.01	$5(T/T_0)^{0.7}$	3200.
6	$0.05(T/T_0)^{1.5}$	$25(T/T_0)^{0.7}$	3450.
7	6.	$25(T/T_0)^{0.7}$	3700.
8	$20(T/T_0)^{-0.9}$	$43(T/T_0)^{0.1}$	3900.
9	$F_{011}(T)$	$26(T/T_0)^{1.2}$	5200.
10	$F_{011}(T)$	$36(T/T_0)^{0.5}$	5300.
11	$1.0(T/T_0)^{0.2}$	$36(T/T_0)^{0.5}$	5400.
12	$0.1F_{011}(T)$	$73(T/T_0)^{0.3}$	6900.
13	$0.5F_{101}(T)$	$46(T/T_0)^{0.3}$	7150.
14	$0.5F_{101}(T)(T_0/T)^{0.3}$	$30(T/T_0)^{0.3}$	7300.
15	$0.00005(T/T_0)^{2.5}$	$100(T/T_0)^{0.5}$	8400.
16	$0.00005(T/T_0)^{2.5}$	$100(T/T_0)^{0.5}$	8600.

Примечание: $\Omega_1 = 3652 \text{ см}^{-1}$, $\Omega_2 = 1595 \text{ см}^{-1}$, $\Omega_3 = 3756 \text{ см}^{-1}$,

$$F_{\nu_1, \nu_2, \nu_3} = \left[1 - \exp\left(-1.44 \frac{S}{T}\right) \right] Q_{\text{H}_2\text{O}}, \quad Q_{\text{H}_2\text{O}} = \prod_{i=1}^3 \left[1 - \exp\left(-1.44 \frac{\Omega_i}{T}\right) \right]^{-\nu_i},$$

$$S = \sum_{i=1}^3 \nu_i \Omega_i.$$

В последние годы в научной литературе проявляется тенденция к разработке *ab-initio* методов расчета спектральных коэффициентов поглощения многоатомных молекул. В ближайшие годы такие расчеты войдут в практику научных исследований физической механики (см., например, (Partridge H., et al., 1997)).

ГЛАВА 5

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЫ ГАЗОВЫХ ТЕЧЕНИЙ

Необходимость в математическом моделировании оптических характеристик твердых и жидких частиц, присутствующих в газовых потоках, возникает в целом классе задач механики излучающего газа. В большинстве случаев – это относительно низкотемпературные течения ($T \cong 300 + 3000$ К) в камерах ракетных двигателей и в струях продуктов сгорания ракетных топлив (Нельсон Х.Ф., 1986; Нельсон Х.Ф. и др., 1987; Плучино А.Б. и др., 1981; Повинелли Л.А. и др., 1964; Lyons R.V., et al., 1983; Pearce В.Е., 1978; Даладова Л.А. и др., 1990), в факелах теплоэнергетических установок, где сжигаются природный газ, мазут или пылеугольные смеси (Адзерихо К.С. и др., 1987; Блох А.Г., 1984). Ближко примыкают сюда задачи атмосферной оптики и экологии (Гуди Р., 1966; Зуев В.Е., 1970; Зуев В.Е. и др., 1986; Марчук Г.И. и др., 1976; Staylor W.F., 1978). В практике решения перечисленных задач наиболее часто встречаются частицы Al_2O_3 , Fe_2O_3 , H_2O , CaO , C , MgO , ZrO_2 , VO_2 , SiO_2 . Частицы могут быть однородными, полыми, двухслойными, иметь произвольно распределенные по объему неоднородности, а также произвольную форму (Плучино А.Б. и др., 1981; Борен К. и др., 1986; Домбровский Л.А., 1974).

5.1. Проблемы построения оптических моделей конденсированной фазы газовых течений

Отличительной особенностью двухфазных сред является большая роль процессов светорассеяния в переносе лучистой энергии. Методы решения таких задач подробно рассмотрены в

работе (Суржиков С.Т., 2004 (б)). В набор оптических характеристик, требуемых для расчета переноса излучения в светорассеивающих средах, входят: сечение рассеяния, сечение поглощения и фазовая функция (индикатриса) рассеяния.

Сечение рассеяния можно определить как кажущуюся площадь, которую частица представляет для падающего луча с учетом ее способности отклонять излучение от направления падения (Зигель Р. и др., 1975), т.е. это отношение потока энергии, рассеиваемого частицей, к потоку энергии, падающему на единицу площади. Сечение рассеяния зависит от формы и природы рассеивающего объекта, длины волны, поляризации и когерентности падающего излучения и может не совпадать с физической величиной поперечного сечения этого объекта. Отношение величины сечения рассеяния к площади проекции частицы, перпендикулярной направлению падающего луча, называется коэффициентом или *фактором эффективности рассеяния*. Аналогичным образом, но уже по отношению к поглощенному излучению, определяются понятия сечения поглощения и *фактора эффективности поглощения*.

Индикатриса рассеяния определяется как отношение интенсивности излучения, рассеянного частицей в направлении, которое характеризуется углами θ и φ , к интенсивности изотропного рассеяния. Она характеризует вероятность рассеяния излучения в заданном направлении. Исходя из вероятностной трактовки интенсивности излучения, оказывается удобным использовать нормированную индикатрису рассеяния $p(\varphi, \theta)$, т.е. такую, что

$$\int_0^{\theta=\pi} \int_0^{\varphi=2\pi} p(\varphi, \theta) \sin \theta d\theta d\varphi = 4\pi. \quad (5.1)$$

Кроме перечисленных характеристик широко используются следующие: сечение ослабления (сечение экстинкции), средний косинус рассеяния, сечение рассеяния в обратном направлении (так называемое «радиолокационное сечение обратного рассеяния») (Борен К. и др., 1986)). *Экстинкция* – это обусловленное рассеянием и поглощением затухание электромагнитной волны

при ее прохождении через среду из частиц. Если сечения рассеяния и поглощения обозначить соответственно σ_s и σ_a , то сечение экстинкции запишется в виде $\sigma_e = \sigma_a + \sigma_s$ (на самом деле σ_a определяют по σ_e и σ_s). Средний косинус рассеяния характеризует степень асимметрии индикатрисы рассеяния по широтному углу θ в предположении ее симметричности по азимуту ϕ :

$$\bar{\mu} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} p(\phi, \theta) \cos \theta \sin \theta d\theta = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 p(\mu) \mu d\mu, \quad \mu = \cos \theta. \quad (5.2)$$

Из соотношения (5.2) следует, что при изотропном рассеянии $\bar{\mu} = 0$. Если частица рассеивает преимущественно вперед, то $\bar{\mu} > 0$, если назад – то $\bar{\mu} < 0$. Средний косинус рассеяния является не только удобным фактором, свидетельствующим о типе индикатрисы, но и широко используется в расчетных методах теории переноса излучения.

Везде в дальнейшем частицы будут предполагаться сферическими. Именно для таких частиц получены строгие результаты теории Ми (Борен К. и др., 1986; Борн М. и др., 1973). Вопросы отличия формы частиц от сферических рассматриваются в работах (Борен К. и др., 1986; Пришивалко А.П., 1984).

Теория Ми основана на решении уравнений Максвелла для достаточно идеализированной ситуации. Рассматривается однородная сферическая частица, помещенная в однородную, изотропную, диэлектрическую, бесконечную среду. На эту частицу падает плоская электромагнитная волна. Решение уравнений Максвелла в виде рядов по векторным гармоникам ищется в двух областях: внутри и вне частицы. Предполагается, что частица может поглощать, пропускать и рассеивать излучение. Несмотря на большое число допущений, положенных в основу теории Ми, она нашла широкое применение в прикладных физических исследованиях. Теория Ми позволяет достаточно хорошо описать оптические характеристики не только изолированных частиц, но и их ансамблей. Были выполнены специальные исследования по определению минимального расстояния между сферическими частицами, гарантирующего независимость рассеяния. Оказалось, что

если расстояние между центрами частиц превосходит три диаметра, то интерференцией можно пренебречь (Оцисик М.Н., 1976).

Входными данными для расчета оптических характеристик частицы по теории Ми являются ее радиус r , действительная $n(\lambda, T)$ (показатель преломления) и мнимая $k(\lambda, T)$ (показатель поглощения) части комплексного показателя преломления, т.е.

$$m(\lambda, T) = n(\lambda, T) + i \cdot k(\lambda, T). \quad (5.3)$$

Эта функция содержит в себе всю информацию о свойствах материала частицы. Формулы, по которым определяются факторы рассеяния Q_s и ослабления Q_e , индикатриса рассеяния и средний косинус $\bar{\mu}$, представляют собой бесконечные ряды рекуррентных функций, выражающихся, в свою очередь, через функции Риккати–Бесселя аргументов m и $x = 2\pi r/\lambda$, где x – так называемый *параметр дифракции*; λ – длина волны излучения. Расчетные соотношения относительно просты, однако из-за плохой сходимости рядов их программная реализация является непростой задачей, и при отсутствии опыта подобных расчетов рекомендуется использовать апробированные программы. Тексты таких программ на Фортране имеются, например, в работах (Адзерихо К.С. и др., 1987; Борен К. и др., 1986). Детально вопросы алгоритмизации обсуждаются в работах (Блох А.Г., 1984; Пришивалко А.П., 1983; Дейрменджан Д., 1971; Dombrovsky L.A., 1996).

Основным параметром, определяющим скорость сходимости рядов, является параметр дифракции x . Наихудшая сходимость наблюдается при $x \gg 1$. Однако при $x \geq 20 + 30$ можно использовать приближение геометрической оптики (Оцисик М.Н., 1976). В противоположном случае $x \ll 1$ ($|m|x \ll 1$) в рядах достаточно удержать только первое слагаемое. Это приближение соответствует закону рассеяния Рэлея:

$$Q_s = \frac{8x^4}{3} \left| \frac{(m^2 - 1)}{(m^2 + 2)} \right|^2, \quad Q_a = 4xIm \left[\frac{(m^2 - 1)}{(m^2 + 2)} \right], \quad (5.4)$$

где Im означает мнимую часть.

Индикатриса рэлеевского рассеяния определяется по формуле (Соболев В.В., 1972)

$$p(\mu) = \frac{3}{4}(1 + \mu^2). \quad (5.5)$$

Делались неоднократные попытки аппроксимировать результаты теории Ми при промежуточных значениях x . В теоретическом анализе процессов светорассеяния нашла широкое применение аналитическая формула для индикатрисы рассеяния Хеньи – Гринштейна (Борен К. и др., 1986; Соболев В.В., 1972; Chu С.М., et al., 1955):

$$p(\mu) = \frac{(1 - \bar{\mu}^2)}{(1 + \bar{\mu}^2 - 2\bar{\mu}\mu)^{3/2}}, \quad (5.6)$$

которая особенно удобна тем, что просто разлагается в ряд по полиномам Лежандра:

$$p(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} (2i+1) \bar{\mu}^i P_i(\mu). \quad (5.7)$$

Для решения задач теплообмена излучением необходимо знание объемных коэффициентов рассеяния, поглощения и индикатрис рассеяния элементарных физических объемов многофазных сред, содержащих частицы различных размеров. Определение этих коэффициентов производится в различных приближениях, простейшим из которых является приближение монодисперсной среды, где размеры всех частиц полагаются одинаковыми и равными r . Сечения рассеяния и поглощения определяются по формулам

$$\sigma_s(\lambda, r) = \pi r^2 Q_s(\lambda, r), \quad \sigma_a(\lambda, r) = \pi r^2 Q_a(\lambda, r), \quad (5.8)$$

а соответствующие коэффициенты

$$\beta_\lambda(r) = \sigma_s(\lambda, r) N, \quad \kappa_\lambda(r) = \sigma_a(\lambda, r) N, \quad (5.9)$$

где N – число частиц в единице объема. Если задана не числовая, а массовая концентрация $C = 4\pi r^3 \rho N/3$, где ρ – плотность вещества частицы, то

$$\beta_{\lambda}(r) = \frac{3C\sigma_s(\lambda, r)}{4\pi r^3 \rho}, \quad \kappa_{\lambda}(r) = \frac{3C\sigma_a(\lambda, r)}{4\pi r^3 \rho}. \quad (5.10)$$

В реальных условиях многофазные смеси всегда содержат частицы различных размеров, т.е. являются полидисперсными. Распределение частиц одного сорта по размерам определяется

функцией распределения $f(r)$ такой, что $\int_0^{\infty} f(r) dr = 1$, т.е. ве-

личина $f(r) dr$ характеризует долю частиц, имеющих размеры в диапазоне $r + r + dr$ от общего числа частиц. Учитывая, что $f(r)$ имеет смысл плотности вероятности распределения частиц по размерам, средние коэффициенты рассеяния $\bar{\beta}_{\lambda}$ и поглощения $\bar{\kappa}_{\lambda}$ могут определяться как математическое ожидание соответствующих функций, получаемых для монодисперсной среды:

$$\bar{\beta}_{\lambda} = N \int_0^{\infty} \beta_{\lambda} f(r) dr, \quad \bar{\kappa} = N \int_0^{\infty} \kappa_{\lambda} f(r) dr, \quad (5.11)$$

$$\bar{\mu} = \bar{\beta}_{\lambda}^{-1} \int_0^{\infty} \bar{\mu}(r, \lambda) \beta_{\lambda} f(r) dr,$$

где $\bar{\mu}(r, \lambda)$ – средний косинус рассеяния.

Из соотношений (5.11) ясно, что адекватность оптической модели полидисперсной среды реальным условиям во многом определяется точностью знания функции $f(r)$. Широкий класс полидисперсных сред, от атмосферных аэрозолей до продуктов сгорания различных топлив и газопылевых смесей, описывается функцией Гамма-распределения частиц (Адзерихо К.С. и др., 1987; Зуев В.Е. и др., 1986; Дейрменджан Д., 1971):

$$f(r) = Ar^{\mu} \exp(-\gamma r^b), \quad (5.12)$$

где A , μ , γ , b – постоянные. Например, для атмосферных аэрозолей, исследованных в работе (Зуев В.Е. и др., 1986), получено из расчета числовой концентрации частиц $N = 100 \text{ см}^{-3}$:

1. $A = 4 \times 10^5$, $\gamma = 20$, $\mu = 2$, $b = 0.1$ – высотный стратосферный аэрозоль («дымка Н»);
2. $A = 4.9757 \times 10^6$, $\gamma = 15.1186$, $\mu = 2$, $b = 0.5$ – континентальный аэрозоль («дымка L»).

Распределение сажистых частиц при сжигании мазута и газа (Блох А.Г., 1984) определяется по (5.12) с коэффициентами $A = (2/\sqrt{\pi}) r_m^{-3}$, $\gamma = r_m^{-2}$, $\mu = 2$, $b = 2$. Здесь $r_m = \sqrt[3]{\mu/\gamma b}$ – модальный (наиболее вероятный) радиус в совокупности частиц, который для сажи обычно равен 0.01 ± 0.02 мкм. Распределение частиц Al_2O_3 в струях продуктов сгорания подчиняется зависимости (Повинелли Л.А., 1964):

$$f(r) = A^{B+1} r^B \Gamma(B+1) \exp(-Ar), \quad (5.13)$$

где $B = 0.5$, $A = 2.5$ мкм⁻¹ или $B = 0.6$, $A = 3$ мкм⁻¹.

Кроме модального радиуса используются и другие средние величины, позволяющие заменить реальную полидисперсную систему частиц некоторой эффективной монодисперсной средой. Средний радиус порядка p определяется по формуле

$$\bar{r}_p = \int_0^{\infty} r^p f(r) dr = r_{p0},$$

где при $p = 0$ получается модальный радиус, при $p = 1$ – средний арифметический (обозначается r_{10}), при $p = 2$ – среднеквадратичный (r_{20}), $p = 3$ – среднекубический (r_{30}). Применяются также средние радиусы вида

$$\bar{r}_{p,p-1} = \bar{r}_p / \bar{r}_{p-1}. \quad (5.14)$$

Средние радиусы имеют определенный физический смысл. Например, r_{20} задает такую эффективную монодисперсную среду, у которой суммарная поверхность F всех частиц равна суммарной поверхности частиц в полидисперсной среде, а r_{30} вводит эквивалентную по суммарной массе G монодисперсную среду. Средний по удельной поверхности радиус r_{32} определяет эффективную монодисперсную среду по эквивалентности величины F/G .

Введение средних радиусов $\bar{r}_{p,p-1}$ позволяет существенно повысить эффективность математического моделирования за счет расчета оптических коэффициентов только для эквивалентной монодисперсной среды. Это обосновано и с практических позиций, ибо по результатам экспериментов обычно определяются не функции распределения $f(r)$, а заменяющие их гистограммы, точность которых (особенно при высоких температурах) невысока. Именно такое представление экспериментальных данных обусловило применение еще одного приближенного метода учета полидисперсности, когда интегралы (5.11) берутся методом прямоугольников на участках, где $f(r) = \text{const}$. Отметим также ряд аппроксимирующих методов (Адзерихо К.С. и др., 1987), основанных на эмпирической формуле, предсказывающей положения основных экстремумов функций.

Вместе с этим, следует иметь в виду, что из-за нерегулярности функций факторов рассеяния и поглощения, при введении среднего радиуса $\bar{r}_{p,p-1}$ или интегрировании по трапециям могут быть внесены значительные погрешности в спектральные коэффициенты (Радюк И.М. и др., 1980), поэтому приближенными методами следует пользоваться с осторожностью.

Для расчета оптических свойства по рекомендованным программам и приведенным соотношениям, необходимо задать показатели преломления и поглощения вещества частиц. Основы теории и экспериментальных методов определения указанных свойств даны в работах (Борен К. и др., 1986; Оцисик М.Н., 1976; Петров В.А. и др., 1985; Мучник Г.Ф. и др., 1974; Рубцов Н.А., 1984). Там же приведено много данных для конкретных веществ.

В работе (Блох А.Г., 1984) рекомендуются эмпирические формулы для сажистых частиц, образующихся при сгорании газомазутного пламени:

$$n(\lambda) = 1.6 + 0.3\lambda, \quad k(\lambda) = \lambda^{0.6}, \quad 1 < \lambda < 6 \text{ мкм}, \quad (5.15)$$

и для частиц кокса, образующихся при горении пылеугольных смесей:

$$n(\lambda) = 1.95 + 0.07\lambda, \quad k(\lambda) = 0.86 + 0.03\lambda, \quad 0.5 < \lambda < 6 \text{ мкм}, \quad (5.16)$$

Большой практический интерес представляют оптические свойства Al_2O_3 , частицы которого часто встречаются в продуктах сгорания твердых топлив. В работе (Домбровский Л.А. и др., 1973) рекомендуются следующие аппроксимационные формулы:

$$n(\lambda, T) = \left[1 + 0.029 \left(T/10^3 - 0.483 \right) \right] \times \\ \times \sqrt{1 + \lambda^2 \left(\frac{1.024}{\lambda^2 - 0.003776} + \frac{1.058}{\lambda^2 - 0.01225} + \frac{5.281}{\lambda^2 - 321.4} \right)},$$

$$k(\lambda, T) = 0.002 \left(0.06\lambda^2 + 0.7\lambda + 1 \right) \exp \left[1.847 \left(T/10^4 - 2.95 \right) \right], \quad (5.17)$$

$0.2 < \lambda < 7$ мкм, $T < 3500$ К.

В работе (Пластинин Ю.А. и др., 1985) применялась другая аппроксимация свойств расплавленных частиц Al_2O_3 :

$$n(\lambda, T) = \left[1 + 0.029 \left(\frac{T}{10^3} - 0.473 \right) \right] \sqrt{3.081 + \frac{5.28\lambda^2}{\lambda^2 - 321.361}},$$

$$k(\lambda, T) = a\lambda T^2 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_g} \right)^2 + b\lambda \exp \left[c \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_g} \right) \frac{1}{T} \right] + \\ + \lambda d \exp \left[-6.07 \times 10^{-3} \left(\frac{10^4}{\lambda} - \omega_0 \right) \frac{1}{T} \right] \left[1 - \exp \left(-\frac{1.438\omega_0}{T} \right) \right] + \\ + k\lambda^m n^{-1} \exp \left[-\frac{7200}{T\lambda_g} \right], \quad \lambda_g^{-1} = 0.6916 \left(\frac{f}{T} - h \right), \quad (5.18)$$

$0.2 < \lambda < 70$ мкм⁻¹, $1000 \leq T \leq 3500$ К;

$b = \lambda_g b' / \lambda$ мкм⁻¹, $c = 0$, при $\lambda < \lambda_g$;

$a = 0$, $b = b'$, при $\lambda \geq \lambda_g$;

$a = 2.1 \times 10^{-9}$ мкм·К⁻², $b' = 1.3 \times 10^{-3}$ мкм⁻¹, $c = 5.6 \times 10^{-3}$ мкм·К;

$f = 1.289 \times 10^{-4}$ К, $h = 3.232$, $\omega_0 = 1333$ см⁻¹, $d = 7.93 \times 10^{-4}$ мкм⁻¹;

$k = 2.3 \times 10^{-2}$ мкм⁻¹, $m = 1$.

Заметим, что при использовании аппроксимаций оптических свойств для интерпретации экспериментальных данных следует учитывать специфику реального процесса. На оптические свойства могут оказывать сильное влияние наличие примесей в основном материале, релаксационные процессы перестройки его внутренней структуры и т.п.

5.2. Влияние фазовых переходов на оптические свойства конденсированной фазы газовых течений

В работе (Plastinin Yu.A., et al., 2001) представлена модель спектральных оптических свойств Al_2O_3 при высоких температурах. Особенностью данной модели является учет изменения оптических свойств при фазовых переходах в толще двуокиси алюминия, что оказывается весьма важным при интерпретации излучательной способности струй продуктов сгорания алюминизированных топлив. Указанная модель включает в себя четыре физических механизма поглощения излучения в толще материала, так что мнимая часть показателя преломления (коэффициент поглощения) представляется в виде

$$\kappa_{\lambda} = \kappa_{\lambda,bb} + \kappa_{\lambda,Ub} + \kappa_{\lambda,ff} + \kappa_{\lambda,la}, \quad (5.19)$$

где $\kappa_{\lambda,bb}$ – коэффициент поглощения, обусловленный переходом электронов из валентной зоны в зону проводимости; $\kappa_{\lambda,Ub}$ – коэффициент поглощения порога Урбаха; $\kappa_{\lambda,ff}$ – коэффициент свободно-свободного поглощения; $\kappa_{\lambda,la}$ – коэффициент решеточного поглощения.

Аппроксимационные формулы для указанных коэффициентов поглощения имеют следующий вид:

$$\kappa_{\lambda,bb} = 2.1 \times 10^{-7} \cdot \lambda^2 \left[T \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{opt}} \right) \right], \quad \lambda \leq \lambda_{opt}, \quad (5.20)$$

$$\kappa_{\lambda,Ub} = 2.5 \times 10^{-2} \cdot \lambda \exp \left[\frac{6800}{T} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{opt}} \right) \right], \quad \lambda > \lambda_{opt}, \quad (5.21)$$

$$\kappa_{\lambda,ff} = \frac{d\lambda}{n \left[1 + \left(\frac{0.95}{\lambda} \right)^2 \right]} \exp \left(- \frac{7194}{T\lambda_g} \right), \quad (5.22)$$

$$\kappa_{\lambda,la} = 7.93 \times 10^{-4} \cdot \lambda \exp \left[- \frac{6.07 \times 10^{-3}}{T} \left(\frac{10^4}{\lambda} - \omega_0 \right)^2 \right] \times \left[1 - \exp \left(- \frac{1.4388 \cdot 1333}{T} \right) \right], \quad (5.23)$$

где n – показатель преломления; T – температура, К; λ_g, λ_{opt} – границы запрещенной зоны, мкм, которые зависят от фазового состояния материала двуокиси алюминия (L – жидкая фаза, α и γ – две фазы твердого состояния):

$$\lambda_g^{(L,\alpha,\gamma)} = \frac{1}{E_0 - fT}, \quad \lambda_{opt}^{(\gamma,\alpha)} = \frac{1}{E_0 - fT + 0.53}.$$

Числовые значения постоянных, входящих в формулы (5.20) – (5.23) даны в табл. 5.1.

Таблица 5.1

Аппроксимирующие коэффициенты оптических свойств различных фазовых состояний

	L – состояние	γ – состояние	α – состояние
E_0 , мкм	5.67	6.25	6.82
f , (мкм·К) $^{-1}$	10^{-3}	1.3×10^{-3}	8.8×10^{-4}
d , мкм $^{-1}$	9.0	3.6	2.4

В заключение заметим, что вопрос о фазовых переходах и оптических свойствах фаз при высоких температурах является одним из наиболее актуальных в современной физической механике многофазных сред.

ГЛАВА 6

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ КОМПЬЮТЕРНЫЙ РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ АТОМНЫХ ЛИНИЙ И ПРОЦЕССОВ ФОТОИОНИЗАЦИИ

Практически все базы данных атомных линий, используемые в настоящее время, ориентированы на задачи астрофизики и спектральной диагностики плазмы. Среди наиболее известных следует назвать базу данных Национального института стандартов США (NIST), которая основана на хорошо известных табличных данных (Wiese W.L., et al., 1966, 1969). Информация о ряде баз данных содержится в интернете.

Среди отечественных баз данных следует, прежде всего, отметить (Зайдель А.Н. и др., 1977; Стриганов А.Р. и др., 1988; Касабов Г.А. и др., 1979).

Главной особенностью указанных баз данных является повышенные требования к точности предсказания местоположения атомных линий и сил осцилляторов, а также к достоверности их идентификации. Первые, и до недавнего времени единственные, две базы данных, ориентированные на решение задач физической механики и теплообмена излучением, были созданы в начале 70-х годов (Авилова И.В. и др., 1970; Каменщиков В.А. и др., 1971). Главным достоинством этих баз данных явилось то, что для специалистов по физической механике были созданы таблицы атомных линий элементов высокотемпературного воздуха, включающие в себя всю необходимую информацию для расчета линейчатого атомного спектра: энергию нижнего квантового уровня, его статистический вес, местоположение атомной линии, ее силу осциллятора и константу, необходимую для расчета уширения линий. Предложенные в этих работах расчетные соотношения дела-

ли процедуру построения линейчатого атомного спектра замкнутой. Тем самым, фактически была решена проблема использования специалистами по физической механике, радиационной газовой и плазмодинамике полной информации об атомных линиях без необходимости решения задач, характерных для квантовой механики и спектроскопии высокого разрешения. Однако недостатком этих баз данных явилось их ограниченность по числу учтенных атомных частиц (N , O , N^+ , O^+ , N^{++} , O^{++}), далеко не полный учет атомных линий и некоторая неопределенность в способе расчета уширения атомных линий. Заметим, что способ расчета уширения атомных линий обычно выносится за пределы информации по атомным линиям, содержащейся во всех базах данных. Причиной этому является то, что уширение определяется не только атомной структурой, но и условиями в плазме. Это с неизбежностью вносит неопределенность в результаты расчетов. Подход, предложенный в работе (Каменщиков В.А. и др., 1971), состоял в том, что на основе предварительного анализа условий в низкотемпературной плазме, типичной для аэрокосмических приложений, были даны рекомендации по расчету штарковского уширения линий.

База данных атомных линий элементов C , C^+ , N , N^+ , O , O^+ , представленная в работе (Surzhikov S.T., 2002 (б)), является развитием подхода, реализованного в работе (Каменщиков В.А. и др., 1971) в следующих направлениях:

- разработана автоматизированная компьютерная процедура расчета параметров атомных линий атомных частиц, для которых справедлива LS-модель векторной связи;
- учтены все известные из экспериментальных исследований уровни энергии атомных частиц, что позволило существенно увеличить номенклатуру учитываемых атомных линий;
- разработана процедура автоматизированного компьютерного построения электронных баз данных атомных линий;
- реализован новый метод расчета радиальных волновых функций атомных частиц в приближении центрального поля.

В данной главе изложен метод формирования указанной базы данных, а также дано описание ее структуры. Однако, как отмечалось выше, более детальный подход к способам расчета спек-

тральных оптических свойств атомных частиц подразумевает необходимость более подробного описания их структуры. Поэтому отдельный раздел данной главы посвящен краткой классификации атомных спектров.

6.1. Строение атомных частиц и классификация их спектров

В данном разделе представлены сведения о строении атомных частиц и классификации их спектров, необходимые для построения численных моделей элементарных радиационных процессов различной сложности. При использовании приближенных полуэмпирических моделей в расчетных кодах, достаточно кратких сведений о классификации атомных спектров и правилах отбора излучательных квантовых переходов. Применение моделей, основанных на расчете волновых функций атомных частиц, требует привлечения более подробной информации по структуре атомных частиц.

6.1.1. Систематика состояний электронов в атомных частицах

В основу классификации состояний электронов в атоме положено приближение *центрального поля*: каждый электрон движется в центрально-симметричном поле, созданном ядром и всеми остальными электронами данной атомной частицы. Представленная классификация основана на работах (Фриш С.Э., 1963; Ельяшевич М.А., 2001; Собельман И.И., 1963; Радциг А.А. и др., 1986).

Состояние электрона в атоме задается следующими четырьмя квантовыми числами:

- n – главное квантовое число;
- l – орбитальное квантовое число;
- m_l – проекция орбитального момента на некоторое выделенное направление;
- m_s – проекция спинового момента электрона на некоторое выделенное направление.

Энергия электрона определяется только первыми двумя квантовыми числами (n и l):

l характеризует орбитальный момент электрона в центрально-симметричном поле;

n задает энергию электрона при заданном l в порядке ее возрастания $n = l + 1, l + 2, l + 3, \dots$.

Состояние электрона с различными n и l обозначают символом, состоящим из цифры и буквы латинского алфавита: цифра задает значение n , буква – значение l , в соответствии с табл. 6.1.

Таблица 6.1

l	Буквенное обозначение
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g
5	h
6	i

Если несколько электронов имеют одинаковые значения n и l , то это обозначается показателем степени в следующем виде: $(nl)^k$. Электроны, имеющие одинаковые квантовые числа n и l называются *эквивалентными*. Например:

- два эквивалентных электрона в состоянии $n = 3, l = 0$ обозначаются $(3s)^2$ или просто $3s^2$;
- семь эквивалентных электрона в состоянии $n = 4, l = 3$ обозначаются $(4f)^7$ или просто $4f^7$.

Наряду с числовым обозначением главного квантового числа, используют буквенное обозначение, представленное в табл. 6.2.

Квантовое число проекции орбитального момента на некоторое выделенное направление может принимать следующие значения $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, 1, \dots, l - 1, l$, полное число которых равно $2l + 1$.

Квантовое число проекции спинового момента электронов на некоторое выделенное направление может принимать только два значения $m_s = +1/2, -1/2$.

Таблица 6.2

n	Буквенное обозначение
1	K
2	L
3	M
4	N
\vdots	\vdots

В соответствии с принципом Паули, с заданными квантовыми числами n и l могут находиться $2(2l+1)$ электронов. Это число называется *вырождением* электронного уровня nl .

6.1.2. Систематика состояний атомных частиц

В приближение центрального поля энергия атомной частицы определяется совокупностью электронных конфигураций всех электронов. Учет различных типов взаимодействий в атомной частице (в первую очередь нецентральных *электростатических межэлектронных взаимодействий* и *спин-орбитальных взаимодействий*), приводящее к расщеплению каждого уровня энергии на систему подуровней, делает невозможной введение единой классификации состояний для всех типов этих взаимодействий.

В задачах физической механики наиболее широко используется систематика состояний атомных частиц, основанная на приближении LS -связи (используются также термины *нормальная связь* или *связь Рассела – Саундерса*), которая хорошо обоснована для легких атомов и не высоковозбужденных состояний. О других типах классификации состояний атомных частиц см. ниже. Уровни энергии атомной частицы в приближении LS -связи обозначаются следующим образом: $^{2S+1}L_J^0$, где левый верхний индекс $(2S+1)$ обозначает мультиплетность уровня; правый верхний индекс – четность уровня (нечетное состояние отмечается нулем: четное состояние – никак не отмечается); правый нижний индекс (J) – квантовое число полного момента электрона.

Например, уровень энергии $^2P_{1/2}^0$ (основное состояние атома Al) означает нечетный уровень энергии с $L=1$, $S=1/2$ и $J=1/2$;

а уровень энергии 1S_0 (основное состояние атома В) означает четный уровень энергии с $L = 0$, $S = 0$ и $J = 0$.

При использовании приближения LS -связи энергетический уровень, задаваемый двумя квантовыми числами L и S , называется *термом*.

В приближении LS -связи каждый уровень энергии с заданными L , S , J вырожден по направлениям вектора \mathbf{J} ; кратность вырождения — $(2J + 1)$. К уровню энергии LS относится всего $(2L + 1)(2S + 1)$ состояний, различающихся значениями проекции полного момента $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ на вырожденное направление, т.е.

$$\sum_J (2J + 1) = (2L + 1)(2S + 1).$$

Типичным для случая LS -связи является то, что разность энергий термов заметно превосходит разность энергий компонентов тонкой структуры каждого из термов.

Наиболее интенсивные электрические дипольные переходы между квантовыми состояниями атомных частиц

$$LSJM \rightarrow L'S'J'M'$$

возможны при выполнении следующих *правил отбора*, получаемых при удовлетворении законов сохранения момента и четности атома:

- а) $\Delta J = J - J' = 0, \pm 1$;
- б) переходы между термами одинаковой четности запрещены;
- в) $\Delta S = S - S' = 0$;
- г) $\Delta L = L - L' = 0, \pm 1$.

Последние два правила (в, г) имеют место только для случая LS -связи.

Одночастичным приближением в описании атомной структуры называется такое описание атома, когда предполагается, что электроны атома движутся независимо друг от друга.

Корреляцией называется модификация одночастичного приближения, состоящая в учете кулоновского отталкивания.

Возбужденным называется такое состояние атома, в котором одно или несколько энергетических состояний оказываются заня-

тыми электронами, при этом имеются не занятые электронами энергетические состояния с меньшей энергией.

При переходе электронов между дискретными энергетическими состояниями атома или иона образуется линейчатый спектр поглощения или испускания.

Если одно из энергетических состояний принадлежит дискретному спектру атома (или иона), а другое – непрерывному (сплошному), то процесс перехода между этими состояниями называется *ионизацией* (переход из дискретного энергетического спектра атома в сплошной) или *рекомбинацией* (переход из сплошного спектра в дискретный). В результате ионизации электрон атома удаляется от него на бесконечность, а вместо атома образуется ион в основном или в возбужденном состоянии.

Если в процессе ионизации в сплошной энергетический спектр перешел электрон из самой наружной из заселенных энергетических подболочек, (подболочки с наименьшей абсолютной величиной энергии), то атом преобразуется в *ион в основном состоянии*.

Если в процессе ионизации в сплошной энергетический спектр перешел электрон (или электроны) из любой подболочки кроме наружной, то образуется *ион в возбужденном состоянии*.

Потенциалом ионизации называется наименьшая энергия, необходимая для удаления электрона из атома на бесконечно большое расстояние.

6.1.3. Приближение центрального поля

Все элементарные радиационные процессы, протекающие с участием атомных частиц, связаны с изменением их энергетического состояния как самосогласованной системы электронов и ядра. Количественное описание атома выполняется с использованием функции, определяемой состоянием всех электронов системы и называемой *волновой функцией*.

Волновая функция атома удовлетворяет следующему уравнению Шредингера:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (6.1)$$

где \hat{H} – оператор энергии – гамильтониан атома; E – собственное значение оператора энергии (энергия атома).

Гамильтониан атома состоит из следующих частей:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{P} + \hat{Q} + \hat{W}, \quad (6.2)$$

где

$$\hat{T} = \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} = -\sum_i \frac{1}{2m} \Delta_i \quad \text{– оператор кинетической энергии электронов;}$$

$$\hat{P} = \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} \quad \text{– оператор потенциальной энергии электронов в поле ядра } Ze/r;$$

$$\hat{Q} = \sum_{i,j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad \text{– оператор электростатического взаимодействия электронов;}$$

\hat{W} – сумма операторов спин-орбитальных и спин-спиновых взаимодействий, а так же, операторов, описывающих релятивистские поправки (приближения Хартри – Фока – Паули); подробный анализ этих операторов дан в работе (Собельман И.И., 1963; Левинсон И.Б. и др., 1962).

В приближении центрального поля полагается, что каждый электрон в многоэлектронном атоме движется в поле ядра и в некотором центрально-симметричном поле $V^0(r)$, экранирующем поле ядра и обусловленном существованием других электронов. Та часть электростатического взаимодействия, которая не может быть описана посредством центрально-симметричного поля, рассматривается как возмущение.

В приближении центрального поля волновая функция электрона, движущегося вокруг ядра, представляется в виде произведения трех волновых функций:

$$\Psi_{nlm_l m_s}(r, \Theta, \varphi, \sigma) = R_{nl}(r) Y_{m_l}^{(l)}(\Theta, \varphi) \chi_{m_s}^{(s)}(\sigma), \quad (6.3)$$

где n, l, s – соответственно главное, орбитальное и спиновое квантовые числа электрона; m_l, m_s – проекции l и s на одну из осей координат (обычно на ось z , относительно которой отсчитывается угол Θ); r, Θ, φ – независимые переменные сферической системы координат; σ – спиновая переменная;

$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} P_{nl}(r)$ – радиальная часть волновой функции электрона; $Y_{m_l}^{(l)}(\Theta, \varphi)$ – угловая часть волновой функции электрона; $\chi_{m_s}^{(s)}(\sigma)$ – спиновая часть волновой функции электрона.

Как следует из (6.3), в приближении центрального поля переменные разделяются, что позволяет получить отдельные уравнения для нахождения радиальной и спин-угловой части волновой функции.

Нулевым приближением центрального поля называется такое приближение, в котором учитывается только кинетическая энергия электронов, а также их потенциальная энергия в поле ядра и в эффективном экранирующем поле, созданном другими электронами и имеющем центральную симметрию. Следовательно, гамильтониан атома приближенно представляется в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{P} + \hat{Q}^0, \quad (6.4)$$

где $\hat{Q}^0 = V^0(r)$.

В центральном поле величина полного момента количества движения всех электронов J и его проекция на некоторое выделенное направление M являются точными интегралами движения. Поэтому каждое состояние атома может быть охарактеризовано двумя точными квантовыми числами J и M .

Для заданного J можно указать $g(J) = 2J + 1$ состояний с разными значениями M : $M = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$. Величина $g(J)$ называется *кратностью вырождения* или *статистическим весом* уровня с данным квантовым числом J .

Точным квантовым числом π состояния является его четность. Если $\pi = +1$, то состояние называется *четным*, если $\pi = -1$, то состояние называется *нечетным*. Четность состояния указывает на поведение волновой функции при инверсии координат (т.е. при изменении знака хотя бы одной радиальной координаты):

$$\Psi = (-r_1, \dots, -r_N) = \pi \Psi(r_1, \dots, r_N).$$

Ниже приводится ряд определений, широко используемых в приближении центрального поля. Набор пар квантовых чисел $n_i l_i$ с указанием числа электронов, имеющих эти квантовые числа, в атомной частице называется его *электронной конфигурацией* (или просто *конфигурацией*, *электронной оболочкой*, *электронным уровнем*).

Конфигурация в общем виде выглядит следующим образом:

$$(n_1 l_1)^{N_1} (n_2 l_2)^{N_2} \dots (n_i l_i)^{N_i} \quad \text{или} \quad n_1 l_1^{N_1} n_2 l_2^{N_2} \dots n_i l_i^{N_i} .$$

Конфигурация, включающая уровень с наименьшей возможной энергией для данного числа электронов (так называемый *основной уровень*), называется *основной конфигурацией*. Все другие конфигурации называются *возбужденными*.

Согласно принципу Паули, максимальное число электронов в оболочке равно $2(2l+1)$. В этом случае оболочка называется *заполненной*.

Полузаполненной оболочкой называется оболочка с $(2l+1)$ электронами. При $N > 2l+1$ оболочка называется *почти заполненной*, при $N < 2l+1$ — *частично заполненной*.

Тонким расщеплением уровней называется зависимость энергии электронных уровней от полного момента электрона $j = l \pm (1/2)$, которое имеет место при учете релятивистских эффектов в модели центрального поля (в данном случае речь идет об эффекте *спин-орбитального взаимодействия*). При этом электроны, обладающие без учета эффектов спин-орбитального взаимодействия одинаковой энергией, приобретают разную энергию в зависимости от j . В этом случае говорят, что для электронов оболочки *снимается вырождение*.

Тонкое расщепление уровня обозначается числовым значением квантового числа j , которое указывается в виде нижнего правого индекса у символического обозначения l (например, $np_{1/2}$, $nd_{5/2}$ и т.п.).

Каждому уровню энергии электрона nl_j соответствует $(2j+1)$ состояний, которые различаются значением проекции его полного момента $m_l = l + m_s$.

При снятии вырождения уровня энергии nl образуется система подуровней, каждый из которых называется *компонентом тонкой структуры уровня nl* .

Совокупность атомных линий, образованных квантовыми переходами между компонентами тонкой структуры двух уровней $nl \rightarrow n'l'$, называется *мультиплетом*, при этом имеется следующее правило отбора по квантовому числу j :

$$\Delta j = j - j' = 0, \pm 1.$$

Полный набор квантовых чисел оболочки обозначается:

$$nl^N \alpha LSJ,$$

где α – дополнительные квантовые числа, необходимые для однозначной идентификации уровня.

Четность оболочки определяется по формуле

$$\pi = (-1)^{\sum_i l_i} = (-1)^{NL}. \quad (6.5)$$

Из приведенной формулы для четности следует, что задание электронной конфигурации полностью определяет ее четность, поэтому квантовое число четности обычно опускается при записи. Однако в компьютерном представлении электронной конфигурации четность оболочки целесообразно сохранять как независимое квантовое число.

Заполненная оболочка является сферически симметричной и имеет лишь одно состояние: 1S_0 .

6.1.4. Векторная модель атома

В векторной модели атома каждому электрону ставится в соответствие определенная величина орбитального (l_i) и спинового (s_i) моментов, а взаимодействие между электронами выражается в виде взаимодействия между этими моментами.

Векторная модель атома основана на приближении центрального поля. В приближении центрального поля гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{P} + \hat{Q}^0 \quad (6.6)$$

не содержит взаимодействия моментов. Поэтому каждое из состояний конфигурации

$$K = (n_1 l_1)^{N_1} \dots (n_m l_m)^{N_m}$$

отличается от другого лишь квантовыми числами $m_i^l m_s^l$ (т.е. различной ориентацией моментов I_i и s_i), но имеет одну и ту же энергию. Все другие типы взаимодействий, кроме указанных в (6.6), в векторной модели атома рассматриваются как возмущения основного состояния.

Без учета возмущающих взаимодействий энергия данного фиксированного состояния атома вычисляется как сумма одноэлектронных энергий:

$$E^0(K) = \sum_i^N \epsilon_i^0 = \sum_i^N N_i \epsilon^0(n_i l_i), \quad (6.7)$$

где N – число электронных оболочек; N_i – число эквивалентных электронов в оболочке; $\epsilon^0(n_i l_i)$ – одноэлектронная энергия.

Выделяются четыре основных типа векторной связи:

1. LS -связь, 3. jK -связь,
2. LK -связь, 4. jj -связь.

В основе данной классификации лежит представление внутриатомных взаимодействий различных типов движений электронов как взаимодействий соответствующих моментов. При взаимодействии моментов устанавливается их определенная взаимная ориентация, наглядно представимая с помощью модели векторного сложения моментов. При этом используются следующие два факта (Собельман И.И., 1963):

1) если два (или более) момента взаимодействуют, то их величины уже не являются точными квантовыми числами. Таковым числом является только суммарный момент;

2) при наличии трех или большего числа моментов очередность их векторного сложения определяется убыванием силы их взаимодействия.

Наиболее часто встречающейся в легких и средних атомах является LS -связь. В этом типе связи сначала векторно складываются моменты орбитального движения электронов

$$L = \sum_i l_i,$$

затем векторно складываются спиновые моменты

$$S = \sum_i s_i$$

и, наконец, векторно складываются полный орбитальный и спиновый моменты

$$J = L + S.$$

Часто встречающимся случаем, характерным для тяжелых атомов, является jj -связь. В этом случае сначала складываются орбитальные и спиновые моменты каждого электрона

$$j_i = l_i + s_i,$$

а затем выполняется сложение

$$J = \sum_i j_i.$$

В модели jj -связи каждый уровень описывается результирующим моментом J и рядом промежуточных моментов:

$$j_1 = (s_1, l_1), j_2 = (s_2, l_2), j_N = (s_N, l_N).$$

Набор промежуточных моментов трактуется как совокупность дополнительных квантовых чисел, различающих уровень J в рассматриваемой конфигурации.

Состояния с заданными значениями моментов j_1, j_2 и J обозначают $(j_1 j_2)_J$, так что $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$.

При заданном j : $l = j \pm (1/2)$. Одно из этих состояний четно, другое – нечетно.

Для спектроскопического обозначения состояния электрона используется следующий символ l_j .

Возможны следующие состояния:

$$\frac{s_1}{2}, \frac{p_1}{2}, \frac{p_3}{2}, \frac{d_3}{2}, \frac{d_5}{2}, \frac{f_5}{2}, \frac{f_7}{2}, \frac{g_7}{2}, \frac{g_9}{2}, \frac{h_9}{2}, \frac{h_{11}}{2},$$

причем состояния s, d, g, \dots – четные, а состояния p, f, \dots – нечетные.

Если полностью пренебречь электростатическим взаимодействием электронов, каждое состояние j получается $(2j+1)$ -кратно вырожденным.

При учете электростатического взаимодействия состояния с заданными значениями j_1, j_2 характеризуются также полным моментом и обозначаются $(j_1 j_2)_J$.

Связи типа LK и jK являются промежуточными между LS - и jj -типами связей. Подробно о способах описания промежуточных типов связей см. работы (Собельман И.И., 1963; Condon E.U., et al., 1963).

6.2. Электронная база данных уровней энергии атомных частиц

База данных параметров энергетических уровней атомных частиц может быть создана на основе квантово-механических расчетов или на основе экспериментальных данных. При формировании базы данных (Surzhikov S.T., 2002 (б)) предпочтение было отдано экспериментальным данным (Moore Ch., 1949, 1952, 1958). Главным преимуществом этих данных является их высокая достоверность, подтвержденная многолетними исследованиями, а также тот факт, что все квантовые эффекты, учитываемые в расчетах путем модификации полного гамильтониана атомной частицы, входят в указанные экспериментальные данные. Так что их можно считать наиболее точными.

Недостатком данной базы данных является ее неполнота. Тем не менее, при необходимости можно восполнить эту базу данных расчетным путем, используя допущение о водородоподобности верхних возбужденных уровней. Что касается экспериментальных данных по уровням энергии ионов высокой кратности

сти, то в этом случае необходимо использовать расчетные квантово-механические методы.

В расчетах параметров атомных линий, представленных в базе данных (Surzhikov S.T., 2002 (б)) использовалась одна главная база данных и несколько локальных и временных баз данных.

6.2.1. Главная база данных уровней энергии атомных частиц

В табл. П.2 (см. приложение) представлена главная база данных уровней энергии для атомов и ионов C, N, O, C⁺, N⁺, O⁺. Как уже отмечалось, эта база данных сформирована на основе работы (Moore Ch., 1949, 1952, 1958). Здесь для каждого компонента мультиплета (строка в таблице) приведены следующие данные:

n' – порядковый номер уровня;

$E(n, l)$ – энергия компонента мультиплета;

J – значение квантового числа полного орбитального момента;

n – главное квантовое число;

l – орбитальное квантовое число;

q – число эквивалентных электронов терма;

$\#S$ – мультиплетность терма $2S + 1$;

L – полное орбитальное квантовое число;

π – признак четности терма;

$\#S''$ – мультиплетность родительского терма;

L'' – полное орбитальное квантовое число родительского терма;

π'' – признак четности родительского терма;

sh – признак смещенности терма.

В конце таблицы приводятся следующие данные о родительских термах:

n – номер родительского терма;

$E(n, l)$ – энергия родительского терма, см⁻¹;

$\#S''$ – мультиплетность родительского терма;

L'' – полное орбитальное квантовое число родительского терма;

π'' – признак четности родительского терма.

Главная база данных параметров уровней энергии атомов и ионов является основным источником информации для расчетов спектральных характеристик поглощения атомов ионов. Эта база

данных не должна изменяться и модифицироваться ни одной программой в процессе расчетов.

В зависимости от назначения вычислительной программы, на основе главной базы создаются локальные базы данных.

6.2.2. Локальная база данных для расчета сечений фотоионизации

Структура этой локальной базы данных подобна структуре главной базы данных, однако в ней содержится информация только о термах.

Энергия j -го терма рассчитывается по формуле

$$E_j = \frac{\sum_{i \in j} E_{ij} (2J_i + 1)}{\sum_{i \in j} (2J_j + 1)}, \quad (6.8)$$

где E_{ij} – энергия i -й компоненты j -го терма; J_i – квантовое число полного момента i -й компоненты.

По результатам расчетов для каждого j -го терма (строка в таблице) формируется следующая локальная база данных (см. табл. П.3 приложения соответственно для атомов С, N, O):

- n' – порядковый номер терма;
- $E(n, l)$ – энергия терма, см^{-1} ;
- g – статистический вес терма;
- n – главное квантовое число;
- l – орбитальное квантовое число;
- q – число эквивалентных электронов;
- $\#S$ – мультиплетность терма $(2S+1)$;
- L – полное орбитальное квантовое число;
- π – признак четности терма;
- $\#S''$ – мультиплетность родительского терма;
- L'' – полное орбитальное квантовое число родительского терма;
- π'' – признак четности родительского терма.

В конце таблицы приводятся следующие данные о родительских термах:

n – номер родительского терма

$E(n, l)$ – энергия родительского терма, см^{-1}

$\#S''$ – мультиплетность родительского терма

L'' – полное орбитальное квантовое число родительского терма

π'' – признак четности родительского терма.

Таблицы главной и локальной баз данных хранятся в виде отдельных файлов, используемых всеми расчетными кодами.

6.3. Расчет параметров атомных линий

Исходными данными для расчета параметров атомных линий является главная база данных энергетических уровней атомов и ионов.

При расчетах параметров атомных линий используются следующие две модели:

1) модель расчета параметров атомных линий без учета мультиплетной структуры;

2) модель расчета параметров атомных линий с учетом мультиплетной структуры.

В соответствии с этими двумя моделями, результатом расчета является создание локальных баз атомных линий, одна из которых содержит параметры мультиплетов, а другая – параметры компонентов мультиплетов. В последнем случае компоненты мультиплетов рассматриваются как самостоятельные атомные линии, поэтому объем этой базы данных значительно превосходит объем базы данных мультиплетов.

Ниже представлены алгоритмы расчетов параметров мультиплетов и их компонентов. Рассматривается расчет параметров линий поглощения, поэтому для каждой линии определяются:

ω_0 – волновое число центра линии,

S – силу линии (или силу осциллятора) в поглощении,

γ – полуширину линии,

g – статистический вес.

Параметры атомных линий испускания определяются с использованием закона Кирхгофа (в приближении ЛТР).

6.3.1. Формирование локальной базы данных термов

Прежде чем производить расчет параметров мультиплетов, необходимо сформировать локальную базу данных параметров термов. С этой целью производится обработка информации из главной базы данных энергетических уровней.

Для каждого терма производится расчет энергии и статистического веса по следующим формулам:

$$E_j = \frac{\sum_{i \in j} E_i (2J_i + 1)}{\sum_{i \in j} (2J_i + 1)}, \quad (6.9)$$

$$g_j = \sum_{i \in j} (2J_i + 1), \quad (6.10)$$

где E_i – энергия i -й компоненты j -го терма; J_i – квантовое число полного момента i -й компоненты j -го терма.

Полученные расчетные значения автоматически заносятся в локальную базу данных термов для каждого атома и иона.

6.3.2. Расчет радиальных интегралов

Радиальные интегралы по волновым функциям комбинирующих квантовых уровней атомных частиц могут быть рассчитаны с использованием различных методов. Простейшим из них является метод Бейтса – Дамгаарда (Bates D.R., et al., 1949), в основу которого положено водородоподобное приближение. Более универсальными являются методы, основанные на модели самосогласованного поля Хартри – Фока (Хартри Д., 1960; Фок В.А., 1976). В данной главе рассмотрен простейший из указанных методов, т.е. метод Бейтса – Дамгаарда (Bates D.R., et al., 1949). Точность этого метода достаточна для решения задач переноса теплового излучения и радиационной газовой динамики.

Если предположить, что при расчете радиального интеграла можно пренебречь отклонением потенциала атома (или иона) от его асимптотической кулоновской формы, тогда точное уравнение для определения радиальной волновой функции R

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[2U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} - E \right] R = 0 \quad (6.11)$$

заменяется следующим приближенным уравнением:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[2 \frac{z}{r} - \frac{z^2}{(n^*)^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \quad (6.12)$$

где U – истинный потенциал системы; E – энергия данного термина; z – остаточный заряд ($z=1$ для атома); n^* – эффективное квантовое число. Здесь использованы атомные единицы, а энергия измеряется в единицах Ry .

Эффективное квантовое число n^* находится по формуле

$$n^* = z / \sqrt{E_n}, \quad (6.13)$$

где E_n – энергия n -го уровня, определенная, например, из экспериментальных данных (Moore Ch., 1949, 1952, 1958).

Решение этого уравнения имеет следующий вид:

$$R(r) = W_{n^*, l + \frac{1}{2}} \left(2 \frac{z}{n^*} r \right), \quad (6.14)$$

где $W_{n^*, l + \frac{1}{2}}$ – функция Уиттекера.

Нормирующий множитель для $R(r)$ дается следующим выражением:

$$N = \frac{1}{\sqrt{(n^*)^2 \Gamma(n^* + l - 1) \Gamma(n^* - l)}}, \quad (6.15)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция.

Величина квадрата одноэлектронного радиального интеграла находится по формуле

$$R^2 = \frac{2l_{\max}}{4l_{\max}^2 - 1} \sigma^2, \quad (6.16)$$

где

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{4l_{\max} - 1}} \int_0^{\infty} R_j R_i r dr. \quad (6.17)$$

Для упрощения вычислений радиального интеграла в работе (Bates D.R., et al., 1949) рассчитаны и табулированы функции $F(n^*, l)$ и $F(n_{i-1}^*, n_i^*, l)$ (см. табл. 2.6).

Расчет радиального интеграла σ производится по следующей формуле:

$$\sigma = \sigma(n_{i-1}^*, l-1; n_i^*, l; z) = \frac{1}{z} F(n^*, l) F(n_{i-1}^*, n_i^*, l). \quad (6.18)$$

Заметим, что расчет радиального интеграла можно также производить без привлечения таблиц Бейтса – Дамгаарда. Уравнение Шредингера с эффективным потенциалом решается с использованием конечно-разностных методов. При этом достигается большая точность и универсальность расчетных данных. Пример численного расчета радиального интеграла σ дан в главе 7.

6.3.3. Сортировка термов по признаку принадлежности спектральной серии

Термы образуют спектральную серию, если при одних и тех же значениях квантовых чисел $l, L, S, \pi, L'', S'', \pi''$ изменяется главное квантовое число n . Отдельную группу термов составляют термы основных (невозбужденных) состояний.

Результатом компьютерного анализа электронной базы данных уровней энергии является сортировка термов по сериям (табл. П.4 приложения).

6.3.4. Расчет признаков атомных линий

Целью данного шага расчетного алгоритма является определение номенклатуры атомных линий, номеров терма нижнего и верхнего энергетического состояния, волнового числа центра линии и энергии нижнего состояния.

Для того чтобы из множества квантовых переходов выбрать те, которые могут привести к образованию спектральных линий,

необходимо воспользоваться правилами отбора. Алгоритмически это реализуется просто: перебирая последовательно все выделенные термы i (начиная с основного состояния), проанализируем последовательно все термы j . Для дипольных одноэлектронных переходов $i \rightarrow j$ возможно образование спектральной линии при выполнении следующих условий:

$$l_j = l_i \pm 1; \quad (6.19)$$

$$n_j > n_i \quad (6.20)$$

(эта проверка фиксирует расчет линий в поглощении);

$$S_j = S_i; \quad (6.21)$$

$$\pi_j \neq \pi_i \quad (6.22)$$

(четность состояния должна изменяться);

$$L_j = L_i, L_j = L_i \pm 1; L_j \neq L_i, \text{ если } L = 0; \quad (6.23)$$

$$S_j'' = S_i''; \quad (6.24)$$

$$L_j'' = L_i''; \quad (6.25)$$

$$\pi_j'' = \pi_i'' . \quad (6.26)$$

Последние три условия соответствуют требованию сохранения родительского терма. Правила отбора (6.24)–(6.26) не надо проверять в том случае, когда один из термов образован конфигурацией эквивалентных электронов. При квантовых переходах из основных состояний атомов и ионов в результате квантовомеханического сложения моментов и спинов оболочки атомного остатка (при бесконечном удалении от остова оптического электрона) могут образовываться ионы как в основном, так и в возбужденном состоянии. Вероятность реализации таких состояний определяется генеалогическими коэффициентами.

При выполнении указанных правил отбора в локальную базу данных параметров атомных линий добавляется очередная линия, при этом фиксируется ее волновое число, энергия и статистиче-

ский вес нижнего уровня. В эту базу данных для каждой линии вводятся дополнительные признаки: признак заполненности или незаполненности внутренней оболочки, признак эквивалентности оптического электрона.

6.3.5. Расчет сил мультиплетов

Сила мультиплета рассчитывается по формуле (Грим Г., 1969; Левинсон И.Б. и др., 1962)

$$S(\alpha SL; \alpha' SL') = s(\alpha SL; \alpha' SL') R^2 (nl; n'l'), \quad (6.27)$$

где s – приведенная сила линии; R^2 – квадрат одноэлектронного радиального интеграла.

При определении приведенной силы мультиплета возможны три расчетных случая:

1) один электрон вне заполненной оболочки:

$$s = 2l_{\max}, \quad l_{\max} = \max \{l, l'\}; \quad (6.28)$$

2) один электрон над незаполненной оболочкой:

$$s = (2S+1)(2L+1)(2L'+1) W^2(l, l', L, L'; 1, L'') \cdot l_{\max}; \quad (6.29)$$

3) $q \neq 1$ эквивалентных электронов над незаполненной оболочкой:

$$s(\alpha SL; \alpha' SL') = (2S+1)(2L+1)(2L'+1) \times \\ \times W^2(l, l', L, L'; 1, L'') \cdot l_{\max} q \left| G_{SL}^{SL'} \right|^2. \quad (6.30)$$

В приведенных формулах $W^2(l, l', L, L'; 1, L'')$ – квадрат коэффициента Ракаха. Значения этих коэффициентов представлены ниже.

Расчетные формулы для факторов Ракаха

$$W^2(l, l+1, L, L-1; 1, L'') = \\ = \frac{(L''+L-l)(L''+L-l-1)(L''-L+l+2)(L''-L+l+1)}{4(2L+1)(2L-1)L(l+1)(2l+1)(2l+3)},$$

$$W^2(l, l+1, L, L; 1, L^*) = \frac{(L^* + L + l + 2)(-L^* + L + l + 1)(L^* - L + l + 1)(L^* + L - l)}{4L(2L+1)(L+1)(l+1)(2l+1)(2l+3)},$$

$$W^2(l, l+1, L, L+1; 1, L^*) = \frac{(L^* + L + l + 3)(L^* + L + l + 2)(-L^* + L + l + 2)(-L^* + L + l + 1)}{4(2L+3)(L+1)(2L+1)(2l+3)(l+1)(2l+1)},$$

$$W^2(l, l, L, L-1; 1, L^*) = \frac{(L^* + L + l + 1)(L^* + L - l)(-L^* + L + l)(L^* - L + l + 1)}{4(2L+1)L(2L-1)l(2l+1)(l+1)},$$

$$W^2(l, l, L, L; 1, L^*) = \frac{[(L+1) + l(l+1) - L^*(L^*+1)]^2}{4(2L+1)L(L+1)(2l+1)l(l+1)},$$

$$W^2(l, l, L, L+1; 1, L^*) = \frac{(L^* + L + l + 2)(L^* - L + l)(L^* + L - l + 1)(-L^* + L + l + 1)}{4(2L+3)(2L+1)(L+1)(2l+1)l(l+1)},$$

$$W^2(l, l-1, L, L-1; 1, L^*) = \frac{(L^* + L + l + 1)(L^* + L + l)(-L^* + L + l)(-L^* + L + l - 1)}{4(2L+1)L(2L-1)(2l+1)l(2l-1)},$$

$$W^2(l, l-1, L, L; 1, L^*) = \frac{(L^* + L + l + 1)(-L^* + L + l)(L^* - L + l)(L^* + L - l + 1)}{4L(2L+1)(L+1)(2l-1)l(2l+1)},$$

$$W^2(l, l-1, L, L+1; 1, L^*) = \frac{(L^* + L - l + 2)(L^* + L - l + 1)(L^* - L + l)(L^* - L + l - 1)}{4(2L+3)(2L+1)(L+1)l(2l-1)(2l+1)}.$$

В случае равенства нулю одного из аргументов следует использовать следующие формулы:

$$W(a, b, c, d; e, 0) = (-1)^{c+b-e} \frac{\delta_{ac} \delta_{bd}}{\sqrt{(2c+1)(2b+1)}},$$

$$W(0, b, c, d; e, f) = \frac{\delta_{eb} \delta_{cf}}{\sqrt{(2e+1)(2f+1)}},$$

$$W(a, 0, c, d; e, f) = \frac{\delta_{ae} \delta_{fd}}{\sqrt{(2e+1)(2f+1)}},$$

$$W(a, b, 0, d; e, f) = \frac{\delta_{de} \delta_{af}}{\sqrt{(2e+1)(2f+1)}},$$

$$W(a, b, c, 0; e, f) = \frac{\delta_{ec} \delta_{fb}}{\sqrt{(2e+1)(2f+1)}},$$

где δ_{ij} – символ Кронекера.

Значения генеалогических коэффициентов определяются исходной и конечной конфигурацией квантового перехода, а также моделью векторной связи атома в исходной и конечной конфигурациях. Для их расчета можно воспользоваться компьютерной программой, приведенной в работе (Зар Р., 1993). Кроме того, для подавляющего числа практически важных случаев генеалогические коэффициенты рассчитаны и табулированы в работах (Грим Г., 1969; Левинсон И.Б. и др., 1962; Собельман И.И., 1963).

1. Переход с уровня p^2 ($l=1, q=2$):

$G_{S^*L^*}^{SL}$	
Исходная конфигурация $p^2 ({}^{2S+1}L)$	Конечная конфигурация $p ({}^{2S^*+1}L^*)$
	2P
1S	1
3P	1
1D	1

2. Переход с уровня p^3 ($l=1, q=3$):

$G_{S'L'}^{SL}$			
Исходная конфигурация $p^3(2S+1L)$	Конечная конфигурация $p^2(2S'+1L')$		
	1S	3P	1D
4S	0	1	0
2P	2/9	1/2	5/18
2D	0	1/2	1/2

3. Переход с уровня p^4 ($l=1, q=4$):

$G_{S'L'}^{SL}$			
Исходная конфигурация $p^4(2S+1L)$	Конечная конфигурация $p^3(2S'+1L')$		
	4S	2P	2D
1S	0	1	0
3P	1/3	1/4	5/12
1D	0	1/4	3/4

4. Переход с уровня p^5 ($l=1, q=5$):

$G_{S'L'}^{SL}$			
Исходная конфигурация $p^5(2S+1L)$	Конечная конфигурация $p^4(2S'+1L')$		
	1S	3P	1D
2P	1/15	3/5	1/3

6.3.6. Расчет приведенной силы линий компонентов мультиплетов

Радиальные интегралы для компонентов мультиплета имеют одинаковые значения. Поэтому для расчета сил линий компонентов мультиплета необходимо учесть специфику расчета лишь приведенной силы линии. Возможны три расчетных случая:

- 1) переход совершает один активный электрон вне заполненной оболочки;
- 2) переход совершает один активный электрон вне незаполненной оболочки;
- 3) переход совершает один электрон из q эквивалентных электронов.

При проверке правил отбора в процессе формирования набора учитываемых линий необходимо делать дополнительную проверку. Компоненты мультиплета могут формироваться только при

$$J_j = J_i, J_j = J_i \pm 1, \quad (6.31)$$

но переход $J_j = J_i$ (при $J_i = 0$) запрещен.

Правила отбора и величины угловых коэффициентов обеспечивают получение приведенной силы мультиплета при суммировании по всем J_i, J_j , участвующим в переходах.

В соответствии с перечисленными расчетными случаями используются следующие соотношения:

- один активный переход вне заполненной оболочки:

$$s(\alpha SLJ; \alpha' SL'J') = 2l_{\max}; \quad (6.32)$$

- один активный переход вне незаполненной оболочки:

$$s(\alpha SLJ; \alpha' SL'J') = (2L+1)(2L'+1)(2J+1)(2J'+1) \times \\ \times W^2(L, L', J, J'; 1, S) W^2(l, l', L, L'; 1, L'') l_{\max}; \quad (6.33)$$

- эквивалентные электроны:

$$s(\alpha SLJ; \alpha' SL'J') = (2L+1)(2L'+1)(2J+1)(2J'+1) \times \\ \times W^2(L, L', J, J'; 1, S) W^2(l, l', L, L'; 1, L'') l_{\max} q \left| G_{S'L'}^{SL} \right|^2. \quad (6.34)$$

6.3.7. Расчет полуширины компонентов мультиплета

Для расчета констант C_4 квадратичного эффекта Штарка, связанного с уширением линий атомов электронами, используются адиабатическое и неадиабатическое приближения (Собельман

И.И., 1963). Критерий перехода от одного приближения к другому имеет вид

$$\beta = 187 \frac{\sqrt{f\Delta E}}{T}, \quad (6.35)$$

где $f = f_{J_i J_j}$ – сила осциллятора перехода между уровнями; $\Delta E = \omega_{J_i J_j}$ – волновое число перехода между уровнями энергии J_i, J_j ; T – температура, К.

Для расчета критерия β необходимо установить связь между силой осциллятора и силой линии:

$$f_{ij} = \frac{4\pi mc}{3\hbar e^2} g_i^{-1} S_{ij} = 3.04 \times 10^{-6} \omega_{ij} \frac{S_{ij}}{g_i}, \quad (6.36)$$

где величина S_{ij} выражена в атомных единицах.

Если $\beta \geq 2$, то справедливо адиабатическое приближение и константы квадратичного эффекта Штарка рассчитываются по следующей формуле:

$$C_{4, \text{атом}}^{J, J'} = \sum_k \frac{S_{J', k}}{g_{J'} \omega_{J', k}} + \sum_k \frac{S_{J, k}}{g_J \omega_{J, k}}. \quad (6.37)$$

Полуширина атомной спектральной линии в этом приближении рассчитывается по формуле

$$\gamma_{\text{атом}}^{J, J'} = 5.16 \times 10^{-9} \left(2.367 \times 10^{-12} \right)^{2/3} C_4^{2/3} T^{1/6} n_e, \text{ см}^{-1}, \quad (6.38)$$

где n_e – числовая концентрация электронов.

Для линий ионов в адиабатическом приближении формулы для расчета константы C_4 и полуширины имеют вид

$$C_{4, \text{ион}}^{J, J'} = \sum_k \frac{S_{J', k}}{g_{J'}} + \sum_k \frac{S_{J, k}}{g_J}, \quad (6.39)$$

$$\gamma_{\text{ион}}^{J, J'} = 1.11 \times 10^{-16} \frac{n_e}{\sqrt{T}} C_{4, \text{ион}}^{J, J'}, \text{ см}^{-1}. \quad (6.40)$$

Если $\beta < 2$, то уширение неадиабатическое, и

$$C_{4, \text{атом}}^{J, J'} = \sum_k \left(\frac{S_{J', k}}{g_{J'} \omega_{J', k}} \right)^{2/3} J(\beta_{J', k}) + \sum_k \left(\frac{S_{J, k}}{g_J \omega_{J, k}} \right)^{2/3} J(\beta_{J, k}). \quad (6.41)$$

Полуширина спектральной атомной линии в этом приближении рассчитывается по формуле

$$\gamma_{\text{атом}}^{J, J'} = 4.57 \times 10^{-17} T^{1/6} n_e C_{4, \text{атом}}^{J, J'}, \text{ см}^{-1}. \quad (6.42)$$

В представленных формулах суммирование ведется по всем компонентам мультиплетного термина, на которые возможен переход с данного уровня. Функция $J(\beta)$ представлена в виде табл. 1.6 (см. главу 1).

В работе (Armstrong В.Н., et al., 1961) использовалось следующая формула для полуширин атомов и ионов, основанная на расчете радиальных интегралов в кулоновском приближении:

$$\gamma^{J, J'} = 5.53 \times 10^{-17} \frac{n_e}{\sqrt{T}} \left(\frac{n^*}{z} \right)^2 \left[1 + 5(n^*)^2 - 3l(l+1) \right], \text{ см}^{-1}, \quad (6.43)$$

где n^* , l – эффективное главное и орбитальное квантовые числа.

Учитывая то, что алгоритмически расчет постоянных уширения и полуширин производится раздельно, формулу для определения полуширины ионной линии в кулоновском приближении представим в следующем виде:

$$\gamma^{J, J'} = 5.53 \times 10^{-17} \frac{n_e}{\sqrt{T}} C_{\text{eff}}, \quad (6.44)$$

где $C_{\text{eff}} = \left(\frac{n^*}{z} \right) \left[1 + 5(n^*)^2 - 3l(l+1) \right]$ – эффективная постоянная уширения ионных линий.

В работе (Wilson К.Н. et al., 1967) высказано сомнение в допустимости использования формулы (6.43) и рекомендовано пользоваться расчетными данными (Грим Г., 1978). Однако в упомянутой книге уширение линий рекомендуется рассчитывать с использованием табличных данных и интерполяции по электронной концентрации, что не всегда является удобным.

6.3.8. Базы данных параметров атомных линий

Результатом расчета параметров атомных и ионных линий является формирование локальной базы данных параметров линий для каждого атома и иона. В табл. П.5 – П.10 приложения представлены такие базы данных для линий C, C⁺, N, N⁺, O, O⁺, с учетом мультиплетной структуры. Строка в таблице соответствует атомной линии. Для каждой линии заданы следующие параметры:

- E – энергия нижнего уровня, см⁻¹;
- ω – волновое число центра линии, см⁻¹;
- g – статистический вес нижнего уровня;
- f – сила осциллятора в поглощении;
- S_4 – константа квадратичного эффекта Штарка;
- A – атомный вес.

Как уже отмечалось, уширение линий ионов рассчитывается в адиабатическом приближении. Для линий атомов целесообразно формировать две базы данных. Одна из них содержит константы уширения рассчитанные в адиабатическом приближении, а другая – в неадиабатическом.

При вычислении параметров атомных линий в программах, предназначенных для построения оптических моделей среды, процедура оценки адиабатичности или неадиабатичности уширения каждой отдельной компоненты мультиплета является чрезмерно трудоемкой. Поэтому необходимо пользоваться заранее рассчитанным набором констант в том или ином приближении. В случае если результаты, даваемые указанными моделями, различаются недопустимо сильно, необходимо изменять алгоритм расчетов.

В представленной базе данных принято, что уширение атомных линий рассчитывается в неадиабатическом приближении, а уширение ионных линий – в адиабатическом.

ГЛАВА 7

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ РАСЧЕТА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГОРЯЧИХ ГАЗОВ

Рассмотренные в предыдущих главах методы расчета спектральных оптических свойств горячих газов относятся к классу простейших полуэмпирических методов. Спектрально-групповые модели, создаваемые с использованием таких методов, отличаются высокой вычислительной эффективностью и вполне удовлетворяют современным требованиям, предъявляемым к задачам физической механики, радиационной газо- и плазмодинамики и теплообмена излучением. Однако усложнение решаемых задач, повышение требований к достоверности, расширение номенклатуры учитываемых химических элементов, возрастающий интерес к процессам неравновесного излучения приводят к необходимости дальнейшего развития методов и моделей компьютерного моделирования. При этом, как уже отмечалось выше, развитие таких моделей должно, с одной стороны, быть адекватным решаемым задачам физической механики, т.е. обладать достаточной простотой и наглядностью, а с другой стороны, учитывать в полной степени достижения компьютерной физики, квантовой механики, квантовой химии и спектроскопии высокого разрешения. Немаловажным является также обеспечение доступа разрабатываемых компьютерных кодов к электронным базам данных, информация о которых публикуется в периодических и электронных научных изданиях, а также содержится в интернете.

И, наконец, одной из наиболее сложных задач развития компьютерных кодов является повышение их универсальности, что позволит, с одной стороны, численно моделировать радиационные

процессы с участием самых разнообразных атомных и молекулярных частиц, а с другой стороны, позволит создать спектральные оптические модели различной сложности.

В данной главе рассматривается ряд методов и моделей, являющихся дальнейшим развитием моделей, представленных в предыдущих главах.

7.1. Численные и аналитические решения уравнения Шредингера для нахождения радиальной части волновой функции

Выше обсуждалось, что использование методов Бейтса – Дамгаарда и квантового дефекта основано на допущении о кулоновской потенциальной энергии атома, а также на полуэмпирическом определении уровней энергии для каждого из рассматриваемого состояния. Указанные предположения позволяют получить аналитическое решение для волновой функции любого энергетического состояния атома, а также для соответствующего радиального интеграла.

Существенно расширить возможности приближенных методов позволяет численное решение уравнения Шредингера для нахождения волновых функций и радиальных интегралов. В этом случае можно последовательно отказаться от допущений о кулоновском характере потенциала, а также от задания экспериментальных значений энергии уровней. На пути последовательного усложнения моделей можно указать следующие этапы:

- а) решение уравнения Шредингера для эффективных потенциалов атомов с заданием эмпирических значений уровней энергии;
- б) решение системы уравнений Хартри – Фока – Слейтера для определения волновых функций в самосогласованном поле и нахождения числовых значений уровней энергии;
- в) решение системы уравнений Хартри – Фока.

Вместе с этим, необходимо иметь в виду, что любое усложнение расчетной модели, приводит к увеличению трудоемкости расчетов, а, следовательно, уменьшает эффективность компьютерных кодов, ориентированных на решение задач физической

механики, радиационной газо- и плазмодинамики и теории переноса теплового излучения.

Известно также, что при попытке построения оптических моделей средних и тяжелых атомов использование приближенных моделей может дать неудовлетворительные результаты и применение усложненных моделей, основанных на методах Хартри – Фока, является необходимым.

Таким образом, важной задачей предварительного анализа аналитических и вычислительных моделей является отыскание оптимальных способов расчета радиационных характеристик, обладающих как можно большим быстродействием и позволяющим получить приемлемые результаты для решаемого класса задач. В следующем разделе рассмотрены простейшие численные методы определения волновых функций для энергетических состояний с заданной энергией.

7.1.1. Аналитическое решение уравнения Шредингера для кулоновского потенциала

Исходное уравнение Шредингера для радиальной волновой функции $R = R(r)$ запишем в следующем виде (Фок В.А., 1976):

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2 z}{r} \right) R = 0, \quad (7.1)$$

где $U(r) = -\frac{e^2 z}{r}$ – кулоновская потенциальная энергия;

$\hbar = \frac{h}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} 6.626 \times 10^{-27}$ эрг·с – постоянная Планка;

$e = 4.8 \times 10^{-10}$ ед. СГСЭ – заряд электрона; $m = 9.11 \times 10^{-28}$ г – масса электрона; l – орбитальное квантовое число.

Для того чтобы обезразмерить уравнение (7.1), введем единицу длины, энергии и скорости:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{ml^2} = 0.529 \times 10^{-8} \text{ см}, \quad E_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a_0} = 27.2 \text{ эВ},$$

$$V_0 = \frac{e^2}{\hbar} = \frac{1}{137} c_0, \quad \text{где } c_0 = 3 \times 10^{10} \text{ см/с} - \text{ скорость света.}$$

В безразмерном виде уравнение Шредингера можно представить так:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[2\varepsilon + \frac{2z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \quad (7.2)$$

где ε – безразмерная энергия.

Если сделать подстановку $R = \frac{1}{\sqrt{r}} y$, то вместо (7.2) получим

$$\frac{d^2 y}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dy}{dr} + \left(2\varepsilon + \frac{2z}{r} - \frac{s^2}{4r^2} \right) y = 0, \quad (7.3)$$

где $s = 2l + 1$.

Дальнейшее преобразование (7.3) выполним для связанных состояний, т.е. $\varepsilon < 0$. Введем новые переменные:

$$x = r\sqrt{-8\varepsilon}, \quad \lambda = \frac{1}{\sqrt{-2\varepsilon}}, \quad r = \frac{x}{\sqrt{-8\varepsilon}}, \quad \varepsilon = -\frac{1}{2\lambda^2},$$

тогда получим

$$-\frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \left(\frac{x}{4} + \frac{s^2}{4x} \right) y = \lambda z y$$

и, наконец, обозначив $\lambda^* = \lambda z$, запишем окончательный вид уравнения:

$$-\frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \left(\frac{x}{4} + \frac{s^2}{4x} \right) y = \lambda^* y. \quad (7.4)$$

Заметим, что уравнение (7.4) соответствует задаче поиска собственных функций и собственных чисел λ^* . Решение (7.4) ищется методом разложения в ряд в следующем порядке, учитывая граничные условия обращения в нуль R при $r = 0$ и асимптотического стремления радиальной волновой функции к нулю при $r \rightarrow \infty$.

1. Сначала задается вид решения при малых x :

$$y = x^\alpha + \alpha x^{\alpha+1} + \dots \quad (7.5)$$

Подставив (7.5) в (7.4) и приравняв коэффициенты при $x^{\alpha+1}$, получим следующее соотношение:

$$\alpha = \pm \frac{s}{2},$$

причем подходит только знак плюс, иначе в центре будет особенность.

2. При больших x полагаем

$$y = e^{-\alpha x} x^\beta \left(1 + \frac{a'}{x} + \dots \right). \quad (7.6)$$

Подставляя (7.6) в (7.4) и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях x , получаем

$$\text{при } \alpha = \frac{1}{2} \quad \beta = -\frac{1}{2} + \lambda^*;$$

$$\text{при } \alpha = -\frac{1}{2} \quad \beta = -\frac{1}{2} - \lambda^*.$$

3. Объединяя два разложения (7.5) и (7.6), получаем

$$y = x^{\frac{s}{2}} e^{-\frac{x}{2}} \left[x^{\lambda^* - \frac{1}{2}} (1 + ax + \dots) \right] = x^{\frac{s}{2}} e^{-\frac{x}{2}} Q(x). \quad (7.7)$$

Относительно $Q(x)$ можно сделать следующие предварительные выводы:

– функция $Q(x)$ должна быть конечна при $x \rightarrow 0$, (7.8)

– функция $Q(x)$ должна быть порядка $x^{\lambda^* - \frac{1}{2} - \frac{s}{2}}$ при $x \rightarrow \infty$. (7.9)

4. Подставив (7.7) в (7.4), найдем

$$x \frac{d^2 Q}{dx^2} + (s+1-x) \frac{dQ}{dx} + \left(\lambda^* - \frac{s+1}{2} \right) Q = 0. \quad (7.10)$$

Это уравнение необходимо решить при условиях, сформулированных выше.

5. Решение (7.10) ищется в виде ряда

$$Q = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n. \quad (7.11)$$

В результате подстановки (7.11) в (7.10) находим, что коэффициенты разложения связаны между собой следующим образом:

$$a_n [n(s+n)] + a_{n-1} \left(\lambda^* + \frac{1}{2} - \frac{s}{2} - n \right) = 0, \quad (7.12)$$

а коэффициент a_0 не определен.

Обозначим

$$F(\alpha, \gamma; x) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \cdot \frac{x}{1} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \cdot \frac{x^2}{1 \cdot 2} + \dots, \quad (7.13)$$

тогда

$$Q(x) = a_0 F\left(\frac{s+1}{2} - \lambda^*, s+1; x\right), \quad (7.14)$$

где $F(\alpha, \gamma; x)$ называется обобщенным гипергеометрическим рядом или *функцией Куммера*.

Важным свойством коэффициентов разложения, которое используется в дальнейшем, является:

$$a_p = \frac{\left(\frac{s+1}{2} - \lambda^*\right) \left(\frac{s+1}{2} - \lambda^* + 1\right) \left(\frac{s+1}{2} - \lambda^* + 2\right) + \dots + \left(\frac{s+1}{2} - \lambda^* + p - 1\right)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot p \cdot (s+1)(s+2) \dots (s+p)}. \quad (7.15)$$

Если предположить, что ряд бесконечен, то легко убедиться в том, что при $x \rightarrow \infty$ получим расходящееся решение. Для того чтобы решение удовлетворяло условию (7.9), потребуем, чтобы, начиная с некоторого номера $(p+1)$, все коэффициенты обращались в нуль, тогда

$$p = -\left(\frac{s+1}{2} - \lambda^*\right), \quad p = 0, 1, 2, \dots \quad (7.16)$$

С учетом (7.7) радиальная волновая функция, отвечающая фиксированному значению p , может быть записана в виде зависимости от функции Куммера

$$y_p(x) = x^{s/2} e^{-x/2} a_0 F(-p, s+1; x), \quad p = 0, 1, 2, \dots \quad (7.17)$$

Формула (7.17) содержит многочлен, который перепишем в виде

$$a_0 F(-p, s+1; x) = c_p Q_p^s(x),$$

где $Q_p^s(x) = \frac{\Gamma(s+p+1)}{\Gamma(s+1)} F(-p, s+1; x)$ – обобщенный полином

Лагерра (Laguerre); Γ – гамма-функция. Удобство такого представления состоит в том, что обобщенные полиномы Лагерра детально исследованы. Подробный анализ этих полиномов применительно к задачам квантовой механики дан в работе (Фок В.А., 1976). Тогда

$$y_p(x) = c_p x^{s/2} e^{-x/2} Q_p^s(x). \quad (7.18)$$

Теперь константу c_p несложно найти из условия нормировки, которое сформулируем в следующем виде:

$$\int_0^{\infty} [y_p(x)]^2 dx = 1. \quad (7.19)$$

Тогда с учетом свойств обобщенных полиномов Лагерра, получим

$$c_p^2 \int_0^{\infty} x^s e^{-x} [Q_p^s(x)]^2 dx = p! \Gamma(s+p+1).$$

Поэтому

$$c_p = \frac{1}{\sqrt{p! \Gamma(s+p+1)}}. \quad (7.20)$$

Поскольку обобщенные полиномы Лагерра являются ортогональными, то условие ортогональности и нормированности волновых функций $y_p(x)$ можно записать в виде

$$\int_0^{\infty} y_p(x) y_{p'}(x) dx = \delta_{pp'}.$$

В дальнейшем будет использоваться следующий вид волновой функции:

$$y_p(x) = \frac{1}{\Gamma(s+1)} \sqrt{\frac{\Gamma(s+p+1)}{p!}} x^{s/2} e^{-x/2} F(-p, s+1; x). \quad (7.21)$$

Функция (7.21) представляет собой точное решение исходного уравнения Шредингера для радиальной волновой функции. При получении этого решения был получен чрезвычайно важный вывод (7.16), означающий фактически введение нового квантового числа $n = p + l + 1 = \lambda_p = 1/\sqrt{-2\varepsilon_p}$.

При обработке численных методов решения уравнений типа (7.11) данное аналитическое решение целесообразно использовать в качестве эталонного. Кроме того, соотношение (7.21) удобно использовать как начальное приближение при решении (7.1) методом установления (см. п. 7.1.2).

Для получения численных решений с использованием точного аналитического решения может быть рекомендован следующий алгоритм.

1. Задаются исходные параметры:

$$s = 2l + 1, \quad \varepsilon = -\frac{1}{2\lambda^2}, \quad p = \lambda^2 - l - 1.$$

2. Рассчитывается Гамма-функция с использованием следующей аппроксимации:

$$\Gamma(x) = \frac{\exp(-Cx)}{x} \prod_{k=1}^N \left[\exp\left(\frac{x}{k}\right) / \left(1 + \frac{x}{k}\right) \right], \quad (7.22)$$

где выбор числа N производится из условия близости множителя в квадратных скобках единице с заданной точностью δ (в расчетах достаточно задать $\delta \sim 10^{-3} \div 10^{-5}$); $C = 0.577$ – постоянная Эйлера.

3. Рассчитывается функция Куммера в виде ряда (7.13).

4. Рассчитывается радиальная волновая функция

$$R(r) = \sqrt{\frac{\Gamma(s+p+1)}{p!}} \frac{1}{\Gamma(s+1)} (-8\epsilon)^{\frac{s}{2}} r^l \times \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2} r \sqrt{-8\epsilon}\right) F\left(-p, s+1; r \sqrt{-8\epsilon}\right). \quad (7.23)$$

7.1.2. Численное решение уравнения Шредингера для произвольного потенциала

Для численного решения уравнения Шредингера и, в более общем случае, уравнений Хартри – Фока, с успехом используется метод Нумерова (Koonin S.E., 1986; Хартри Д., 1960), обладающий 4-м порядком аппроксимации. Этот метод применяется для решения волнового уравнения типа (7.1).

Суть метода Нумерова состоит в том, что вследствие невозможности проинтегрировать это уравнение во всей расчетной области (из-за расходимости решения), уравнения решаются в нескольких областях с использованием дополнительных условий сшивки. Сначала решение ищется от точки $r=0$ до некоторого промежуточного значения r^* . Затем уравнение решается от правой границы расчетной области до этой же точки. Далее решения сшиваются в точке r^* с использованием условия нормировки. Алгоритм такого решения задачи подробно изложен в работе (Koonin S.E., 1986).

В работе (Суржиков С.Т. и др., 2002) показана эффективность использования иного алгоритма решения задачи, основанного на методе установления. В соответствии с этим методом решение исходного дифференциального уравнения, в котором отсутствует зависимость от времени, заменяется решением соответ-

ствующего нестационарного уравнения при асимптотическом стремлении времени к бесконечности. Для этого введем в уравнение (7.1) фиктивное нестационарное слагаемое

$$\frac{\partial R}{\partial t} + \left(\frac{\alpha}{r^2} - \frac{\gamma}{r} - \beta \right) R = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right), \quad (7.24)$$

где $\alpha = l(l+1)$, $\beta = 2\varepsilon = -1/n^2$, $\gamma = 2z$.

Граничные условия для решения (7.24) следующие:

$$r = r_{\min} = 0, R = 0; \quad r = r_{\max} \rightarrow \infty, R = 0.$$

В качестве начальных условий для решения уравнения Шредингера с потенциалом, отличным от кулоновского, следует задавать аналитическое решение вида (7.23). Начальные условия можно задавать также в следующем простейшем виде:

$$R^0(r) = \sin \left[\pi \frac{r_i}{r_{\max}} (n-l) \right].$$

Конечно-разностная схема, аппроксимирующая уравнение (7.24) со вторым порядком точности, находится, например, с использованием интегро-интерполяционного метода

$$a_i R_{i-1}^{p+1} + b_i R_{i+1}^{p+1} - c_i R_i^{p+1} + f_i = 0, \quad (7.25)$$

где

$$a_i = \frac{r_{i-1/2}^2}{p^-} \left(\frac{3}{PQ} \right), \quad b_i = \frac{r_{i+1/2}^2}{p^+} \left(\frac{3}{PQ} \right),$$

$$c_i = \frac{1}{\tau} + \frac{3\alpha}{P} - \frac{3\gamma}{2P} \hat{p} - \beta + a_i + b_i, \quad f_i = \frac{R_i^p}{\tau},$$

$$p^+ = r_{i+1} - r_i, \quad p^- = r_i - r_{i-1},$$

$$P = r_{i+1/2}^2 + r_{i+1/2} r_{i-1/2} + r_{i-1/2}^2, \quad Q = \frac{1}{2} (r_{i+1} - r_{i-1}),$$

$$\hat{p} = 0.5(r_{i-1} + 2r_i + r_{i+1}), \quad r_{i\pm 1/2} = 0.5(r_i + r_{i\pm 1}),$$

где верхний индекс p обозначает временной слой; R_i^p, R_i^{p+1} сеточные значения волновой функции на нижнем и верхнем временных слоях.

Важным элементом данного расчетного метода является задание параметра τ . При выборе этой величины необходимо руководствоваться следующими соображениями. С одной стороны, необходимо удовлетворить условиям устойчивости метода прогонки, используемого при численной реализации (7.25)

$$|c_i| \geq |a_i| + |b_i|. \quad (7.26)$$

С другой стороны, величина τ имеет физическое ограничение снизу. Перепишем коэффициент c_i с использованием исходных параметров уравнения (7.24):

$$c_i = \frac{1}{\tau} + \frac{3l(l+1)}{P} - \frac{3z}{P} \hat{p} + \frac{1}{n^2} + a_i + b_i. \quad (7.27)$$

Отсюда очевидно, что величина τ не может быть существенно меньше n^2 , поскольку в этом случае будет потеряна информация о главном квантовом числе.

После расчета сеточной волновой функции R_i необходимо выполнить условие нормировки.

Для того чтобы можно было сопоставить результаты численного определения радиальной волновой функции с ее представлением в виде обобщенных полиномов Лагерра, необходимо согласовать условия нормировки. Используя связь между u и R , x и r , а также условие (7.19), легко получить

$$\int_0^{\infty} R^2 r dr = \frac{\lambda}{2}.$$

Пример расчета волновой функции дан на рис. 7.1, 7.2. На этих рисунках показаны аналитическое и численное решения, а также начальное приближение в виде синусоиды (последнее начальное условие для волновой функции задавалось в методических целях).

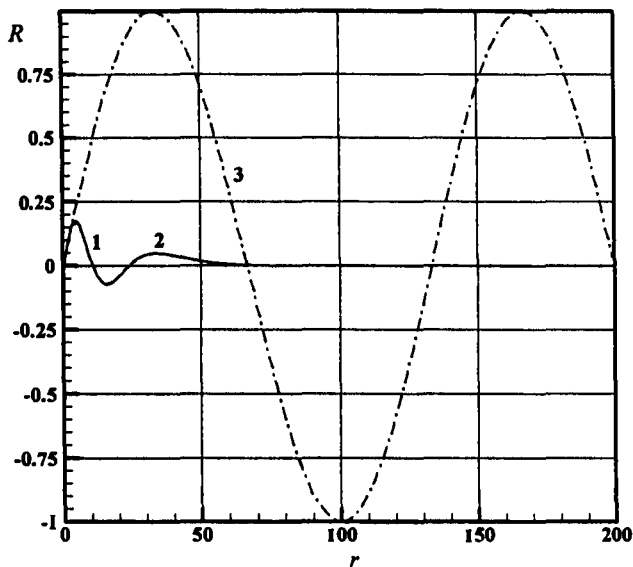


Рис. 7.1. Радиальные волновые функции атома водорода при $n=5$ и $l=2$: 1 и 2 – аналитическое и численное решения, 3 – начальное приближение

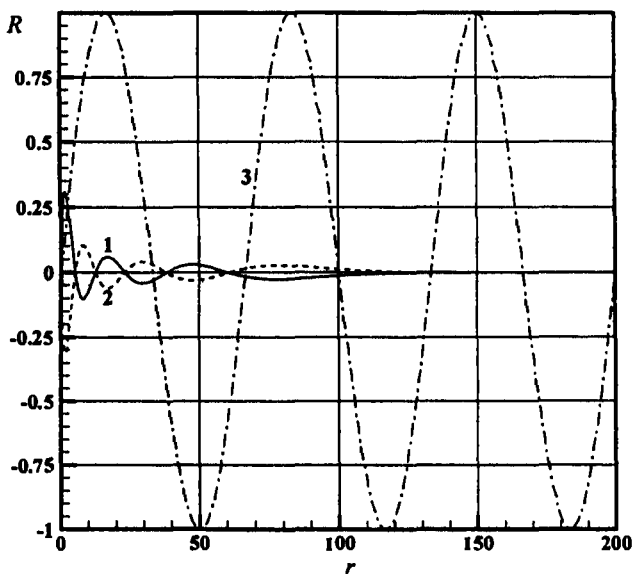


Рис. 7.2. Радиальные волновые функции атома водорода при $n=7$ и $l=1$: 1 и 2 – аналитическое и численное решения, 3 – начальное приближение

После получения волновых функций можно рассчитать радиальный интеграл

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{4l_{\max}^2 - 1}} \int_0^{\infty} R_b(r) R_f(r) r dr, \quad (7.28)$$

где b, f – индексы начального и конечного состояния. Напомним, что величина σ представляется в методе Бейтса и Дамгаарда в виде произведения двух функций

$$\sigma = \sigma(n_{i-1}^*, l-1; n_i^*, l; z) = \frac{1}{z} F(n^*, l) F(n_{i-1}^*, n_i^*, l), \quad (7.29)$$

которые табулированы в работах (Bates D.R., et al., 1949; Левинсон И.Б. и др., 1962), а приведенная сила линии определяется с использованием σ по следующей формуле:

$$s = \frac{2l_{\max}}{(4l_{\max}^2 - 1)} \sigma^2.$$

Таким образом, изложенный метод численного решения уравнения Шредингера позволяет определять квадрат радиальных интегралов дискретных переходов без привлечения табличных данных, а также для любых типов потенциалов.

7.2. Решение уравнения Шредингера для определения волновой функции колебательного состояния двухатомной молекулы методом установления

Метод установления для решения стационарного уравнения Шредингера можно применить также для построения волновых функций колебательных состояний двухатомной молекулы с последующим расчетом факторов Франка – Кондона, для чего необходимо рассчитать интеграл перекрытия двух волновых функций.

Для расчета вероятностей колебательных квантовых переходов в двухатомных молекулах используется следующая вычислительная методика.

1. В качестве исходного берется уравнение Шредингера в следующем виде:

$$\frac{d^2\psi_v}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E_v - U(r)] \psi_v = 0. \quad (7.30)$$

где r – радиальное расстояние между ядрами, см;

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ – приведенная масса молекулы;}$$

$$m_1, m_2 \text{ – массы ядер, г; } \hbar = \frac{1}{2\pi} h = 6.626 \times 10^{-27} \text{ эрг}\cdot\text{с.}$$

Энергия колебательного состояния E_v и потенциальная энергия измеряется в эрг. Введем относительную радиальную координату $y = r/a_0$ и перейдем к измерению энергии в см^{-1}

$$E_{v, \text{эрг}} = E_{v, \text{см}^{-1}} \frac{1.6 \times 10^{-12}}{8067} \text{ эрг/см}^{-1}.$$

Тогда (7.30) примет следующий вид:

$$\frac{d^2\psi_v}{dy^2} + C_0 [E_v - U(r)] \psi_v = 0, \quad (7.31)$$

где $C_0 = 0.166 \cdot M$, M – приведенная масса молекулы в относительных атомных единицах.

2. В качестве примера рассмотрим реализацию расчетного метода для потенциала Морзе

$$U(r) = D_e \left\{ 1 - \exp[-\beta(r - r_e)] \right\}^2, \quad (7.32)$$

$$\text{где } D_e = \frac{\omega_e^2}{4(\omega_e x_e)}, \text{ 1/см; } \beta = 2\pi c_0 \omega_e \sqrt{\frac{m}{2D_e}} = 0.2483 \sqrt{M(\omega_e x_e)}, \text{ \AA}^{-1},$$

$m = M \cdot 1.66 \times 10^{-24}$, г, ω_e , $(\omega_e x_e)$ – фундаментальные спектроскопические константы (Хьюбер К.П. и др., 1984).

3. Уравнение Шредингера для колебательной функции решается методом установления, т.е. вместо (7.31) интегрируется следующее уравнение:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial r^2} + C_0 [E_v - U(r)] P, \quad (7.33)$$

где $\psi_v = P(r, t \rightarrow \infty)$, т.е. волновая функция колебательного состояния v находится как функция, удовлетворяющая уравнению (7.33) при $t \rightarrow \infty$.

Граничные условия

$$r = 0, P = 0; \quad r = r_{\max} \rightarrow \infty, P = 0. \quad (7.34)$$

Начальные условия задаются в следующем виде:

$$\begin{aligned} r < r_1, & \quad P = 0, \\ r_1 \leq r \leq r_2, & \quad P = \sin \left[\pi \frac{r - r_1}{r_2 - r_1} \frac{(v+1)}{2} \right], \\ r > r_2, & \quad P = 0. \end{aligned} \quad (7.35)$$

4. Для решения (7.33) применяется конечно-разностная схема

$$a_i P_{i-1}^{p+1} + b_i P_{i+1}^{p+1} - c_i P_i^{p+1} + \frac{1}{\tau} P_i^p = 0, \quad i = 2, \dots, NI, \quad (7.36)$$

где $a_i = \frac{1}{h^2}$, $b_i = \frac{1}{h^2}$, $c_i = \frac{1}{\tau} + \frac{2}{h^2} + G_i$;

$$G_i = C_0 [U(r_i) - E_v], \quad h = r_{\max} \frac{1}{NI - 1}, \quad \tau = t^{p+1} - t^p;$$

NI – число узлов расчетной сетки; p – индекс временного (итерационного) слоя.

5. С целью удобства вычисления радиального интеграла (фактора Франка – Кондона), который задает вероятность колебательного квантового перехода:

$$q_{vv'} = \int_0^{\infty} P_v(r) P_{v'}(r) r dr$$

расчеты волновых функций $P_v(r)$ проводятся на одинаковых конечно-разностных сетках.

На рис. 7.3 и 7.4 показаны примеры расчета волновых функций двух колебательных состояний электронного перехода молекулы N_2 ($B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$; 1-я положительная система) для двух потенциалов межъядерного взаимодействия.

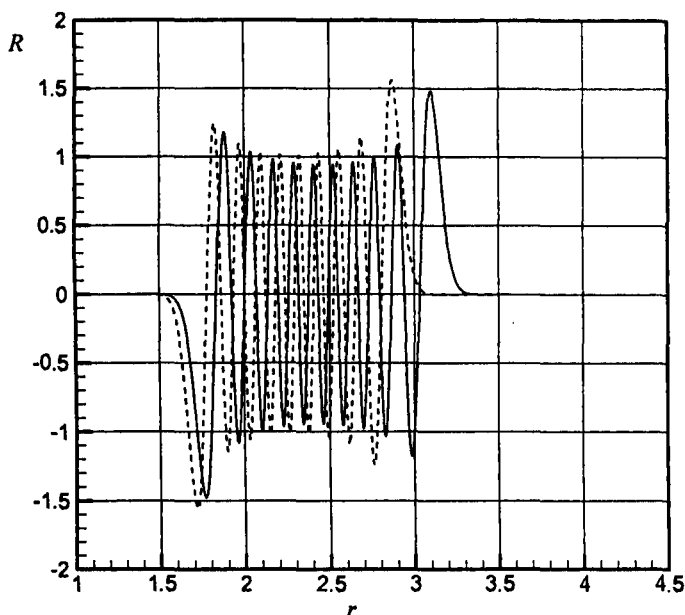


Рис. 7.3. Волновые функции колебательных состояний $v' = 21$ (сплошная кривая) и $v'' = 18$ (штриховая кривая) для гармонического потенциала межъядерного взаимодействия

Представленные расчетные данные иллюстрируют степень влияния потенциала межъядерного взаимодействия на волновые функции колебательных квантовых состояний. Заметим, что приведенные расчетные данные носят лишь иллюстративно-методический характер. Для столь высоких колебательных квантовых чисел использование аналитических потенциалов межъядерного взаимодействия (гармонического и Морзе) является недопустимым (см. п.3.1). Поэтому, чтобы рассчитать вероятности реальных колебательных квантовых переходов (факторы Франка-Кондона), следует воспользоваться РКР-потенциалом межъядерного взаимодействия.

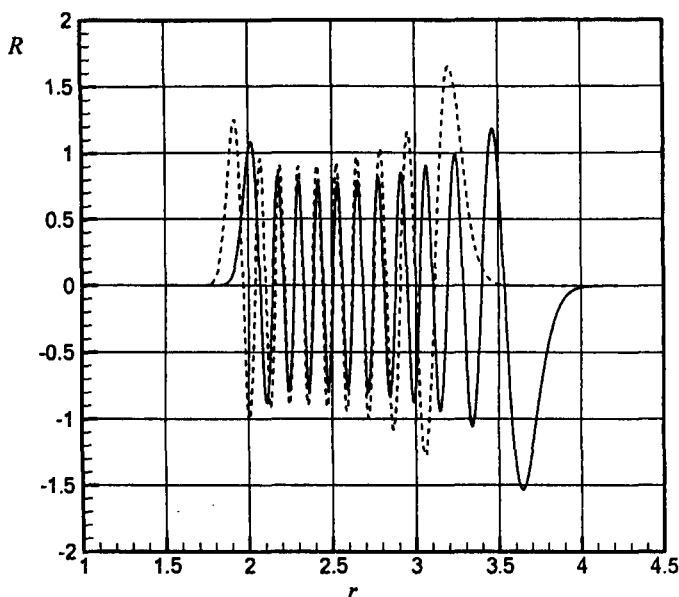


Рис. 7.4. Волновые функции колебательных состояний $v' = 21$ (сплошная кривая) и $v'' = 18$ (штриховая кривая) для потенциала Морзе межъядерного взаимодействия

Представленные волновые функции также наглядно иллюстрируют требование использования одинаковых расчетных сеток для вычисления факторов Франка–Кондона. Если для двух волновых функций применять отдельно построенные неоднородные конечно-разностные сетки, то для разных колебательных квантовых чисел эти расчетные сетки могут сильно различаться, что приведет к большой погрешности численного интегрирования.

Развитие данного метода в части использования неоднородной прогонки дано в работе (Суржигов С.Т. и др., 2000).

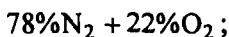
ПРИЛОЖЕНИЕ

Приложение состоит из двух частей. Первая часть содержит таблицы, позволяющие рассчитывать характеристики фотоионизации методом Пич (табл. П.1), а также базу данных уровней энергии атомных частиц (табл. П.2), атомных термов (табл. П.3) и спектральных серий атомных частиц (табл. П.4). Табл. П.5 – П.10 содержат параметры атомных линий С, N, O и ионов C^+ , N^+ , O^+ .

Во второй части приложения приведены графики спектральных коэффициентов поглощения индивидуальных веществ (H, C, N, O) и смесей газов, представляющих интерес для аэрокосмических приложений. Спектральные коэффициенты поглощения индивидуальных веществ даны в двух вариантах: с учетом и без учета атомного линейчатого спектра (рис. П.1 – П.8). Спектральные коэффициенты поглощения смесей газов даны с учетом атомных линий.

Расчеты выполнены для следующих объемных концентраций смесей, давлений и температур.

1. Воздух (рис. П.9 – П.12):

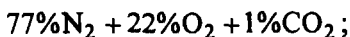


$$p = 0.1, 1.0, 10.0 \text{ атм};$$

$$T = 2000 (2000) 20000 \text{ К}$$

(т.е. от 2000 К до 20000 К с шагом 2000 К).

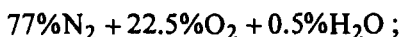
2. Смесь воздуха с углекислым газом (рис. П.13):



$$p = 0.1, 1.0, 10.0 \text{ атм};$$

$$T = 2000 (2000) 20000 \text{ К}.$$

3. Смесь воздуха с парами воды (рис. П.14):



$$p = 0.1, 1.0, 10.0 \text{ атм};$$
$$T = 2000 (2000) 20000 \text{ К.}$$

4. Двуокись углерода (рис. П.15):

$$100\% \text{CO}_2;$$
$$p = 0.01, 0.1, 1.0 \text{ атм};$$
$$T = 2000 (2000) 20000 \text{ К.}$$

5. Смесь углекислого газа с азотом (рис. П.16 – П.18):

$$97\% \text{CO}_2 + 3\% \text{N}_2;$$
$$p = 0.01, 0.1, 1.0 \text{ атм};$$
$$T = 2000 (2000) 20000 \text{ К.}$$

Целесообразность представления обширного графического материала по спектральным коэффициентам поглощения диктуется следующим.

Как уже отмечалось, наиболее актуальной проблемой современной теории радиационных тепловых процессов в приложениях физической механики является построение достоверных и экономичных (с вычислительной точки зрения) спектральных оптических моделей разнообразных смесей газов и плазмы. Прямой и очевидный путь подтверждения достоверности созданных моделей – их сравнение с имеющимися экспериментальными и расчетными данными. Практический опыт работы в этой области показывает, что, к сожалению, достоверность спектральных оптических моделей не отвечает современным требованиям физической механики и аэрофизики. Публикация спектральных оптических моделей подразумевает проведение в дальнейшем детального сопоставления расчетных и экспериментальных данных. Отметим, что если расчеты спектральных коэффициентов поглощения индивидуальных веществ носили, в основном, методический характер, то расчеты спектральных коэффициентов поглощения газовых смесей выполнялись с целью анализа различных практически важных смесей атмосферных газов. В первом случае представлены расчетные данные по спектральным коэффициентам поглощения, которые легко использовать в методических исследованиях. Например, легко выполнить анализ изменения спектра поглощения при нагреве молекулярного газа от относительно низких тем-

ператур до температур практически полной однократной ионизации, а также оценить вклад различных элементарных радиационных процессов в суммарное поглощение горячего газа и низкотемпературной плазмы в полной спектральной области теплового излучения. Во втором случае значительный практический интерес представляет анализ спектра поглощения реальных смесей атмосферных газов. При этом, несмотря на многочисленные предварительные тестирования, автор далек от мысли рекомендовать представленные данные как эталонные. Такая цель может быть поставлена лишь в отдаленной перспективе.

Выбор смесей газов и диапазонов изменения температуры и давления отвечают, в первую очередь, потребностям аэрокосмических приложений. Представленные данные позволяют выполнить анализ влияния указанных параметров и различных примесей в смесях горячих газов и плазмы на их спектральные оптические характеристики, а также интерполировать и даже экстраполировать эти свойства в область пониженных и повышенных давлений. Однако такая экстраполяция должна выполняться с осторожностью, так как значительный выход за пределы рассчитанного интервала давления может привести к ошибкам физического характера, например, связанным с невыполнением условия идеальности газов и плазмы.

Значение спектрально-группового коэффициента поглощения κ_g для промежуточного давления p допустимо определять с помощью логарифмической интерполяции

$$\kappa_g = \exp \left[\ln \kappa_{g,1} + \frac{\ln (p/p_1)}{\ln (p_2/p_1)} \ln \left(\frac{\kappa_{g,2}}{\kappa_{g,1}} \right) \right],$$

где p_1, p_2 – фиксированные давления; κ_1, κ_2 – значения групповых коэффициентов поглощения соответственно при давлениях p_1 и p_2 .

Таблица П.1

Функции, используемые в методе Пич

s-p – переход

n^*	ϵ'	G	χ	n^*	ϵ'	G	χ
0.6	0.0	4.978	0.160	1.0	0.20	3.657	0.094
0.6	0.02	4.976	0.163	1.0	0.30	3.777	0.114
0.6	0.04	4.971	0.167	1.0	0.40	3.895	0.131
0.6	0.06	4.967	0.170	1.0	0.50	4.014	0.146
0.6	0.08	4.963	0.173	1.0	0.60	4.136	0.160
0.6	0.1	4.960	0.177	1.0	0.70	4.252	0.172
0.6	0.15	4.959	0.185	1.0	0.80	4.377	0.184
0.6	0.2	4.962	0.192	1.0	0.90	4.491	0.194
0.6	0.3	4.976	0.206	1.0	1.00	4.602	0.203
0.6	0.4	5.003	0.220	1.2	0.00	2.897	0.012
0.6	0.5	5.036	0.233	1.2	0.02	2.924	0.019
0.6	0.6	5.077	0.244	1.2	0.04	2.951	0.025
0.6	0.7	5.123	0.255	1.2	0.06	2.979	0.032
0.6	0.8	5.174	0.265	1.2	0.08	3.007	0.038
0.6	0.9	5.227	0.275	1.2	0.10	3.036	0.043
0.6	1.0	5.284	0.284	1.2	0.15	3.107	0.057
0.8	0.00	4.118	0.094	1.2	0.20	3.176	0.069
0.8	0.02	4.129	0.098	1.2	0.30	3.312	0.091
0.8	0.04	4.140	0.102	1.2	0.40	3.447	0.110
0.8	0.06	4.151	0.107	1.2	0.50	3.576	0.126
0.8	0.08	4.162	0.111	1.2	0.60	3.701	0.140
0.8	0.10	4.175	0.116	1.2	0.70	3.823	0.153
0.8	0.15	4.208	0.126	1.2	0.80	3.940	0.164
0.8	0.20	4.245	0.135	1.2	0.90	4.054	0.175
0.8	0.30	4.324	0.153	1.2	1.00	4.166	0.184
0.8	0.40	4.410	0.168	1.4	0.00	2.498	-0.008
0.8	0.50	4.500	0.182	1.4	0.02	2.532	0.000
0.8	0.60	4.594	0.196	1.4	0.04	2.565	0.008
0.8	0.70	4.690	0.208	1.4	0.06	2.598	0.015
0.8	0.80	4.787	0.219	1.4	0.08	2.631	0.022
0.8	0.90	4.886	0.230	1.4	0.10	2.663	0.029
0.8	1.00	4.986	0.240	1.4	0.15	2.745	0.045
1.0	0.00	3.436	0.045	1.4	0.20	2.823	0.059
1.0	0.02	3.455	0.050	1.4	0.30	2.972	0.083
1.0	0.04	3.477	0.056	1.4	0.40	3.114	0.103
1.0	0.06	3.498	0.061	1.4	0.50	3.248	0.121
1.0	0.08	3.519	0.066	1.4	0.60	3.374	0.137
1.0	0.10	3.541	0.071	1.4	0.70	3.495	0.150
1.0	0.15	3.599	0.083	1.4	0.80	3.609	0.163

s-p — переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
1.4	0.90	3.719	0.174	2.0	0.30	2.586	0.079
1.4	1.00	3.824	0.184	2.0	0.40	2.783	0.102
1.6	0.00	2.214	-0.021	2.0	0.50	2.964	0.121
1.6	0.02	2.256	-0.011	2.0	0.60	3.137	0.138
1.6	0.04	2.296	-0.002	2.0	0.70	3.300	0.153
1.6	0.06	2.335	0.007	2.0	0.80	3.455	0.166
1.6	0.08	2.374	0.015	2.0	0.90	3.605	0.178
1.6	0.10	2.412	0.023	2.0	1.00	3.743	0.188
1.6	0.15	2.506	0.040	2.2	0.00	1.722	-0.049
1.6	0.20	2.596	0.056	2.2	0.02	1.786	-0.035
1.6	0.30	2.765	0.083	2.2	0.04	1.849	-0.023
1.6	0.40	2.923	0.105	2.2	0.06	1.909	-0.012
1.6	0.50	3.070	0.124	2.2	0.08	1.967	-0.002
1.6	0.60	3.209	0.141	2.2	0.10	2.024	0.007
1.6	0.70	3.341	0.157	2.2	0.15	2.158	0.028
1.6	0.80	3.446	0.170	2.2	0.20	2.282	0.045
1.6	0.90	3.586	0.183	2.2	0.30	2.503	0.075
1.6	1.00	3.701	0.194	2.2	0.40	2.708	0.101
1.8	0.00	2.011	-0.030	2.2	0.50	2.897	0.120
1.8	0.02	2.062	-0.019	2.2	0.60	3.074	0.137
1.8	0.04	2.110	-0.009	2.2	0.70	3.242	0.152
1.8	0.06	2.157	0.001	2.2	0.80	3.400	0.165
1.8	0.08	2.202	0.010	2.2	0.90	3.551	0.177
1.8	0.10	2.248	0.018	2.2	1.00	3.693	0.188
1.8	0.15	2.357	0.038	2.4	0.00	1.601	-0.057
1.8	0.20	2.462	0.054	2.4	0.02	1.672	-0.042
1.8	0.30	2.657	0.083	2.4	0.04	1.739	-0.029
1.8	0.40	2.837	0.106	2.4	0.06	1.803	-0.017
1.8	0.50	3.004	0.126	2.4	0.08	1.865	-0.007
1.8	0.60	3.164	0.143	2.4	0.10	1.926	0.003
1.8	0.70	3.315	0.159	2.4	0.15	2.068	0.025
1.8	0.80	3.459	0.172	2.4	0.20	2.198	0.042
1.8	0.90	3.597	0.185	2.4	0.30	2.438	0.073
1.8	1.00	3.731	0.196	2.4	0.40	2.650	0.100
2.0	0.00	1.855	-0.039	2.4	0.50	2.843	0.119
2.0	0.02	1.913	-0.027	2.4	0.60	3.025	0.136
2.0	0.04	1.970	-0.016	2.4	0.70	3.198	0.151
2.0	0.06	1.024	-0.006	2.4	0.80	3.358	0.164
2.0	0.08	2.077	0.004	2.4	0.90	3.510	0.176
2.0	0.10	2.129	0.013	2.4	1.00	3.652	0.187
2.0	0.15	2.253	0.033	2.6	0.00	1.494	-0.062
2.0	0.20	2.370	0.050	2.6	0.02	1.572	-0.046

s-p – переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
2.6	0.04	1.645	-0.032	3.0	0.70	3.112	0.151
2.6	0.06	1.714	-0.019	3.0	0.80	3.276	0.164
2.6	0.08	1.780	-0.008	3.0	0.90	3.434	0.176
2.6	0.10	1.844	0.002	3.0	1.00	3.578	0.186
2.6	0.15	1.996	0.024	4.0	0.00	1.077	-0.090
2.6	0.20	2.138	0.042	4.0	0.02	1.204	-0.065
2.6	0.30	2.387	0.073	4.0	0.04	1.313	-0.044
2.6	0.40	2.606	0.099	4.0	0.06	1.412	-0.027
2.6	0.50	2.802	0.118	4.0	0.08	1.502	-0.013
2.6	0.60	2.988	0.136	4.0	0.10	1.586	-0.001
2.6	0.70	3.162	0.151	4.0	0.15	1.772	0.023
2.6	0.80	3.324	0.164	4.0	0.20	1.935	0.042
2.6	0.90	3.480	0.176	4.0	0.30	2.214	0.073
2.6	1.00	3.624	0.186	4.0	0.40	2.455	0.098
2.8	0.00	1.407	-0.066	4.0	0.50	2.668	0.118
2.8	0.02	1.493	-0.048	4.0	0.60	2.862	0.135
2.8	0.04	1.572	-0.033	4.0	0.70	3.047	0.151
2.8	0.06	1.648	-0.020	4.0	0.80	3.215	0.164
2.8	0.08	1.720	-0.008	4.0	0.90	3.376	0.176
2.8	0.10	1.789	0.002	4.0	1.00	3.524	0.186
2.8	0.15	1.948	0.024	5.0	0.00	0.911	-0.101
2.8	0.20	2.092	0.042	5.0	0.02	1.070	-0.071
2.8	0.30	2.348	0.073	5.0	0.04	1.200	-0.049
2.8	0.40	2.570	0.098	5.0	0.06	1.312	-0.031
2.8	0.50	2.771	0.118	5.0	0.08	1.412	-0.016
2.8	0.60	2.958	0.135	5.0	0.10	1.504	-0.003
2.8	0.70	3.135	0.151	5.0	0.15	1.704	0.023
2.8	0.80	3.299	0.164	5.0	0.20	1.875	0.042
2.8	0.90	3.455	0.176	5.0	0.30	2.166	0.073
2.8	1.00	3.598	0.186	5.0	0.40	2.413	0.098
3.0	0.00	1.339	-0.068	5.0	0.50	2.631	0.118
3.0	0.02	1.433	-0.050	5.0	0.60	2.828	0.135
3.0	0.04	1.519	-0.034	5.0	0.70	3.016	0.151
3.0	0.06	1.600	-0.021	5.0	0.80	3.186	0.164
3.0	0.08	1.676	-0.009	5.0	0.90	3.349	0.176
3.0	0.10	1.747	0.001	5.0	1.00	3.499	0.186
3.0	0.15	1.910	0.023	6.0	0.00	0.795	-0.108
3.0	0.20	2.056	0.042	6.0	0.02	0.985	-0.074
3.0	0.30	2.314	0.073	6.0	0.04	1.131	-0.051
3.0	0.40	2.542	0.098	6.0	0.06	1.253	-0.033
3.0	0.50	2.745	0.118	6.0	0.08	1.360	-0.018
3.0	0.60	2.932	0.135	6.0	0.10	1.456	-0.004

s-p – переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
6.0	0.15	1.665	0.023	9.0	0.00	0.592	-0.122
6.0	0.20	1.842	0.042	9.0	0.02	0.858	-0.078
6.0	0.30	2.139	0.073	9.0	0.04	1.033	-0.053
6.0	0.40	2.390	0.098	9.0	0.06	1.172	-0.035
6.0	0.50	2.611	0.118	9.0	0.08	1.289	-0.019
6.0	0.60	2.810	0.135	9.0	0.10	1.393	-0.005
6.0	0.70	2.999	0.151	9.0	0.15	1.614	0.023
6.0	0.80	3.171	0.164	9.0	0.20	1.798	0.042
6.0	0.90	3.335	0.176	9.0	0.30	2.104	0.073
6.0	1.00	3.485	0.186	9.0	0.40	2.361	0.098
7.0	0.00	0.710	-0.114	9.0	0.50	2.585	0.118
7.0	0.02	0.928	-0.076	9.0	0.60	2.786	0.135
7.0	0.04	1.086	-0.052	9.0	0.70	2.978	0.151
7.0	0.06	1.215	-0.034	9.0	0.80	3.151	0.164
7.0	0.08	1.327	-0.019	9.0	0.90	3.316	0.176
7.0	0.10	1.426	-0.005	9.0	1.00	3.467	0.186
7.0	0.15	1.641	0.023	10.	0.00	0.549	-0.125
7.0	0.20	1.821	0.042	10.	0.02	0.835	-0.078
7.0	0.30	2.122	0.073	10.	0.04	1.017	-0.053
7.0	0.40	2.376	0.098	10.	0.06	1.159	-0.035
7.0	0.50	2.598	0.118	10.	0.08	1.278	-0.019
7.0	0.60	2.799	0.135	10.	0.10	1.383	-0.005
7.0	0.70	2.989	0.151	10.	0.15	1.606	0.023
7.0	0.80	3.161	0.164	10.	0.20	1.792	0.042
7.0	0.90	3.326	0.176	10.	0.30	2.099	0.073
7.0	1.00	3.476	0.186	10.	0.40	2.356	0.098
8.0	0.00	0.644	-0.118	10.	0.50	2.581	0.118
8.0	0.02	0.887	-0.077	10.	0.60	2.783	0.135
8.0	0.04	1.055	-0.053	10.	0.70	2.974	0.151
8.0	0.06	1.190	-0.035	10.	0.80	3.148	0.164
8.0	0.08	1.305	-0.019	10.	0.90	3.313	0.176
8.0	0.10	1.407	-0.005	10.	1.00	3.464	0.186
8.0	0.15	1.625	0.023	11.	0.00	0.513	-0.128
8.0	0.20	1.808	0.042	11.	0.02	0.818	-0.078
8.0	0.30	2.111	0.073	11.	0.04	1.004	-0.053
8.0	0.40	2.367	0.098	11.	0.06	1.149	-0.035
8.0	0.50	2.590	0.118	11.	0.08	1.270	-0.019
8.0	0.60	2.791	0.135	11.	0.10	1.376	-0.005
8.0	0.70	2.982	0.151	11.	0.15	1.600	0.023
8.0	0.80	3.155	0.164	11.	0.20	1.787	0.042
8.0	0.90	3.320	0.176	11.	0.30	2.095	0.073
8.0	1.00	3.471	0.186	11.	0.40	2.353	0.098

s-p – переход

n^*	ε'	G	χ
11.	0.50	2.578	0.118
11.	0.60	2.780	0.135
11.	0.70	2.972	0.151
11.	0.80	3.145	0.164
11.	0.90	3.311	0.176
11.	1.00	3.462	0.186
12.	0.00	0.480	-0.127
12.	0.02	0.804	-0.078
12.	0.04	0.995	-0.053
12.	0.06	1.141	-0.035
12.	0.08	1.263	-0.019
12.	0.10	1.370	-0.005

n^*	ε'	G	χ
12.	0.15	1.596	0.023
12.	0.20	1.783	0.042
12.	0.30	2.092	0.073
12.	0.40	2.350	0.098
12.	0.50	2.576	0.118
12.	0.60	2.778	0.135
12.	0.70	2.970	0.151
12.	0.80	3.144	0.164
12.	0.90	3.310	0.176
12.	1.00	3.461	0.186

Продолжение табл. П.1

p-s – переход

n^*	ε'	G	χ
0.8	0.00	2.620	-0.347
0.8	0.02	2.638	-0.346
0.8	0.04	2.655	-0.346
0.8	0.06	2.671	-0.346
0.8	0.08	2.687	-0.346
0.8	0.10	2.704	-0.346
0.8	0.15	2.746	-0.346
0.8	0.20	2.789	-0.345
0.8	0.30	2.872	-0.345
0.8	0.40	2.957	-0.346
0.8	0.50	3.042	-0.346
0.8	0.60	3.127	-0.347
0.8	0.70	3.213	-0.348
0.8	0.80	3.299	-0.349
0.8	0.90	3.385	-0.350
0.8	1.00	3.472	-0.351
1.0	0.00	1.975	-0.349
1.0	0.02	1.994	-0.350
1.0	0.04	2.012	-0.350
1.0	0.06	2.028	-0.350
1.0	0.08	2.044	-0.351
1.0	0.10	2.060	-0.351
1.0	0.15	2.101	-0.352

n^*	ε'	G	χ
1.0	0.20	2.142	-0.354
1.0	0.30	2.222	-0.357
1.0	0.40	2.300	-0.361
1.0	0.50	2.377	-0.366
1.0	0.60	2.453	-0.370
1.0	0.70	2.528	-0.375
1.0	0.80	2.603	-0.380
1.0	0.90	2.677	-0.385
1.0	1.00	2.750	-0.391
1.2	0.00	0.704	-0.337
1.2	0.02	0.712	-0.338
1.2	0.04	0.719	-0.339
1.2	0.06	0.726	-0.339
1.2	0.08	0.733	-0.340
1.2	0.10	0.740	-0.341
1.2	0.15	0.756	-0.343
1.2	0.20	0.772	-0.346
1.2	0.30	0.803	-0.352
1.2	0.40	0.831	-0.358
1.2	0.50	0.857	-0.365
1.2	0.60	0.882	-0.373
1.2	0.70	0.906	-0.381
1.2	0.80	0.929	-0.389

p-s – переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
1.2	0.90	0.951	-0.397	1.8	0.30	1.091	-0.318
1.2	1.00	0.971	-0.405	1.8	0.40	1.131	-0.324
1.4	0.00	0.834	-0.325	1.8	0.50	1.162	-0.329
1.4	0.02	0.844	-0.326	1.8	0.60	1.187	-0.335
1.4	0.04	0.854	-0.327	1.8	0.70	1.206	-0.341
1.4	0.06	0.864	-0.327	1.8	0.80	1.219	-0.346
1.4	0.08	0.874	-0.328	1.8	0.90	1.229	-0.351
1.4	0.10	0.884	-0.329	1.8	1.00	1.235	-0.356
1.4	0.15	0.906	-0.332	2.0	0.00	0.893	-0.297
1.4	0.20	0.927	-0.335	2.0	0.02	0.915	-0.297
1.4	0.30	0.965	-0.342	2.0	0.04	0.939	-0.298
1.4	0.40	0.997	-0.350	2.0	0.06	0.957	-0.298
1.4	0.50	1.026	-0.359	2.0	0.08	0.977	-0.299
1.4	0.60	1.051	-0.368	2.0	0.10	0.996	-0.300
1.4	0.70	1.072	-0.377	2.0	0.15	1.040	-0.303
1.4	0.80	1.091	-0.386	2.0	0.20	1.078	-0.306
1.4	0.90	1.108	-0.396	2.0	0.30	1.140	-0.312
1.4	1.00	1.122	-0.406	2.0	0.40	1.191	-0.318
1.6	0.00	0.879	-0.314	2.0	0.50	1.235	-0.324
1.6	0.02	0.893	-0.314	2.0	0.60	1.269	-0.329
1.6	0.04	0.906	-0.315	2.0	0.70	1.301	-0.334
1.6	0.06	0.919	-0.316	2.0	0.80	1.330	-0.339
1.6	0.08	0.931	-0.317	2.0	0.90	1.352	-0.343
1.6	0.10	0.943	-0.317	2.0	1.00	1.381	-0.348
1.6	0.15	0.971	-0.320	2.2	0.00	0.882	-0.290
1.6	0.20	0.996	-0.323	2.2	0.02	0.910	-0.291
1.6	0.30	1.037	-0.330	2.2	0.04	0.936	-0.292
1.6	0.40	1.071	-0.337	2.2	0.06	0.960	-0.293
1.6	0.50	1.098	-0.345	2.2	0.08	0.983	-0.294
1.6	0.60	1.118	-0.353	2.2	0.10	1.004	-0.295
1.6	0.70	1.133	-0.361	2.2	0.15	1.048	-0.299
1.6	0.80	1.145	-0.369	2.2	0.20	1.094	-0.302
1.6	0.90	1.152	-0.377	2.2	0.30	1.167	-0.311
1.6	1.00	1.156	-0.386	2.2	0.40	1.224	-0.317
1.8	0.00	0.892	-0.304	2.2	0.50	1.268	-0.323
1.8	0.02	0.911	-0.305	2.2	0.60	1.306	-0.328
1.8	0.04	0.929	-0.305	2.2	0.70	1.338	-0.333
1.8	0.06	0.945	-0.306	2.2	0.80	1.367	-0.338
1.8	0.08	0.961	-0.306	2.2	0.90	1.394	-0.342
1.8	0.10	0.976	-0.307	2.2	1.00	1.425	-0.347
1.8	0.15	1.010	-0.309	2.4	0.00	0.869	-0.286
1.8	0.20	1.041	-0.312	2.4	0.02	0.900	-0.287

p-s - переход

n^*	ϵ'	G	χ	n^*	ϵ'	G	χ
2.4	0.04	0.929	-0.288	2.8	0.70	1.406	-0.331
2.4	0.06	0.956	-0.289	2.8	0.80	1.436	-0.336
2.4	0.08	0.981	-0.291	2.8	0.90	1.465	-0.341
2.4	0.10	1.005	-0.292	2.8	1.00	1.487	-0.345
2.4	0.15	1.054	-0.296	3.0	0.00	0.805	-0.272
2.4	0.20	1.106	-0.299	3.0	0.02	0.849	-0.272
2.4	0.30	1.184	-0.310	3.0	0.04	0.888	-0.273
2.4	0.40	1.248	-0.316	3.0	0.06	0.925	-0.275
2.4	0.50	1.295	-0.322	3.0	0.08	0.957	-0.277
2.4	0.60	1.334	-0.327	3.0	0.10	0.991	-0.280
2.4	0.70	1.366	-0.332	3.0	0.15	1.063	-0.287
2.4	0.80	1.392	-0.337	3.0	0.20	1.126	-0.294
2.4	0.90	1.423	-0.342	3.0	0.30	1.229	-0.306
2.4	1.00	1.447	-0.346	3.0	0.40	1.297	-0.314
2.6	0.00	0.849	-0.283	3.0	0.50	1.345	-0.320
2.6	0.02	0.885	-0.283	3.0	0.60	1.387	-0.326
2.6	0.04	0.917	-0.284	3.0	0.70	1.420	-0.331
2.6	0.06	0.946	-0.285	3.0	0.80	1.450	-0.336
2.6	0.08	0.973	-0.287	3.0	0.90	1.480	-0.341
2.6	0.10	0.999	-0.289	3.0	1.00	1.501	-0.345
2.6	0.15	1.058	-0.293	4.0	0.00	0.730	-0.262
2.6	0.20	1.115	-0.297	4.0	0.02	0.799	-0.263
2.6	0.30	1.206	-0.308	4.0	0.04	0.856	-0.265
2.6	0.40	1.267	-0.315	4.0	0.06	0.905	-0.268
2.6	0.50	1.316	-0.321	4.0	0.08	0.952	-0.272
2.6	0.60	1.355	-0.326	4.0	0.10	0.990	-0.275
2.6	0.70	1.387	-0.331	4.0	0.15	1.078	-0.284
2.6	0.80	1.418	-0.336	4.0	0.20	1.147	-0.291
2.6	0.90	1.447	-0.341	4.0	0.30	1.254	-0.303
2.6	1.00	1.469	-0.345	4.0	0.40	1.330	-0.312
2.8	0.00	0.825	-0.278	4.0	0.50	1.385	-0.319
2.8	0.02	0.866	-0.278	4.0	0.60	1.428	-0.325
2.8	0.04	0.901	-0.279	4.0	0.70	1.468	-0.331
2.8	0.06	0.934	-0.280	4.0	0.80	1.499	-0.336
2.8	0.08	0.963	-0.282	4.0	0.90	1.529	-0.341
2.8	0.10	0.991	-0.285	4.0	1.00	1.550	-0.345
2.8	0.15	1.061	-0.290	5.0	0.00	0.654	-0.250
2.8	0.20	1.122	-0.295	5.0	0.02	0.747	-0.252
2.8	0.30	1.218	-0.307	5.0	0.04	0.819	-0.256
2.8	0.40	1.283	-0.315	5.0	0.06	0.878	-0.260
2.8	0.50	1.332	-0.321	5.0	0.08	0.927	-0.264
2.8	0.60	1.372	-0.326	5.0	0.10	0.975	-0.269

p-s – переход

n'	ε'	G	χ	n'	ε'	G	χ
5.0	0.15	1.070	-0.279	8.0	0.00	0.510	-0.230
5.0	0.20	1.148	-0.288	8.0	0.02	0.667	-0.236
5.0	0.30	1.256	-0.300	8.0	0.04	0.765	-0.243
5.0	0.40	1.344	-0.311	8.0	0.06	0.838	-0.249
5.0	0.50	1.407	-0.319	8.0	0.08	0.896	-0.254
5.0	0.60	1.450	-0.325	8.0	0.10	0.952	-0.261
5.0	0.70	1.491	-0.331	8.0	0.15	1.054	-0.272
5.0	0.80	1.522	-0.336	8.0	0.20	1.137	-0.282
5.0	0.90	1.552	-0.341	8.0	0.30	1.255	-0.296
5.0	1.00	1.573	-0.345	8.0	0.40	1.348	-0.308
6.0	0.00	0.597	-0.242	8.0	0.50	1.423	-0.318
6.0	0.02	0.712	-0.245	8.0	0.60	1.474	-0.325
6.0	0.04	0.794	-0.250	8.0	0.70	1.515	-0.331
6.0	0.06	0.860	-0.255	8.0	0.80	1.546	-0.336
6.0	0.08	0.915	-0.260	8.0	0.90	1.577	-0.341
6.0	0.10	0.964	-0.265	8.0	1.00	1.598	-0.345
6.0	0.15	1.064	-0.276	9.0	0.00	0.478	-0.226
6.0	0.20	1.143	-0.285	9.0	0.02	0.653	-0.233
6.0	0.30	1.261	-0.299	9.0	0.04	0.757	-0.241
6.0	0.40	1.349	-0.310	9.0	0.06	0.831	-0.247
6.0	0.50	1.412	-0.318	9.0	0.08	0.890	-0.252
6.0	0.60	1.462	-0.325	9.0	0.10	0.946	-0.259
6.0	0.70	1.503	-0.331	9.0	0.15	1.048	-0.270
6.0	0.80	1.534	-0.336	9.0	0.20	1.140	-0.282
6.0	0.90	1.565	-0.341	9.0	0.30	1.258	-0.296
6.0	1.00	1.586	-0.345	9.0	0.40	1.351	-0.308
7.0	0.00	0.549	-0.235	9.0	0.50	1.426	-0.318
7.0	0.02	0.686	-0.240	9.0	0.60	1.478	-0.325
7.0	0.04	0.778	-0.246	9.0	0.70	1.519	-0.331
7.0	0.06	0.848	-0.252	9.0	0.80	1.550	-0.336
7.0	0.08	0.905	-0.257	9.0	0.90	1.580	-0.341
7.0	0.10	0.958	-0.263	9.0	1.00	1.602	-0.345
7.0	0.15	1.060	-0.274	10.	0.00	0.450	-0.222
7.0	0.20	1.143	-0.284	10.	0.02	0.640	-0.230
7.0	0.30	1.257	-0.297	10.	0.04	0.749	-0.239
7.0	0.40	1.350	-0.309	10.	0.06	0.827	-0.246
7.0	0.50	1.419	-0.318	10.	0.08	0.887	-0.251
7.0	0.60	1.470	-0.325	10.	0.10	0.943	-0.258
7.0	0.70	1.510	-0.331	10.	0.15	1.049	-0.270
7.0	0.80	1.542	-0.336	10.	0.20	1.137	-0.281
7.0	0.90	1.572	-0.341	10.	0.30	1.255	-0.295
7.0	1.00	1.593	-0.345	10.	0.40	1.353	-0.308

p-s - переход

n^*	ϵ'	G	χ	n^*	ϵ'	G	χ
10.	0.50	1.429	-0.318	11.	0.90	1.584	-0.341
10.	0.60	1.480	-0.325	11.	1.00	1.606	-0.345
10.	0.70	1.521	-0.331	12.	0.00	0.401	-0.213
10.	0.80	1.552	-0.336	12.	0.02	0.627	-0.228
10.	0.90	1.583	-0.341	12.	0.04	0.741	-0.237
10.	1.00	1.604	-0.345	12.	0.06	0.820	-0.244
11.	0.00	0.426	-0.219	12.	0.08	0.880	-0.249
11.	0.02	0.633	-0.229	12.	0.10	0.937	-0.256
11.	0.04	0.745	-0.238	12.	0.15	1.043	-0.268
11.	0.06	0.824	-0.245	12.	0.20	1.134	-0.280
11.	0.08	0.883	-0.250	12.	0.30	1.257	-0.295
11.	0.10	0.940	-0.257	12.	0.40	1.350	-0.307
11.	0.15	1.046	-0.269	12.	0.50	1.425	-0.317
11.	0.20	1.134	-0.280	12.	0.60	1.483	-0.325
11.	0.30	1.256	-0.295	12.	0.70	1.524	-0.331
11.	0.40	1.355	-0.308	12.	0.80	1.555	-0.336
11.	0.50	1.430	-0.318	12.	0.90	1.586	-0.341
11.	0.60	1.482	-0.325	12.	1.00	1.607	-0.345
11.	0.70	1.523	-0.331				
11.	0.80	1.554	-0.336				

Продолжение табл. П.1

p-d - переход

n^*	ϵ'	G	χ	n^*	ϵ'	G	χ
0.8	0.00	8.612	0.787	0.8	1.00	8.701	0.997
0.8	0.02	8.466	0.792	1.0	0.00	7.837	0.635
0.8	0.04	8.339	0.798	1.0	0.02	7.779	0.643
0.8	0.06	8.233	0.804	1.0	0.04	7.735	0.651
0.8	0.08	8.144	0.809	1.0	0.06	7.706	0.659
0.8	0.10	8.069	0.815	1.0	0.08	7.689	0.666
0.8	0.15	7.926	0.828	1.0	0.10	7.684	0.673
0.8	0.20	7.828	0.841	1.0	0.15	7.702	0.689
0.8	0.30	7.743	0.865	1.0	0.20	7.750	0.705
0.8	0.40	7.752	0.888	1.0	0.30	7.923	0.733
0.8	0.50	7.821	0.909	1.0	0.40	8.163	0.759
0.8	0.60	7.940	0.928	1.0	0.50	8.446	0.782
0.8	0.70	8.091	0.947	1.0	0.60	8.766	0.803
0.8	0.80	8.271	0.965	1.0	0.70	9.111	0.822
0.8	0.90	8.476	0.981	1.0	0.80	9.479	0.840

p-d - переход

n^*	ϵ'	G	χ	n^*	ϵ'	G	χ
1.0	0.90	9.867	0.856	1.6	0.30	4.356	0.398
1.0	1.00	10.27	0.871	1.6	0.40	4.728	0.421
1.2	0.00	3.006	0.498	1.6	0.50	5.107	0.442
1.2	0.02	3.013	0.508	1.6	0.60	5.479	0.456
1.2	0.04	3.023	0.518	1.6	0.70	5.856	0.470
1.2	0.06	3.038	0.527	1.6	0.80	6.235	0.482
1.2	0.08	3.057	0.535	1.6	0.90	6.614	0.492
1.2	0.10	3.079	0.543	1.6	1.00	6.993	0.501
1.2	0.15	3.144	0.562	1.8	0.00	2.870	0.203
1.2	0.20	3.218	0.579	1.8	0.02	2.937	0.217
1.2	0.30	3.386	0.610	1.8	0.04	3.006	0.230
1.2	0.40	3.575	0.636	1.8	0.06	3.075	0.241
1.2	0.50	3.759	0.663	1.8	0.08	3.145	0.251
1.2	0.60	3.986	0.680	1.8	0.10	3.214	0.261
1.2	0.70	4.205	0.699	1.8	0.15	3.386	0.281
1.2	0.80	4.431	0.715	1.8	0.20	3.557	0.298
1.2	0.90	4.663	0.730	1.8	0.30	3.891	0.325
1.2	1.00	4.901	0.744	1.8	0.40	4.216	0.346
1.4	0.00	3.465	0.377	1.8	0.50	4.543	0.363
1.4	0.02	3.503	0.389	1.8	0.60	4.846	0.375
1.4	0.04	3.544	0.400	1.8	0.70	5.151	0.386
1.4	0.06	3.590	0.410	1.8	0.80	5.452	0.395
1.4	0.08	3.639	0.419	1.8	0.90	5.746	0.403
1.4	0.10	3.691	0.428	1.8	1.00	6.035	0.410
1.4	0.15	3.829	0.448	2.0	0.00	2.426	0.160
1.4	0.20	3.974	0.466	2.0	0.02	2.489	0.176
1.4	0.30	4.280	0.497	2.0	0.04	2.550	0.190
1.4	0.40	4.600	0.522	2.0	0.06	2.612	0.203
1.4	0.50	4.923	0.546	2.0	0.08	2.675	0.215
1.4	0.60	5.267	0.562	2.0	0.10	2.730	0.225
1.4	0.70	5.610	0.579	2.0	0.15	2.875	0.248
1.4	0.80	5.959	0.594	2.0	0.20	3.004	0.266
1.4	0.90	6.313	0.607	2.0	0.30	3.251	0.295
1.4	1.00	6.670	0.618	2.0	0.40	3.479	0.317
1.6	0.00	3.300	0.277	2.0	0.50	3.468	0.334
1.6	0.02	3.360	0.289	2.0	0.60	3.855	0.347
1.6	0.04	3.424	0.301	2.0	0.70	4.044	0.359
1.6	0.06	3.490	0.312	2.0	0.80	4.189	0.368
1.6	0.08	3.558	0.322	2.0	0.90	4.365	0.377
1.6	0.10	3.628	0.331	2.0	1.00	4.504	0.384
1.6	0.15	3.806	0.351	2.2	0.00	2.117	0.142
1.6	0.20	3.988	0.369	2.2	0.02	2.182	0.162

p-d - переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
2.2	0.04	2.245	0.179	2.6	0.70	4.477	0.417
2.2	0.06	2.306	0.195	2.6	0.80	4.810	0.435
2.2	0.08	2.365	0.209	2.6	0.90	5.153	0.450
2.2	0.10	2.421	0.222	2.6	1.00	5.494	0.462
2.2	0.15	2.552	0.250	2.8	0.00	1.753	0.095
2.2	0.20	2.670	0.274	2.8	0.02	1.865	0.122
2.2	0.30	2.879	0.312	2.8	0.04	1.974	0.145
2.2	0.40	3.063	0.342	2.8	0.06	2.078	0.164
2.2	0.50	3.226	0.368	2.8	0.08	2.178	0.180
2.2	0.60	3.380	0.390	2.8	0.10	2.273	0.195
2.2	0.70	3.511	0.409	2.8	0.15	2.492	0.225
2.2	0.80	3.629	0.428	2.8	0.20	2.693	0.250
2.2	0.90	3.740	0.445	2.8	0.30	3.082	0.290
2.2	1.00	3.845	0.461	2.8	0.40	3.456	0.317
2.4	0.00	1.955	0.131	2.8	0.50	3.792	0.337
2.4	0.02	2.036	0.155	2.8	0.60	4.086	0.353
2.4	0.04	2.113	0.176	2.8	0.70	4.388	0.369
2.4	0.06	2.188	0.194	2.8	0.80	4.712	0.383
2.4	0.08	2.261	0.211	2.8	0.90	5.039	0.394
2.4	0.10	2.333	0.226	2.8	1.00	5.341	0.401
2.4	0.15	2.501	0.258	3.0	0.00	1.633	0.077
2.4	0.20	2.654	0.286	3.0	0.02	1.752	0.106
2.4	0.30	2.938	0.331	3.0	0.04	1.859	0.129
2.4	0.40	3.211	0.367	3.0	0.06	1.958	0.148
2.4	0.50	3.466	0.397	3.0	0.08	2.049	0.164
2.4	0.60	3.723	0.422	3.0	0.10	2.138	0.179
2.4	0.70	3.963	0.445	3.0	0.15	2.336	0.209
2.4	0.80	4.201	0.467	3.0	0.20	2.530	0.235
2.4	0.90	4.446	0.487	3.0	0.30	2.882	0.274
2.4	1.00	4.697	0.504	3.0	0.40	3.154	0.299
2.6	0.00	1.857	0.115	3.0	0.50	3.390	0.318
2.6	0.02	1.956	0.141	3.0	0.60	3.598	0.333
2.6	0.04	2.053	0.163	3.0	0.70	3.847	0.348
2.6	0.06	2.147	0.183	3.0	0.80	4.071	0.360
2.6	0.08	2.240	0.200	3.0	0.90	4.278	0.370
2.6	0.10	2.329	0.215	3.0	1.00	4.419	0.377
2.6	0.15	2.540	0.247	4.0	0.00	1.259	0.029
2.6	0.20	2.735	0.274	4.0	0.02	1.417	0.069
2.6	0.30	3.106	0.318	4.0	0.04	1.561	0.102
2.6	0.40	3.472	0.351	4.0	0.06	1.691	0.128
2.6	0.50	3.822	0.377	4.0	0.08	1.812	0.150
2.6	0.60	4.153	0.397	4.0	0.10	1.920	0.167

p-d - переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
4.0	0.15	2.145	0.198	7.0	0.00	0.790	-0.037
4.0	0.20	2.421	0.235	7.0	0.02	1.048	0.028
4.0	0.30	2.810	0.274	7.0	0.04	1.242	0.069
4.0	0.40	3.109	0.299	7.0	0.06	1.404	0.100
4.0	0.50	3.366	0.318	7.0	0.08	1.548	0.126
4.0	0.60	3.590	0.333	7.0	0.10	1.680	0.148
4.0	0.70	3.853	0.348	7.0	0.15	1.964	0.189
4.0	0.80	4.089	0.360	7.0	0.20	2.305	0.235
4.0	0.90	4.306	0.370	7.0	0.30	2.732	0.274
4.0	1.00	4.457	0.377	7.0	0.40	3.058	0.299
5.0	0.00	1.040	-0.001	7.0	0.50	3.335	0.318
5.0	0.02	1.234	0.048	7.0	0.60	3.574	0.333
5.0	0.04	1.398	0.085	7.0	0.70	3.849	0.348
5.0	0.06	1.544	0.114	7.0	0.80	4.096	0.360
5.0	0.08	1.674	0.137	7.0	0.90	4.324	0.370
5.0	0.10	1.795	0.157	7.0	1.00	4.483	0.377
5.0	0.15	2.054	0.194	8.0	0.00	0.711	-0.049
5.0	0.20	2.362	0.235	8.0	0.02	0.997	0.022
5.0	0.30	2.770	0.274	8.0	0.04	1.201	0.065
5.0	0.40	3.083	0.299	8.0	0.06	1.369	0.097
5.0	0.50	3.350	0.318	8.0	0.08	1.516	0.123
5.0	0.60	3.583	0.333	8.0	0.10	1.649	0.145
5.0	0.70	3.852	0.348	8.0	0.15	1.939	0.187
5.0	0.80	4.094	0.360	8.0	0.20	2.290	0.235
5.0	0.90	4.317	0.370	8.0	0.30	2.723	0.274
5.0	1.00	4.471	0.377	8.0	0.40	3.052	0.299
6.0	0.00	0.895	-0.022	8.0	0.50	3.330	0.318
6.0	0.02	1.123	0.036	8.0	0.60	3.572	0.333
6.0	0.04	1.303	0.075	8.0	0.70	3.849	0.348
6.0	0.06	1.457	0.105	8.0	0.80	4.097	0.360
6.0	0.08	1.596	0.130	8.0	0.90	4.325	0.370
6.0	0.10	1.723	0.151	8.0	1.00	4.485	0.377
6.0	0.15	1.995	0.190	9.0	0.00	0.648	-0.059
6.0	0.20	2.327	0.235	9.0	0.02	0.959	0.018
6.0	0.30	2.747	0.274	9.0	0.04	1.172	0.062
6.0	0.40	3.068	0.299	9.0	0.06	1.345	0.095
6.0	0.50	3.341	0.318	9.0	0.08	1.494	0.121
6.0	0.60	3.578	0.333	9.0	0.10	1.631	0.144
6.0	0.70	3.851	0.348	9.0	0.15	1.926	0.187
6.0	0.80	4.096	0.360	9.0	0.20	2.280	0.235
6.0	0.90	4.321	0.370	9.0	0.30	2.716	0.274
6.0	1.00	4.479	0.377	9.0	0.40	3.047	0.299

p-d – переход

n°	ϵ'	G	χ
9.0	0.50	3.327	0.318
9.0	0.60	3.570	0.333
9.0	0.70	3.848	0.348
9.0	0.80	4.097	0.360
9.0	0.90	4.326	0.370
9.0	1.00	4.487	0.377
10.	0.00	0.597	-0.067
10.	0.02	0.931	0.015
10.	0.04	1.151	0.060
10.	0.06	1.326	0.093
10.	0.08	1.478	0.120
10.	0.10	1.619	0.144
10.	0.15	1.917	0.187
10.	0.20	2.273	0.235
10.	0.30	2.711	0.274
10.	0.40	3.044	0.299
10.	0.50	3.325	0.318
10.	0.60	3.569	0.333
10.	0.70	3.847	0.348
10.	0.80	4.097	0.360
10.	0.90	4.327	0.370
10.	1.00	4.488	0.377
11.	0.00	0.556	-0.074
11.	0.02	0.910	0.013
11.	0.04	1.135	0.059
11.	0.06	1.313	0.092
11.	0.08	1.468	0.120
11.	0.10	1.610	0.144

n°	ϵ'	G	χ
11.	0.15	1.911	0.187
11.	0.20	2.267	0.235
11.	0.30	2.707	0.274
11.	0.40	3.041	0.299
11.	0.50	3.324	0.318
11.	0.60	3.568	0.333
11.	0.70	3.847	0.348
11.	0.80	4.097	0.360
11.	0.90	4.327	0.370
11.	1.00	4.489	0.377
12.	0.00	0.519	-0.076
12.	0.02	0.893	0.012
12.	0.04	1.123	0.058
12.	0.06	1.304	0.092
12.	0.08	1.461	0.120
12.	0.10	1.603	0.144
12.	0.15	1.906	0.187
12.	0.20	2.263	0.235
12.	0.30	2.704	0.274
12.	0.40	3.039	0.299
12.	0.50	3.322	0.318
12.	0.60	3.567	0.333
12.	0.70	3.847	0.348
12.	0.80	4.097	0.360
12.	0.90	4.328	0.370
12.	1.00	4.489	0.377

Продолжение табл. П. 1

d-p – переход

n°	ϵ'	G	χ
2.6	0.00	0.476	-0.194
2.6	0.02	0.511	-0.166
2.6	0.04	0.551	-0.138
2.6	0.06	0.598	-0.111
2.6	0.08	0.653	-0.086
2.6	0.10	0.716	-0.062
2.6	0.15	0.908	-0.013

n°	ϵ'	G	χ
2.6	0.20	1.143	0.023
2.6	0.30	1.724	0.071
2.6	0.40	2.433	0.099
2.6	0.50	3.258	0.116
2.6	0.60	4.190	0.128
2.6	0.70	5.205	0.136
2.6	0.80	6.290	0.143

d-p - переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
2.6	0.90	7.444	0.149	4.0	0.30	0.714	-0.395
2.6	1.00	8.669	0.153	4.0	0.40	0.729	-0.407
2.8	0.00	0.506	-0.296	4.0	0.50	0.736	-0.416
2.8	0.02	0.536	-0.288	4.0	0.60	0.748	-0.424
2.8	0.04	0.565	-0.280	4.0	0.70	0.751	-0.430
2.8	0.06	0.595	-0.271	4.0	0.80	0.741	-0.434
2.8	0.08	0.627	-0.261	4.0	0.90	0.726	-0.437
2.8	0.10	0.662	-0.251	4.0	1.00	0.704	-0.439
2.8	0.15	0.761	-0.226	5.0	0.00	0.506	-0.302
2.8	0.20	0.874	-0.202	5.0	0.02	0.559	-0.313
2.8	0.30	1.139	-0.158	5.0	0.04	0.596	-0.323
2.8	0.40	1.466	-0.123	5.0	0.06	0.624	-0.332
2.8	0.50	1.872	-0.090	5.0	0.08	0.646	-0.340
2.8	0.60	2.344	-0.084	5.0	0.10	0.663	-0.347
2.8	0.70	2.859	-0.072	5.0	0.15	0.707	-0.364
2.8	0.80	3.400	-0.061	5.0	0.20	0.744	-0.378
2.8	0.90	3.973	-0.051	5.0	0.30	0.774	-0.395
2.8	1.00	4.594	-0.045	5.0	0.40	0.789	-0.407
3.0	0.00	0.472	-0.333	5.0	0.50	0.796	-0.416
3.0	0.02	0.487	-0.338	5.0	0.60	0.807	-0.424
3.0	0.04	0.497	-0.342	5.0	0.70	0.810	-0.430
3.0	0.06	0.504	-0.346	5.0	0.80	0.799	-0.434
3.0	0.08	0.513	-0.351	5.0	0.90	0.782	-0.437
3.0	0.10	0.521	-0.356	5.0	1.00	0.758	-0.439
3.0	0.15	0.541	-0.368	6.0	0.00	0.483	-0.290
3.0	0.20	0.556	-0.378	6.0	0.02	0.555	-0.304
3.0	0.30	0.583	-0.395	6.0	0.04	0.597	-0.315
3.0	0.40	0.598	-0.407	6.0	0.06	0.628	-0.325
3.0	0.50	0.605	-0.416	6.0	0.08	0.657	-0.335
3.0	0.60	0.616	-0.424	6.0	0.10	0.682	-0.344
3.0	0.70	0.620	-0.430	6.0	0.15	0.729	-0.362
3.0	0.80	0.612	-0.434	6.0	0.20	0.777	-0.378
3.0	0.90	0.601	-0.437	6.0	0.30	0.807	-0.395
3.0	1.00	0.583	-0.439	6.0	0.40	0.822	-0.407
4.0	0.00	0.523	-0.319	6.0	0.50	0.828	-0.416
4.0	0.02	0.555	-0.326	6.0	0.60	0.839	-0.424
4.0	0.04	0.579	-0.333	6.0	0.70	0.842	-0.430
4.0	0.06	0.599	-0.340	6.0	0.80	0.830	-0.434
4.0	0.08	0.614	-0.346	6.0	0.90	0.812	-0.437
4.0	0.10	0.628	-0.352	6.0	1.00	0.787	-0.439
4.0	0.15	0.658	-0.366	7.0	0.00	0.460	-0.281
4.0	0.20	0.684	-0.378	7.0	0.02	0.547	-0.297

d-p - переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
7.0	0.04	0.597	-0.310	9.0	0.70	0.882	-0.430
7.0	0.06	0.635	-0.322	9.0	0.80	0.869	-0.434
7.0	0.08	0.663	-0.332	9.0	0.90	0.850	-0.437
7.0	0.10	0.688	-0.341	9.0	1.00	0.823	-0.439
7.0	0.15	0.738	-0.360	10.	0.00	0.396	-0.261
7.0	0.20	0.797	-0.378	10.	0.02	0.532	-0.286
7.0	0.30	0.827	-0.395	10.	0.04	0.596	-0.303
7.0	0.40	0.842	-0.407	10.	0.06	0.644	-0.318
7.0	0.50	0.848	-0.416	10.	0.08	0.685	-0.331
7.0	0.60	0.859	-0.424	10.	0.10	0.709	-0.340
7.0	0.70	0.861	-0.430	10.	0.15	0.755	-0.358
7.0	0.80	0.848	-0.434	10.	0.20	0.826	-0.378
7.0	0.90	0.830	-0.437	10.	0.30	0.856	-0.395
7.0	1.00	0.804	-0.439	10.	0.40	0.870	-0.407
8.0	0.00	0.436	-0.273	10.	0.50	0.875	-0.416
8.0	0.02	0.543	-0.293	10.	0.60	0.886	-0.424
8.0	0.04	0.597	-0.307	10.	0.70	0.888	-0.430
8.0	0.06	0.639	-0.320	10.	0.80	0.875	-0.434
8.0	0.08	0.671	-0.331	10.	0.90	0.855	-0.437
8.0	0.10	0.695	-0.340	10.	1.00	0.829	-0.439
8.0	0.15	0.741	-0.358	11.	0.00	0.380	-0.257
8.0	0.20	0.810	-0.378	11.	0.02	0.529	-0.284
8.0	0.30	0.840	-0.395	11.	0.04	0.597	-0.302
8.0	0.40	0.855	-0.407	11.	0.06	0.648	-0.318
8.0	0.50	0.860	-0.416	11.	0.08	0.688	-0.331
8.0	0.60	0.871	-0.424	11.	0.10	0.714	-0.340
8.0	0.70	0.873	-0.430	11.	0.15	0.760	-0.358
8.0	0.80	0.860	-0.434	11.	0.20	0.830	-0.378
8.0	0.90	0.842	-0.437	11.	0.30	0.860	-0.395
8.0	1.00	0.815	-0.439	11.	0.40	0.874	-0.407
9.0	0.00	0.416	-0.267	11.	0.50	0.880	-0.416
9.0	0.02	0.537	-0.289	11.	0.60	0.891	-0.424
9.0	0.04	0.598	-0.305	11.	0.70	0.892	-0.430
9.0	0.06	0.643	-0.319	11.	0.80	0.879	-0.434
9.0	0.08	0.679	-0.331	11.	0.90	0.860	-0.437
9.0	0.10	0.704	-0.340	11.	1.00	0.833	-0.439
9.0	0.15	0.749	-0.358	12.	0.00	0.366	-0.254
9.0	0.20	0.819	-0.378	12.	0.02	0.527	-0.283
9.0	0.30	0.849	-0.395	12.	0.04	0.599	-0.302
9.0	0.40	0.863	-0.407	12.	0.06	0.651	-0.318
9.0	0.50	0.869	-0.416	12.	0.08	0.691	-0.331
9.0	0.60	0.880	-0.424	12.	0.10	0.717	-0.340

d-p - переход

n^*	ϵ'	G	χ
12.	0.15	0.763	-0.358
12.	0.20	0.834	-0.378
12.	0.30	0.864	-0.395
12.	0.40	0.878	-0.407
12.	0.50	0.883	-0.416
12.	0.60	0.894	-0.424

n^*	ϵ'	G	χ
12.	0.70	0.896	-0.430
12.	0.80	0.882	-0.434
12.	0.90	0.863	-0.437
12.	1.00	0.836	-0.439

Продолжение табл. П.1

d-f - переход

n^*	ϵ'	G	χ
2.6	0.00	2.989	0.272
2.6	0.02	3.156	0.291
2.6	0.04	3.331	0.307
2.6	0.06	3.510	0.319
2.6	0.08	3.692	0.330
2.6	0.10	3.874	0.340
2.6	0.15	4.339	0.361
2.6	0.20	4.819	0.378
2.6	0.30	5.833	0.403
2.6	0.40	6.907	0.421
2.6	0.50	8.031	0.434
2.6	0.60	9.203	0.444
2.6	0.70	10.428	0.451
2.6	0.80	11.699	0.455
2.6	0.90	13.007	0.458
2.6	1.00	14.345	0.460
2.8	0.00	2.311	0.217
2.8	0.02	2.431	0.238
2.8	0.04	2.550	0.254
2.8	0.06	2.668	0.266
2.8	0.08	2.784	0.276
2.8	0.10	2.899	0.284
2.8	0.15	3.188	0.300
2.8	0.20	3.485	0.312
2.8	0.30	4.096	0.325
2.8	0.40	4.714	0.329
2.8	0.50	5.337	0.331
2.8	0.60	5.972	0.331
2.8	0.70	6.638	0.328

n^*	ϵ'	G	χ
2.8	0.80	7.321	0.324
2.8	0.90	8.012	0.318
2.8	1.00	8.705	0.312
3.0	0.00	1.851	0.222
3.0	0.02	1.940	0.252
3.0	0.04	2.011	0.274
3.0	0.06	2.075	0.292
3.0	0.08	2.144	0.308
3.0	0.10	2.201	0.321
3.0	0.15	2.349	0.348
3.0	0.20	2.465	0.367
3.0	0.30	2.601	0.391
3.0	0.40	2.668	0.406
3.0	0.50	2.714	0.417
3.0	0.60	2.803	0.427
3.0	0.70	2.843	0.434
3.0	0.80	2.842	0.439
3.0	0.90	2.828	0.443
3.0	1.00	2.790	0.446
4.0	0.00	1.456	0.155
4.0	0.02	1.631	0.203
4.0	0.04	1.784	0.238
4.0	0.06	1.914	0.264
4.0	0.08	2.016	0.283
4.0	0.10	2.100	0.298
4.0	0.15	2.273	0.327
4.0	0.20	2.409	0.348
4.0	0.30	2.679	0.380
4.0	0.40	2.898	0.401

d-f - переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
4.0	0.50	3.087	0.416	7.0	0.08	1.747	0.251
4.0	0.60	3.243	0.427	7.0	0.10	1.887	0.273
4.0	0.70	3.303	0.434	7.0	0.15	2.153	0.311
4.0	0.80	3.312	0.439	7.0	0.20	2.382	0.338
4.0	0.90	3.393	0.443	7.0	0.30	2.785	0.376
4.0	1.00	3.265	0.446	7.0	0.40	3.115	0.400
5.0	0.00	1.184	0.107	7.0	0.50	3.377	0.416
5.0	0.02	1.407	0.169	7.0	0.60	3.566	0.427
5.0	0.04	1.593	0.212	7.0	0.70	3.646	0.434
5.0	0.06	1.750	0.243	7.0	0.80	3.667	0.439
5.0	0.08	1.886	0.267	7.0	0.90	3.665	0.443
5.0	0.10	1.996	0.285	7.0	1.00	3.630	0.446
5.0	0.15	2.215	0.318	8.0	0.00	0.781	0.027
5.0	0.20	2.394	0.342	8.0	0.02	1.113	0.124
5.0	0.30	2.705	0.376	8.0	0.04	1.350	0.179
5.0	0.40	3.008	0.400	8.0	0.06	1.545	0.218
5.0	0.50	3.248	0.416	8.0	0.08	1.711	0.247
5.0	0.60	3.422	0.427	8.0	0.10	1.851	0.269
5.0	0.70	3.492	0.434	8.0	0.15	2.159	0.311
5.0	0.80	3.507	0.439	8.0	0.20	2.390	0.338
5.0	0.90	3.502	0.443	8.0	0.30	2.802	0.376
5.0	1.00	3.465	0.446	8.0	0.40	3.140	0.400
6.0	0.00	1.004	0.073	8.0	0.50	3.407	0.416
6.0	0.02	1.268	0.148	8.0	0.60	3.600	0.427
6.0	0.04	1.476	0.196	8.0	0.70	3.682	0.434
6.0	0.06	1.652	0.231	8.0	0.80	3.704	0.439
6.0	0.08	1.801	0.257	8.0	0.90	3.704	0.443
6.0	0.10	1.933	0.278	8.0	1.00	3.669	0.446
6.0	0.15	2.185	0.314	9.0	0.00	0.707	0.011
6.0	0.20	2.395	0.340	9.0	0.02	1.067	0.117
6.0	0.30	2.756	0.376	9.0	0.04	1.314	0.174
6.0	0.40	3.076	0.400	9.0	0.06	1.514	0.214
6.0	0.50	3.330	0.416	9.0	0.08	1.685	0.244
6.0	0.60	3.513	0.427	9.0	0.10	1.831	0.267
6.0	0.70	3.589	0.434	9.0	0.15	2.159	0.311
6.0	0.80	3.607	0.439	9.0	0.20	2.395	0.338
6.0	0.90	3.605	0.443	9.0	0.30	2.814	0.376
6.0	1.00	3.569	0.446	9.0	0.40	3.156	0.400
7.0	0.00	0.877	0.047	9.0	0.50	3.427	0.416
7.0	0.02	1.176	0.134	9.0	0.60	3.623	0.427
7.0	0.04	1.401	0.186	9.0	0.70	3.706	0.434
7.0	0.06	1.587	0.223	9.0	0.80	3.730	0.439

d-f - переход

n^*	ϵ'	G	χ
9.0	0.90	3.730	0.443
9.0	1.00	3.669	0.446
10.	0.00	0.648	-0.003
10.	0.02	1.033	0.112
10.	0.04	1.286	0.170
10.	0.06	1.491	0.211
10.	0.08	1.667	0.242
10.	0.10	1.820	0.266
10.	0.15	2.159	0.311
10.	0.20	2.398	0.338
10.	0.30	2.822	0.376
10.	0.40	3.168	0.400
10.	0.50	3.441	0.416
10.	0.60	3.639	0.427
10.	0.70	3.724	0.434
10.	0.80	3.748	0.439
10.	0.90	3.749	0.443
10.	1.00	3.715	0.446
11.	0.00	0.599	-0.014
11.	0.02	1.007	0.108
11.	0.04	1.268	0.168
11.	0.06	1.478	0.210
11.	0.08	1.660	0.242
11.	0.10	1.815	0.266
11.	0.15	2.159	0.311
11.	0.20	2.400	0.338

n^*	ϵ'	G	χ
11.	0.30	2.828	0.376
11.	0.40	3.176	0.400
11.	0.50	3.451	0.416
11.	0.60	3.651	0.427
11.	0.70	3.737	0.434
11.	0.80	3.761	0.439
11.	0.90	3.763	0.443
11.	1.00	3.729	0.446
12.	0.00	0.558	-0.021
12.	0.02	0.987	0.105
12.	0.04	1.253	0.166
12.	0.06	1.467	0.209
12.	0.08	1.655	0.242
12.	0.10	1.812	0.266
12.	0.15	2.158	0.311
12.	0.20	2.402	0.338
12.	0.30	2.832	0.376
12.	0.40	3.183	0.400
12.	0.50	3.459	0.416
12.	0.60	3.660	0.427
12.	0.70	3.746	0.434
12.	0.80	3.772	0.439
12.	0.90	3.773	0.443
12.	1.00	3.739	0.446

Окончание табл. П.1

f-d - переход

n^*	ϵ'	G	χ
4.0	0.00	0.289	-0.362
4.0	0.02	0.291	-0.372
4.0	0.04	0.293	-0.382
4.0	0.06	0.291	-0.390
4.0	0.08	0.291	-0.398
4.0	0.10	0.287	-0.404
4.0	0.15	0.284	-0.418
4.0	0.20	0.287	-0.430
4.0	0.30	0.282	-0.445

n^*	ϵ'	G	χ
4.0	0.40	0.284	-0.456
4.0	0.50	0.296	-0.465
4.0	0.60	0.303	-0.471
4.0	0.70	0.316	-0.476
4.0	0.80	0.332	-0.480
4.0	0.90	0.345	-0.483
4.0	1.00	0.375	-0.486
5.0	0.00	0.342	-0.342
5.0	0.02	0.355	-0.357

f-d - переход

n'	ϵ'	G	χ	n'	ϵ'	G	χ
5.0	0.04	0.355	-0.368	7.0	0.70	0.496	-0.476
5.0	0.06	0.352	-0.377	7.0	0.80	0.520	-0.480
5.0	0.08	0.351	-0.386	7.0	0.90	0.541	-0.483
5.0	0.10	0.353	-0.395	7.0	1.00	0.586	-0.486
5.0	0.15	0.354	-0.412	8.0	0.00	0.357	-0.309
5.0	0.20	0.355	-0.425	8.0	0.02	0.407	-0.336
5.0	0.30	0.365	-0.444	8.0	0.04	0.420	-0.353
5.0	0.40	0.373	-0.456	8.0	0.06	0.426	-0.367
5.0	0.50	0.388	-0.465	8.0	0.08	0.430	-0.379
5.0	0.60	0.396	-0.471	8.0	0.10	0.436	-0.390
5.0	0.70	0.413	-0.476	8.0	0.15	0.444	-0.410
5.0	0.80	0.433	-0.480	8.0	0.20	0.447	-0.424
5.0	0.90	0.451	-0.483	8.0	0.30	0.454	-0.443
5.0	1.00	0.489	-0.486	8.0	0.40	0.470	-0.456
6.0	0.00	0.360	-0.329	8.0	0.50	0.487	-0.465
6.0	0.02	0.383	-0.347	8.0	0.60	0.497	-0.471
6.0	0.04	0.389	-0.361	8.0	0.70	0.517	-0.476
6.0	0.06	0.389	-0.372	8.0	0.80	0.542	-0.480
6.0	0.08	0.389	-0.382	8.0	0.90	0.563	-0.483
6.0	0.10	0.393	-0.392	8.0	1.00	0.610	-0.486
6.0	0.15	0.394	-0.410	9.0	0.00	0.348	-0.301
6.0	0.20	0.398	-0.424	9.0	0.02	0.412	-0.332
6.0	0.30	0.406	-0.443	9.0	0.04	0.429	-0.351
6.0	0.40	0.421	-0.456	9.0	0.06	0.437	-0.366
6.0	0.50	0.438	-0.465	9.0	0.08	0.444	-0.379
6.0	0.60	0.447	-0.471	9.0	0.10	0.450	-0.390
6.0	0.70	0.465	-0.476	9.0	0.15	0.457	-0.410
6.0	0.80	0.487	-0.480	9.0	0.20	0.460	-0.424
6.0	0.90	0.507	-0.483	9.0	0.30	0.467	-0.443
6.0	1.00	0.550	-0.486	9.0	0.40	0.483	-0.456
7.0	0.00	0.361	-0.318	9.0	0.50	0.501	-0.465
7.0	0.02	0.399	-0.341	9.0	0.60	0.511	-0.471
7.0	0.04	0.408	-0.356	9.0	0.70	0.531	-0.476
7.0	0.06	0.411	-0.369	9.0	0.80	0.556	-0.480
7.0	0.08	0.413	-0.380	9.0	0.90	0.578	-0.483
7.0	0.10	0.416	-0.390	9.0	1.00	0.627	-0.486
7.0	0.15	0.424	-0.410	10.	0.00	0.339	-0.294
7.0	0.20	0.428	-0.424	10.	0.02	0.414	-0.329
7.0	0.30	0.435	-0.443	10.	0.04	0.434	-0.349
7.0	0.40	0.451	-0.456	10.	0.06	0.444	-0.365
7.0	0.50	0.468	-0.465	10.	0.08	0.454	-0.379
7.0	0.60	0.477	-0.471	10.	0.10	0.460	-0.390

f-d – переход

<i>n'</i>	ϵ'	<i>G</i>	χ	<i>n'</i>	ϵ'	<i>G</i>	χ
10.	0.15	0.467	-0.410	11.	0.70	0.549	-0.476
10.	0.20	0.470	-0.424	11.	0.80	0.575	-0.480
10.	0.30	0.477	-0.443	11.	0.90	0.597	-0.483
10.	0.40	0.493	-0.456	11.	1.00	0.647	-0.486
10.	0.50	0.511	-0.465	12.	0.00	0.322	-0.285
10.	0.60	0.520	-0.471	12.	0.02	0.418	-0.325
10.	0.70	0.541	-0.476	12.	0.04	0.442	-0.347
10.	0.80	0.567	-0.480	12.	0.06	0.458	-0.365
10.	0.90	0.589	-0.483	12.	0.08	0.468	-0.379
10.	1.00	0.638	-0.486	12.	0.10	0.474	-0.390
11.	0.00	0.330	-0.289	12.	0.15	0.480	-0.410
11.	0.02	0.417	-0.327	12.	0.20	0.483	-0.424
11.	0.04	0.439	-0.348	12.	0.30	0.489	-0.443
11.	0.06	0.452	-0.365	12.	0.40	0.505	-0.456
11.	0.08	0.462	-0.379	12.	0.50	0.523	-0.465
11.	0.10	0.468	-0.390	12.	0.60	0.533	-0.471
11.	0.15	0.474	-0.410	12.	0.70	0.554	-0.476
11.	0.20	0.477	-0.424	12.	0.80	0.581	-0.480
11.	0.30	0.484	-0.443	12.	0.90	0.603	-0.483
11.	0.40	0.500	-0.456	12.	1.00	0.654	-0.486
11.	0.50	0.518	-0.465				
11.	0.60	0.528	-0.471				

Таблица П. 2

Компьютерная база данных уровней энергии атомов и ионов

АТОМ = С

Z = 1 АТОМW = 12 NTSMAX = 105 NTMAX = 67 NPterm = 1

Комментарий: #S = 2S + 1, #S'' = 2S'' + 1

<i>n'</i>	<i>E(n, l)</i>	<i>J</i>	<i>n</i>	<i>l</i>	<i>q</i>	#S	<i>L</i>	π	#S''	<i>L''</i>	π''	sh
1	0.	0.	2	1	2	3	1	1	0	0	0	0
1	16.4	1.	2	1	2	3	1	1	0	0	0	0
1	43.5	2.	2	1	2	3	1	1	0	0	0	0
2	10193.7	2.	2	1	2	1	2	1	0	0	0	0
3	21648.4	0.	2	1	2	1	0	1	0	0	0	0
4	33735.2	2.	2	1	3	5	0	0	0	0	0	0
5	60333.8	0.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0
5	60353.0	1.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
5	60393.52	2.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0
6	61982.2	1.	3	0	1	1	1	0	2	1	0	0
7	64088.56	3.	2	1	3	3	2	0	0	0	0	0
7	64093.19	2.	2	1	3	3	2	0	0	0	0	0
7	64092.01	1.	2	1	3	3	2	0	0	0	0	0
8	68858.0	1.	3	1	1	1	1	1	2	1	0	0
9	69689.79	1.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
9	69710.99	2.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
9	69744.40	3.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
10	70744.26	1.	3	1	1	3	0	1	2	1	0	0
11	71352.81	0.	3	1	1	3	1	1	2	1	0	0
11	71365.23	1.	3	1	1	3	1	1	2	1	0	0
11	71385.70	2.	3	1	1	3	1	1	2	1	0	0
12	72611.06	2.	3	1	1	1	2	1	2	1	0	0
13	73976.23	0.	3	1	1	1	0	1	2	1	0	0
14	75256.3	2.	2	1	3	3	1	0	0	0	0	0
14	75256.3	1.	2	1	3	3	1	0	0	0	0	0
14	75256.3	0.	2	1	3	3	1	0	0	0	0	0
15	77680.5	2.	3	2	1	1	2	0	2	1	0	0
16	78105.23	0.	4	0	1	3	1	0	2	1	0	0
16	78117.06	1.	4	0	1	3	1	0	2	1	0	0
16	78148.36	2.	4	0	1	3	1	0	2	1	0	0
17	78199.34	2.	3	2	1	3	3	0	2	1	0	0
17	78215.82	3.	3	2	1	3	3	0	2	1	0	0
17	78250.22	4.	3	2	1	3	3	0	2	1	0	0
18	78300.8	1.	3	2	1	3	2	0	2	1	0	0
18	78307.0	2.	3	2	1	3	2	0	2	1	0	0
18	78316.0	3.	3	2	1	3	2	0	2	1	0	0
19	78338.	1.	4	0	1	1	1	0	2	1	0	0
20	78531.0	3.	3	2	1	1	3	0	2	1	0	0
21	78727.91	1.	3	2	1	1	1	0	2	1	0	0
22	79311.1	2.	3	2	1	3	1	0	2	1	0	0
22	79319.06	1.	3	2	1	3	1	0	2	1	0	0
22	79323.32	0.	3	2	1	3	1	0	2	1	0	0
23	80173.29	1.	4	1	1	3	2	1	2	1	0	0
23	80192.49	2.	4	1	1	3	2	1	2	1	0	0
23	80222.74	3.	4	1	1	3	2	1	2	1	0	0
24	80563.57	1.	4	1	1	1	1	1	2	1	0	0
25	81105.7	1.	4	1	1	3	0	1	2	1	0	0
26	81311.52	0.	4	1	1	3	1	0	2	1	0	0
26	81326.33	1.	4	1	1	3	1	0	2	1	0	0
26	81344.48	2.	4	1	1	3	1	0	2	1	0	0
27	81770.36	2.	4	1	1	1	2	1	2	1	0	0
28	82252.31	0.	4	1	1	1	0	1	2	1	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
29	83500.	2.	4	2	1	1	2	0	2	1	0	0
30	83761.	2.	4	2	1	3	3	0	2	1	0	0
30	83761.	3.	4	2	1	3	3	0	2	1	0	0
30	83761.	4.	4	2	1	3	3	0	2	1	0	0
31	83830.	1.	4	2	1	3	2	0	2	1	0	0
31	83837.	2.	4	2	1	3	2	0	2	1	0	0
31	83847.	3.	4	2	1	3	2	0	2	1	0	0
32	83882.5	1.	5	0	1	1	1	0	2	1	0	0
33	83949.	3.	4	2	1	1	3	0	2	1	0	0
34	84032.	1.	4	2	1	1	1	0	2	1	0	0
35	84102.6	2.	4	2	1	3	1	0	2	1	0	0
35	84112.	1.	4	2	1	3	1	0	2	1	0	0
36	84852.13	1.	5	1	1	1	1	1	2	1	0	0
37	84952.	2.	5	1	1	3	2	1	2	1	0	0
37	84986.2	3.	5	1	1	3	2	1	2	1	0	0
38	85400.38	2.	5	1	1	1	2	1	2	1	0	0
39	85625.84	0.	5	1	1	1	0	1	2	1	0	0
40	86187.	2.	5	2	1	1	2	0	2	1	0	0
41	86319.	2.	5	2	1	3	3	0	2	1	0	0
41	86326.9	3.	5	2	1	3	3	0	2	1	0	0
42	86371.3	2.	5	2	1	3	2	0	2	1	0	0
42	86396.	3.	5	2	1	3	2	0	2	1	0	0
43	86413.96	1.	6	0	1	1	1	0	2	1	0	0
44	86450.	3.	5	2	1	1	3	0	2	1	0	0
45	86491.	1.	5	2	1	1	1	0	2	1	0	0
46	86504.	2.	5	2	1	3	1	0	2	1	0	0
46	86517.	1.	5	2	1	3	1	0	2	1	0	0
47	87632.	2.	6	2	1	1	2	0	2	1	0	0
48	87706.	2.	6	2	1	3	3	0	2	1	0	0
48	87713.	3.	6	2	1	3	3	0	2	1	0	0
49	87752.	2.	6	2	1	3	2	0	2	1	0	0
49	87773.	3.	6	2	1	3	2	0	2	1	0	0
50	87795.3	1.	7	0	1	1	1	0	2	1	0	0
51	87807.	3.	6	2	1	1	3	0	2	1	0	0
52	87830.	2.	6	2	1	3	1	0	2	1	0	0
52	87839.	1.	6	2	1	3	1	0	2	1	0	0
53	87831.3	1.	6	2	1	1	1	0	2	1	0	0
54	88541.8	2.	7	2	1	3	3	0	2	1	0	0
54	88547.	3.	7	2	1	3	3	0	2	1	0	0
55	88607.	3.	7	2	1	3	2	0	2	1	0	0
56	88624.	3.	7	2	1	1	3	0	2	1	0	0
57	88632.44	1.	7	2	1	1	1	0	2	1	0	0
58	88639.	2.	7	2	1	3	1	0	2	1	0	0
59	89081.	3.	8	2	1	3	3	0	2	1	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
59	89082.	2.	8	2	1	3	3	0	2	1	0	0
60	89146.	3.	8	2	1	3	2	0	2	1	0	0
61	89155.	3.	8	2	1	1	3	0	2	1	0	0
62	89158.	2.	8	2	1	3	1	0	2	1	0	0
63	89450.	2.	9	2	1	3	3	0	2	1	0	0
64	89514.	3.	9	2	1	3	2	0	2	1	0	0
65	89517.	3.	9	2	1	1	3	0	2	1	0	0
66	89779.	3.	10	2	1	3	2	0	2	1	0	0
67	89968.4	3.	11	2	1	3	2	0	2	1	0	0

===== Потенциал ионизации =====

1	90878.3	2	1	0
---	---------	---	---	---

Продолжение табл. П. 2

ATOM = C+

Z=2 ATOMW = 12 NTSMAX = 127 NTMAX = 64 NPterm = 2

Комментарий: $\#S=2S+1$, $\#S''=2S''+1$

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
1	0.	0.5	2	1	1	2	1	0	1	0	1	0
1	64.0	1.5	2	1	1	2	1	0	1	0	1	0
2	43000.2	0.5	2	1	2	4	1	1	0	0	0	0
2	43021.8	1.5	2	1	2	4	1	1	0	0	0	0
2	43050.7	2.5	2	1	2	4	1	1	0	0	0	0
3	74930.9	2.5	2	1	2	2	2	1	0	0	0	0
3	74933.2	1.5	2	1	2	2	2	1	0	0	0	0
4	96494.1	1.5	2	1	2	2	0	1	0	0	0	0
5	110625.1	0.5	2	1	2	2	1	1	0	0	0	0
5	110666.3	1.5	2	1	2	2	1	1	0	0	0	0
6	116537.88	0.5	3	0	1	2	0	1	1	0	1	0
7	131724.68	0.5	3	1	1	2	1	0	1	0	1	0
7	131735.81	1.5	3	1	1	2	1	0	1	0	1	0
8	142024.4	1.5	2	1	3	4	0	0	0	0	0	0
9	145549.99	1.5	3	2	1	2	2	1	1	0	1	0
9	145551.44	2.5	3	2	1	2	2	1	1	0	1	0
10	150462.8	2.5	2	1	3	2	2	0	0	0	0	0
10.	150467.9	1.5	2	1	3	2	2	0	0	0	0	0
11	157234.43	1.5	4	0	1	2	0	1	1	0	1	0
12	162518.7	0.5	4	1	1	2	1	0	1	0	1	0
12	162524.62	1.5	4	1	1	2	1	0	1	0	1	0
13	166964.79	0.5	3	0	1	4	1	0	3	1	0	0
13	166988.46	1.5	3	0	1	4	1	0	3	1	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
13	167033.43	2.5	3	0	1	4	1	0	3	1	0	0
14	168123.92	1.5	4	2	1	2	2	1	1	0	1	0
14	168124.33	2.5	4	2	1	2	2	1	1	0	1	0
15	168731.6	0.5	2	1	3	2	1	0	0	0	0	0
15	168750.2	1.5	2	1	3	2	1	0	0	0	0	0
16	168979.05	2.5	4	3	1	2	3	0	1	0	1	0
16	168979.05	3.5	4	3	1	2	3	0	1	0	1	0
17	173348.18	0.5	5	0	1	2	0	1	1	0	1	0
18	175287.9	0.5	5	1	1	2	1	0	1	0	1	0
18	175295.2	1.5	5	1	1	2	1	0	1	0	1	0
19	178194.1	0.5	3	0	1	2	1	0	3	1	0	0
19	178220.8	1.5	3	0	1	2	1	0	3	1	0	0
20	178494.8	2.5	5	2	1	2	2	1	1	0	1	0
21	178956.46	2.5	5	3	1	2	3	0	1	0	1	0
21	178956.46	3.5	5	3	1	2	3	0	1	0	1	0
22	181258.	0.5	6	0	1	2	0	1	1	0	1	0
23	181694.5	0.5	3	1	1	4	2	1	3	1	0	0
23	181709.2	1.5	3	1	1	4	2	1	3	1	0	0
23	181734.21	2.5	3	1	1	4	2	1	3	1	0	0
23	181770.48	3.5	3	1	1	4	2	1	3	1	0	0
24	182025.0	0.5	3	1	1	2	1	1	3	1	0	0
24	182044.5	1.5	3	1	1	2	1	1	3	1	0	0
25	184064.9	2.5	6	2	1	2	2	1	1	0	1	0
26	184376.2	2.5	6	3	1	2	3	0	1	0	1	0
26	184376.2	3.5	6	3	1	2	3	0	1	0	1	0
27	184688.69	1.5	3	1	1	4	0	1	3	1	0	0
28	186425.02	0.5	3	1	1	4	1	1	3	1	0	0
28	186441.32	1.5	3	1	1	4	1	1	3	1	0	0
28	186463.75	2.5	3	1	1	4	1	1	3	1	0	0
29	188579.3	1.5	3	1	1	2	2	1	3	1	0	0
29	188612.7	2.5	3	1	1	2	2	1	3	1	0	0
30	194571.9	0.5	3	1	1	2	0	1	3	1	0	0
31	195750.8	1.5	3	2	1	4	3	0	3	1	0	0
31	195765.1	2.5	3	2	1	4	3	0	3	1	0	0
31	195784.7	3.5	3	2	1	4	3	0	3	1	0	0
31	195812.3	4.5	3	2	1	4	3	0	3	1	0	0
32	196556.2	0.5	3	2	1	4	2	0	3	1	0	0
32	196561.8	1.5	3	2	1	4	2	0	3	1	0	0
32	196570.5	2.5	3	2	1	4	2	0	3	1	0	0
32	196580.8	3.5	3	2	1	4	2	0	3	1	0	0
33	198426.4	1.5	3	2	1	2	2	0	3	1	0	0
33	198437.2	2.5	3	2	1	2	2	0	3	1	0	0
34	198842.0	2.5	3	2	1	4	1	0	3	1	0	0
34	198863.5	1.5	3	2	1	4	1	0	3	1	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
34	198877.7	0.5	3	2	1	4	1	0	3	1	0	0
35	199941.4	2.5	3	2	1	2	3	0	3	1	0	0
35	199984.2	3.5	3	2	1	2	3	0	3	1	0	0
36	202180.3	1.5	3	2	1	2	1	0	3	1	0	0
36	202204.4	0.5	3	2	1	2	1	0	3	1	0	0
37	209550.26	0.5	4	0	1	4	1	0	3	1	0	0
37	209574.28	1.5	4	0	1	4	1	0	3	1	0	0
37	209602.36	2.5	4	0	1	4	1	0	3	1	0	0
38	214406.6	1.5	4	1	1	2	1	1	3	1	0	0
38	214429.7	2.5	4	1	1	2	1	1	3	1	0	0
39	214758.3	0.5	4	1	1	4	2	1	3	1	0	0
39	214772.6	1.5	4	1	1	4	2	1	3	1	0	0
39	214794.6	2.5	4	1	1	4	2	1	3	1	0	0
39	214828.	3.5	4	1	1	4	2	1	3	1	0	0
40	215765.6	1.5	4	1	1	4	0	1	3	1	0	0
41	216378.0	1.5	4	1	1	4	1	1	3	1	0	0
41	216397.7	2.5	4	1	1	4	1	1	3	1	0	0
42	216927.	2.5	4	1	1	2	2	1	3	1	0	0
43	219553.8	1.5	4	2	1	4	3	0	3	1	0	0
43	219568.5	2.5	4	2	1	4	3	0	3	1	0	0
43	219589.2	3.5	4	2	1	4	3	0	3	1	0	0
43	219617.0	4.5	4	2	1	4	3	0	3	1	0	0
44	220127.8	1.5	4	2	1	4	2	0	3	1	0	0
44	220137.0	2.5	4	2	1	4	2	0	3	1	0	0
44	220147.0	3.5	4	2	1	4	2	0	3	1	0	0
45	220601.1	1.5	4	2	1	2	2	0	3	1	0	0
45	220614.2	2.5	4	2	1	2	2	0	3	1	0	0
46	220808.47	2.5	4	2	1	4	1	0	3	1	0	0
46	220828.97	1.5	4	2	1	4	1	0	3	1	0	0
46	220840.87	0.5	4	2	1	4	1	0	3	1	0	0
47	221089.6	2.5	4	3	1	2	3	1	3	1	0	0
47	221098.8	3.5	4	3	1	2	3	1	3	1	0	0
48	221106.3	3.5	4	3	1	4	3	1	3	1	0	0
48	221107.4	4.5	4	3	1	4	3	1	3	1	0	0
49	221502.	3.5	4	2	1	2	3	0	3	1	0	0
50	221543.	2.5	4	3	1	4	4	1	3	1	0	0
50	221553.2	3.5	4	3	1	4	4	1	3	1	0	0
50	221574.5	4.5	4	3	1	4	4	1	3	1	0	0
50	221603.6	5.5	4	3	1	4	4	1	3	1	0	0
51	221585.	3.5	4	3	1	2	4	1	3	1	0	0
51	221628.	4.5	4	3	1	2	4	1	3	1	0	0
52	221696.5	3.5	4	3	1	4	2	1	3	1	0	0
52	221727.4	2.5	4	3	1	4	2	1	3	1	0	0
52	221746.3	1.5	4	3	1	4	2	1	3	1	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
53	221707.9	2.5	4	3	1	2	2	1	3	1	0	0
53	221752.9	1.5	4	3	1	2	2	1	3	1	0	0
54	222259.1	1.5	4	2	1	2	1	0	3	1	0	0
54	222286.0	0.5	4	2	1	2	1	0	3	1	0	0
55	225813.0	2.5	5	0	1	4	1	0	3	1	0	0
56	227901.	0.5	5	1	1	2	1	0	3	1	0	0
56	227901.	1.5	5	1	1	2	1	0	3	1	0	0
57	230763.	3.5	5	2	1	4	2	0	3	1	0	0
58	231050.	2.5	5	2	1	4	1	0	3	1	0	0
59	231221.	2.5	5	3	1	2	3	1	3	1	0	0
59	231221.	3.5	5	3	1	2	3	1	3	1	0	0
60	231226.8	4.5	5	3	1	4	3	1	3	1	0	0
61	231499.3	5.5	5	3	1	4	4	1	3	1	0	0
62	231520.4	3.5	5	3	1	4	2	1	3	1	0	0
63	236444.	3.5	6	2	1	4	2	0	3	1	0	0
64	236605.	2.5	6	2	1	4	1	0	3	1	0	0

Потенциал ионизации

1	196659.								1	0	1	
2	248974.								3	1	0	

Продолжение табл. П. 2

ATOM = N

Z = 1 ATOMW = 14 NTSMAX = 228 NTMAX = 90 NPterm = 2

Комментарий: $\#S = 2S + 1$, $\#S'' = 2S'' + 1$

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
1	0.	1.5	2	1	3	4	0	0	0	0	0	0
2	19223.	2.5	2	1	3	2	2	0	0	0	0	0
2	19231.	1.5	2	1	3	2	2	0	0	0	0	0
3	28840.	1.5	2	1	3	2	1	0	0	0	0	0
3	28840.	0.5	2	1	3	2	1	0	0	0	0	0
4	83285.5	0.5	3	0	1	4	1	1	3	1	1	0
4	83319.3	1.5	3	0	1	4	1	1	3	1	1	0
4	83366.0	2.5	3	0	1	4	1	1	3	1	1	0
5	86131.4	0.5	3	0	1	2	1	1	3	1	1	0
5	86223.2	1.5	3	0	1	2	1	1	3	1	1	0
6	88109.5	2.5	2	1	4	4	1	1	0	0	0	0
6	88153.4	1.5	2	1	4	4	1	1	0	0	0	0
6	88173.0	0.5	2	1	4	4	1	1	0	0	0	0
7	93582.3	0.5	3	1	1	3	1	0	3	1	1	0
8	94772.2	0.5	3	1	1	4	2	0	3	1	1	0
8	94794.8	1.5	3	1	1	4	2	0	3	1	1	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
8	94832.1	2.5	3	1	1	4	2	0	3	1	1	0
8	94883.1	3.5	3	1	1	4	2	0	3	1	1	0
9	95476.5	0.5	3	1	1	4	1	0	3	1	1	0
9	95494.9	1.5	3	1	1	4	1	0	3	1	1	0
9	95533.2	2.5	3	1	1	4	1	0	3	1	1	0
10	96751.7	1.5	3	1	1	4	0	0	3	1	1	0
11	96788.2	1.5	3	1	1	2	2	0	3	1	1	0
11	96864.2	2.5	3	1	1	2	2	0	3	1	1	0
12	97770.1	0.5	3	1	1	2	1	0	3	1	1	0
12	97805.8	1.5	3	1	1	2	1	0	3	1	1	0
13	99665.	2.5	3	1	1	2	2	1	1	2	1	0
13	99658.	1.5	3	1	1	2	2	1	1	2	1	0
14	103618.1	0.5	4	0	1	4	1	1	3	1	1	0
14	103668.1	1.5	4	0	1	4	1	1	3	1	1	0
14	103736.8	2.5	4	0	1	4	1	1	3	1	1	0
15	104142.2	0.5	4	0	1	2	1	1	3	1	1	0
15	104227.4	1.5	4	0	1	2	1	1	3	1	1	0
16	104615.4	1.5	3	2	1	2	1	1	3	1	1	0
16	104654.9	0.5	3	2	1	2	1	1	3	1	1	0
17	104665.	1.5	3	2	1	4	3	1	3	1	1	0
17	104686.	2.5	3	2	1	4	3	1	3	1	1	0
17	104718.	3.5	3	2	1	4	3	1	3	1	1	0
17	104767.	4.5	3	2	1	4	3	1	3	1	1	0
18	104810.9	2.5	3	2	1	2	3	1	3	1	1	0
18	104882.7	3.5	3	2	1	2	3	1	3	1	1	0
19	104864.	0.5	3	2	1	4	1	1	3	1	1	0
19	104890.	1.5	3	2	1	4	1	1	3	1	1	0
19	104957.	2.5	3	2	1	4	1	1	3	1	1	0
20	104987.	0.5	3	2	1	4	2	1	3	1	1	0
20	104998.	1.5	3	2	1	4	2	1	3	1	1	0
20	105011.	2.5	3	2	1	4	2	1	3	1	1	0
20	105020.	3.5	3	2	1	4	2	1	3	1	1	0
21	105120.8	1.5	3	2	1	2	2	1	3	1	1	0
21	105144.3	2.5	3	2	1	2	2	1	3	1	1	0
22	106478.6	0.5	4	1	1	2	0	0	3	1	1	0
23	106760.5	0.5	4	1	1	4	2	0	3	1	1	0
23	106780.1	1.5	4	1	1	4	2	0	3	1	1	0
23	106816.1	2.5	4	1	1	4	2	0	3	1	1	0
23	106870.7	3.5	4	1	1	4	2	0	3	1	1	0
24	106928.7	0.5	4	1	1	4	1	0	3	1	1	0
24	106998.3	1.5	4	1	1	4	1	0	3	1	1	0
24	107039.0	2.5	4	1	1	4	1	0	3	1	1	0
25	107447.2	1.5	4	1	1	4	0	0	3	1	1	0
26	109813.5	0.5	5	0	1	4	1	1	3	1	1	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
26	109857.8	1.5	5	0	1	4	1	1	3	1	1	0
26	109927.9	2.5	5	0	1	4	1	1	3	1	1	0
27	110029.2	0.5	5	0	1	2	1	1	3	1	1	0
27	110108.5	1.5	5	0	1	2	1	1	3	1	1	0
28	110196.	1.5	4	2	1	4	3	1	3	1	1	0
28	110214.	2.5	4	2	1	4	3	1	3	1	1	0
28	110248.	3.5	4	2	1	4	3	1	3	1	1	0
28	110304.	4.5	4	2	1	4	3	1	3	1	1	0
29	110221.	0.5	4	2	1	4	2	1	3	1	1	0
29	110275.	1.5	4	2	1	4	2	1	3	1	1	0
29	110288.	2.5	4	2	1	4	2	1	3	1	1	0
29	110339.	3.5	4	2	1	4	2	1	3	1	1	0
30	110221.7	1.5	4	2	1	2	1	1	3	1	1	0
30	110244.6	0.5	4	2	1	2	1	1	3	1	1	0
31	110311.0	2.5	4	2	1	2	3	1	3	1	1	0
31	110373.	3.5	4	2	1	2	3	1	3	1	1	0
32	110325.	0.5	4	2	1	4	1	1	3	1	1	0
32	110351.	1.5	4	2	1	4	1	1	3	1	1	0
32	110403.	2.5	4	2	1	4	1	1	3	1	1	0
33	110448.3	1.5	4	2	1	2	2	1	3	1	1	0
33	110470.5	2.5	4	2	1	2	2	1	3	1	1	0
34	110521.9	1.5	3	1	1	2	2	0	1	2	1	0
34	110545.8	2.5	3	1	1	2	2	0	1	2	1	0
35	112294.8	0.5	3	1	1	2	1	0	1	2	1	0
35	112320.8	1.5	3	1	1	2	1	0	1	2	1	0
36	112565.9	0.5	6	0	1	4	1	1	3	1	1	0
36	112610.6	1.5	6	0	1	4	1	1	3	1	1	0
36	112682.6	2.5	6	0	1	4	1	1	3	1	1	0
37	112735.	0.5	6	0	1	2	1	1	3	1	1	0
37	112823.	1.5	6	0	1	2	1	1	3	1	1	0
38	112751.	1.5	5	2	1	4	3	1	3	1	1	0
38	112763.	2.5	5	2	1	4	3	1	3	1	1	0
38	112799.	3.5	5	2	1	4	3	1	3	1	1	0
38	112862.	4.5	5	2	1	4	3	1	3	1	1	0
39	112801.	1.5	5	2	1	2	1	1	3	1	1	0
39	112816.	0.5	5	2	1	2	1	1	3	1	1	0
40	112820.	2.5	5	2	1	2	3	1	3	1	1	0
40	112890.2	3.5	5	2	1	2	3	1	3	1	1	0
41	112825.	0.5	5	2	1	4	2	1	3	1	1	0
41	112825.	1.5	5	2	1	4	2	1	3	1	1	0
41	112825.	2.5	5	2	1	4	2	1	3	1	1	0
41	112892.	3.5	5	2	1	4	2	1	3	1	1	0
42	112855.	0.5	5	2	1	4	1	1	3	1	1	0
42	112874.	1.5	5	2	1	4	1	1	3	1	1	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
42	112912.	2.5	5	2	1	4	1	1	3	1	1	0
43	112929.2	1.5	5	2	1	2	2	1	3	1	1	0
43	112947.5	2.5	5	2	1	2	2	1	3	1	1	0
44	114015.	0.5	7	0	1	4	1	1	3	1	1	0
44	114072.	1.5	7	0	1	4	1	1	3	1	1	0
44	114146.	2.5	7	0	1	4	1	1	3	1	1	0
45	114130.	0.5	7	0	1	2	1	1	3	1	1	0
45	114163.	1.5	7	0	1	2	1	1	3	1	1	0
46	114160.	1.5	6	2	1	4	3	1	3	1	1	0
46	114160.	2.5	6	2	1	4	3	1	3	1	1	0
46	114160.	3.5	6	2	1	4	3	1	3	1	1	0
46	114160.	4.5	6	2	1	4	3	1	3	1	1	0
47	114182.	0.5	6	2	1	4	2	1	3	1	1	0
47	114182.	1.5	6	2	1	4	2	1	3	1	1	0
47	114182.	2.5	6	2	1	4	2	1	3	1	1	0
47	114248.	3.5	6	2	1	4	2	1	3	1	1	0
48	114193.	1.5	6	2	1	2	1	1	3	1	1	0
48	114209.	0.5	6	2	1	2	1	1	3	1	1	0
49	114196.	2.5	6	2	1	2	3	1	3	1	1	0
49	114275.	3.5	6	2	1	2	3	1	3	1	1	0
50	114232.2	1.5	6	2	1	2	2	1	3	1	1	0
50	114290.5	2.5	6	2	1	2	2	1	3	1	1	0
51	114259.	0.5	6	2	1	4	1	1	3	1	1	0
51	114259.	1.5	6	2	1	4	1	1	3	1	1	0
51	114274.	2.5	6	2	1	4	1	1	3	1	1	0
52	114809.	0.5	8	0	1	4	1	1	3	1	1	0
52	114890.	1.5	8	0	1	4	1	1	3	1	1	0
52	114942.	2.5	8	0	1	4	1	1	3	1	1	0
53	114950.	0.5	8	0	1	2	1	1	3	1	1	0
53	114950.	1.5	8	0	1	2	1	1	3	1	1	0
54	114988.	0.5	7	2	1	4	2	1	3	1	1	0
54	114988.	1.5	7	2	1	4	2	1	3	1	1	0
54	114988.	2.5	7	2	1	4	2	1	3	1	1	0
54	114988.	3.5	7	2	1	4	2	1	3	1	1	0
55	115004.	2.5	7	2	1	2	3	1	3	1	1	0
55	115004.	3.5	7	2	1	2	3	1	3	1	1	0
56	115017.	1.5	7	2	1	2	1	1	3	1	1	0
56	115017.	0.5	7	2	1	2	1	1	3	1	1	0
57	115057.5	1.5	7	2	1	2	2	1	3	1	1	0
57	115100.1	2.5	7	2	1	2	2	1	3	1	1	0
58	115103.	0.5	7	2	1	4	1	1	3	1	1	0
58	115103.	1.5	7	2	1	4	1	1	3	1	1	0
58	115103.	2.5	7	2	1	4	1	1	3	1	1	0
59	115480.	0.5	9	0	1	2	1	1	3	1	1	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
59	115480.	1.5	9	0	1	2	1	1	3	1	1	0
60	115483.	0.5	9	0	1	4	1	1	3	1	1	0
60	115483.	1.5	9	0	1	4	1	1	3	1	1	0
60	115483.	2.5	9	0	1	4	1	1	3	1	1	0
61	115524.	0.5	8	2	1	4	2	1	3	1	1	0
61	115524.	1.5	8	2	1	4	2	1	3	1	1	0
61	115524.	2.5	8	2	1	4	2	1	3	1	1	0
61	115524.	3.5	8	2	1	4	2	1	3	1	1	0
62	115530.	1.5	8	2	1	2	1	1	3	1	1	0
62	115530.	0.5	8	2	1	2	1	1	3	1	1	0
63	115535.	2.5	8	2	1	2	3	1	3	1	1	0
63	115535.	3.5	8	2	1	2	3	1	3	1	1	0
64	115597.	1.5	8	2	1	2	2	1	3	1	1	0
64	115622.	2.5	8	2	1	2	2	1	3	1	1	0
65	115618.	0.5	8	2	1	4	1	1	3	1	1	0
65	115618.	1.5	8	2	1	4	1	1	3	1	1	0
65	115618.	2.5	8	2	1	4	1	1	3	1	1	0
66	115842.	0.5	10	0	1	2	1	1	3	1	1	0
66	115842.	1.5	10	0	1	2	1	1	3	1	1	0
67	115855.	0.5	10	0	1	4	1	1	3	1	1	0
67	115855.	1.5	10	0	1	4	1	1	3	1	1	0
67	115855.	2.5	10	0	1	4	1	1	3	1	1	0
68	115887.	0.5	9	2	1	4	2	1	3	1	1	0
68	115887.	1.5	9	2	1	4	2	1	3	1	1	0
68	115887.	2.5	9	2	1	4	2	1	3	1	1	0
68	115887.	3.5	9	2	1	4	2	1	3	1	1	0
69	115889.	1.5	9	2	1	2	1	1	3	1	1	0
69	115889.	0.5	9	2	1	2	1	1	3	1	1	0
70	115902.	2.5	9	2	1	2	3	1	3	1	1	0
70	115902.	3.5	9	2	1	2	3	1	3	1	1	0
71	115973.	1.5	9	2	1	2	2	1	3	1	1	0
71	115991.	2.5	9	2	1	2	2	1	3	1	1	0
72	115990.	0.5	9	2	1	4	1	1	3	1	1	0
72	115990.	1.5	9	2	1	4	1	1	3	1	1	0
72	115990.	2.5	9	2	1	4	1	1	3	1	1	0
73	116107.	0.5	11	0	1	2	1	1	3	1	1	0
73	116107.	1.5	11	0	1	2	1	1	3	1	1	0
74	116124.	0.5	11	0	1	4	1	1	3	1	1	0
74	116124.	1.5	11	0	1	4	1	1	3	1	1	0
74	116124.	2.5	11	0	1	4	1	1	3	1	1	0
75	116155.	1.5	10	2	1	2	1	1	3	1	1	0
75	116155.	0.5	10	2	1	2	1	1	3	1	1	0
76	116159.	2.5	10	2	1	2	3	1	3	1	1	0
76	116159.	3.5	10	2	1	2	3	1	3	1	1	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
77	116164.	0.5	10	2	1	4	2	1	3	1	1	0
77	116164.	1.5	10	2	1	4	2	1	3	1	1	0
77	116164.	2.5	10	2	1	4	2	1	3	1	1	0
77	116164.	3.5	10	2	1	4	2	1	3	1	1	0
78	116240.	1.5	10	2	1	2	2	1	3	1	1	0
78	116240.	2.5	10	2	1	2	2	1	3	1	1	0
79	116259.	0.5	10	2	1	4	1	1	3	1	1	0
79	116259.	1.5	10	2	1	4	1	1	3	1	1	0
79	116259.	2.5	10	2	1	4	1	1	3	1	1	0
80	116305.	0.5	12	0	1	2	1	1	3	1	1	0
80	116305.	1.5	12	0	1	2	1	1	3	1	1	0
81	116312.	0.5	12	0	1	4	1	1	3	1	1	0
81	116312.	1.5	12	0	1	4	1	1	3	1	1	0
81	116312.	2.5	12	0	1	4	1	1	3	1	1	0
82	116351.	1.5	11	2	1	2	1	1	3	1	1	0
82	116351.	0.5	11	2	1	2	1	1	3	1	1	0
83	116359.	2.5	11	2	1	2	3	1	3	1	1	0
83	116359.	3.5	11	2	1	2	3	1	3	1	1	0
84	116367.	0.5	11	2	1	4	2	1	3	1	1	0
84	116367.	1.5	11	2	1	4	2	1	3	1	1	0
84	116367.	2.5	11	2	1	4	2	1	3	1	1	0
84	116367.	3.5	11	2	1	4	2	1	3	1	1	0
85	116436.	1.5	11	2	1	2	2	1	3	1	1	0
85	116436.	2.5	11	2	1	2	2	1	3	1	1	0
86	116441.	0.5	11	2	1	4	1	1	3	1	1	0
86	116441.	1.5	11	2	1	4	1	1	3	1	1	0
86	116441.	2.5	11	2	1	4	1	1	3	1	1	0
87	116467.	0.5	13	0	1	2	1	1	3	1	1	0
87	116467.	1.5	13	0	1	2	1	1	3	1	1	0
88	116502.	0.5	12	2	1	2	1	1	3	1	1	0
88	116502.	1.5	12	2	1	2	1	1	3	1	1	0
89	116581.	0.5	12	2	1	4	1	1	3	1	1	0
89	116581.	1.5	12	2	1	4	1	1	3	1	1	0
89	116581.	2.5	12	2	1	4	1	1	3	1	1	0
90	116625.	1.5	12	2	1	2	2	1	3	1	1	0
90	116625.	2.5	12	2	1	2	2	1	3	1	1	0

Потенциал ионизации

1	117345.	3	1	1
2	132660.	1	2	1

Продолжение табл. П. 2

АТОМ = N+

Z=2 АТОМW = 14 NTSMAX = 80 NTMAX = 43 NPterm = 1

Комментарий: #S=2S+1, #S''=2S''+1

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	#S	L	π	#S''	L''	π''	sh
1	0.	0.	2	1	1	3	1	1	0	0	0	0
1	49.1	1.	2	1	1	3	1	1	0	0	0	0
1	131.3	2.	2	1	1	3	1	1	0	0	0	0
2	15315.7	2.	2	1	1	1	2	1	0	0	0	0
3	32687.1	0.	2	1	1	1	0	1	0	0	0	0
4	148909.37	0.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0
4	148940.97	1.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0
4	149077.33	2.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0
5	149188.74	1.	3	0	1	1	1	0	2	1	0	0
6	164611.6	1.	3	1	1	1	1	1	2	1	0	0
7	166522.48	1.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
7	166583.26	2.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
7	166679.45	3.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
8	168893.04	1.	3	1	1	3	0	1	2	1	0	0
9	170573.38	0.	3	1	1	3	1	1	2	1	0	0
9	170608.63	1.	3	1	1	3	1	1	2	1	0	0
9	170667.00	2.	3	1	1	3	1	1	2	1	0	0
10	174212.93	2.	3	1	1	1	2	1	2	1	0	0
11	178274.17	0.	3	1	1	1	0	1	2	1	0	0
12	186512.38	2.	3	2	1	3	3	0	2	1	0	0
12	186571.80	3.	3	2	1	3	3	0	2	1	0	0
12	186653.35	4.	3	2	1	3	3	0	2	1	0	0
13	187092.0	2.	3	2	1	1	2	0	2	1	0	0
14	187438.34	1.	3	2	1	3	2	0	2	1	0	0
14	187462.38	2.	3	2	1	3	2	0	2	1	0	0
14	187492.72	3.	3	2	1	3	2	0	2	1	0	0
15	188858.09	2.	3	2	1	3	1	0	2	1	0	0
15	188909.89	1.	3	2	1	3	1	0	2	1	0	0
15	188937.95	0.	3	2	1	3	1	0	2	1	0	0
16	189336.0	3.	3	2	1	1	3	0	2	1	0	0
17	190121.15	1.	3	2	1	1	1	0	2	1	0	0
18	196541.09	0.	4	0	1	3	1	0	2	1	0	0
18	196592.88	1.	4	0	1	3	1	0	2	1	0	0
18	196712.17	2.	4	0	1	3	1	0	2	1	0	0
19	197859.28	1.	4	0	1	1	1	0	2	1	0	0
20	202169.9	1.	4	1	1	1	1	1	2	1	0	0
21	202714.94	1.	4	1	1	3	2	1	2	1	0	0
21	202765.86	2.	4	1	1	3	2	1	2	1	0	0
21	202862.06	3.	4	1	1	3	2	1	2	1	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
22	203164.7	0.	4	1	1	3	1	1	2	1	0	0
22	203188.8	1.	4	1	1	3	1	1	2	1	0	0
22	203259.7	2.	4	1	1	3	1	1	2	1	0	0
23	203532.8	1.	4	1	1	3	0	1	2	1	0	0
24	205350.7	2.	4	1	1	1	2	1	2	1	0	0
25	206327.5	0.	4	1	1	1	0	1	2	1	0	0
26	209675.3	2.	4	2	1	3	3	0	2	1	0	0
26	209739.5	3.	4	2	1	3	3	0	2	1	0	0
26	209825.3	4.	4	2	1	3	3	0	2	1	0	0
27	209926.92	2.	4	2	1	1	2	0	2	1	0	0
28	210239.8	1.	4	2	1	3	2	0	2	1	0	0
28	210266.3	2.	4	2	1	3	2	0	2	1	0	0
28	210301.9	3.	4	2	1	3	2	0	2	1	0	0
29	210705.4	2.	4	2	1	3	1	0	2	1	0	0
29	210751.5	1.	4	2	1	3	1	0	2	1	0	0
29	210777.0	0.	4	2	1	3	1	0	2	1	0	0
30	211030.9	3.	4	3	1	1	3	1	2	1	0	0
31	211033.71	2.	4	3	1	3	3	1	2	1	0	0
31	211057.07	3.	4	3	1	3	3	1	2	1	0	0
31	211061.03	4.	4	3	1	3	3	1	2	1	0	0
32	211104.8	3.	4	2	1	1	3	0	2	1	0	0
33	211288.02	3.	4	3	1	3	4	1	2	1	0	0
33	211295.65	4.	4	3	1	3	4	1	2	1	0	0
33	211390.77	5.	4	3	1	3	4	1	2	1	0	0
34	211335.5	1.	4	2	1	1	1	0	2	1	0	0
35	211402.89	4.	4	3	1	1	4	1	2	1	0	0
36	211411.25	3.	4	3	1	3	2	1	2	1	0	0
36	211416.20	2.	4	3	1	3	2	1	2	1	0	0
36	211487.28	1.	4	3	1	3	2	1	2	1	0	0
37	211491.16	2.	4	3	1	1	2	1	2	1	0	0
38	214212.4	0.	5	0	1	3	1	0	2	1	0	0
38	214258.2	1.	5	0	1	3	1	0	2	1	0	0
38	214385.3	2.	5	0	1	3	1	0	2	1	0	0
39	214828.0	1.	5	0	1	1	1	0	2	1	0	0
40	221070.2	3.	5	3	1	3	3	1	2	1	0	0
40	221074.3	4.	5	3	1	3	3	1	2	1	0	0
41	221137.6	3.	5	2	1	1	3	0	2	1	0	0
42	221227.7	3.	5	3	1	3	4	1	2	1	0	0
42	221232.7	4.	5	3	1	3	4	1	2	1	0	0
42	221302.2	5.	5	3	1	3	4	1	2	1	0	0
43	221312.1	4.	5	3	1	1	4	1	2	1	0	0

 Потенциал ионизации

1 238846.7

2 1 0

Продолжение табл. П. 2

АТОМ = O

Z = 1 АТОМW = 16 NTSMAX = 170 NTMAX = 75 NPterm = 3

Комментарий: #S = 2S + 1, #S'' = 2S'' + 1

n'	E (n, l)	J	n	l	q	#S	L	π	#S''	L''	π''	sh
1	0.	2.	2	1	4	3	1	1	0	0	0	0
1	158.5	1.	2	1	4	3	1	1	0	0	0	0
1	226.5	0.	2	1	4	3	1	1	0	0	0	0
2	15867.7	2.	2	1	4	1	2	1	0	0	0	0
3	33792.4	0.	2	1	4	1	0	1	0	0	0	0
4	73767.81	2.	3	0	1	5	0	0	4	0	0	0
5	76794.69	1.	3	0	1	3	0	0	4	0	0	0
6	86625.35	1.	3	1	1	5	1	1	4	0	0	0
6	86627.37	2.	3	1	1	5	1	1	4	0	0	0
6	86631.04	3.	3	1	1	5	1	1	4	0	0	0
7	88630.84	2.	3	1	1	3	1	1	4	0	0	0
7	88630.30	1.	3	1	1	3	1	1	4	0	0	0
7	88631.00	0.	3	1	1	3	1	1	4	0	0	0
8	95476.43	2.	4	0	1	5	0	0	4	0	0	0
9	96225.5	1.	4	0	1	3	0	0	4	0	0	0
10	97420.24	4.	3	2	1	5	2	0	4	0	0	0
10	97420.37	3.	3	2	1	5	2	0	4	0	0	0
10	97420.37	2.	3	2	1	5	2	0	4	0	0	0
10	97420.50	2.	3	2	1	5	2	0	4	0	0	0
10	97420.50	1.	3	2	1	5	2	0	4	0	0	0
10	97420.50	0.	3	2	1	5	2	0	4	0	0	0
11	97488.14	3.	3	2	1	3	2	0	4	0	0	0
11	97488.14	2.	3	2	1	3	2	0	4	0	0	0
11	97488.14	1.	3	2	1	3	2	0	4	0	0	0
12	99092.64	1.	4	1	1	5	1	1	4	0	0	0
12	99093.31	2.	4	1	1	5	1	1	4	0	0	0
12	99094.52	3.	4	1	1	5	1	1	4	0	0	0
13	99680.4	2.	4	1	1	3	1	1	4	0	0	0
13	99680.4	1.	4	1	1	3	1	1	4	0	0	0
13	99680.4	0.	4	1	1	3	1	1	4	0	0	0
14	101135.04	3.	3	0	1	3	2	0	2	2	0	0
14	101147.21	2.	3	0	1	3	2	0	2	2	0	0
14	101155.10	1.	3	0	1	3	2	0	2	2	0	0
15	102116.21	2.	5	0	1	5	0	0	4	0	0	0
16	102411.65	1.	5	0	1	3	0	0	4	0	0	0
17	102661.63	2.	3	0	1	1	2	0	2	2	0	0
18	102865.09	4.	4	2	1	5	2	0	4	0	0	0
18	102865.09	3.	4	2	1	5	2	0	4	0	0	0
18	102865.09	2.	4	2	1	5	2	0	4	0	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
18	102865.09	1.	4	2	1	5	2	0	4	0	0	0
18	102865.09	0.	4	2	1	5	2	0	4	0	0	0
19	102908.14	3.	4	2	1	3	2	0	4	0	0	0
19	102908.14	2.	4	2	1	3	2	0	4	0	0	0
19	102908.14	1.	4	2	1	3	2	0	4	0	0	0
20	103869.4	2.	5	1	1	3	1	1	4	0	0	0
20	103869.4	1.	5	1	1	3	1	1	4	0	0	0
20	103869.4	0.	5	1	1	3	1	1	4	0	0	0
21	105019.	2.	6	0	1	5	0	0	4	0	0	0
22	105164.90	1.	6	0	1	3	0	0	4	0	0	0
23	105385.3	4.	5	2	1	5	2	0	4	0	0	0
23	105385.3	3.	5	2	1	5	2	0	4	0	0	0
23	105385.3	2.	5	2	1	5	2	0	4	0	0	0
23	105385.3	1.	5	2	1	5	2	0	4	0	0	0
23	105385.3	0.	5	2	1	5	2	0	4	0	0	0
24	105408.58	3.	5	2	1	3	2	0	4	0	0	0
24	105408.58	2.	5	2	1	3	2	0	4	0	0	0
24	105408.58	1.	5	2	1	3	2	0	4	0	0	0
25	105911.3	2.	6	1	1	3	1	1	4	0	0	0
25	105911.3	1.	6	1	1	3	1	1	4	0	0	0
25	105911.3	0.	6	1	1	3	1	1	4	0	0	0
26	106545.1	2.	7	0	1	5	0	0	4	0	0	0
27	106627.9	1.	7	0	1	3	0	0	4	0	0	0
28	106751.2	4.	6	2	1	5	2	0	4	0	0	0
28	106751.2	3.	6	2	1	5	2	0	4	0	0	0
28	106751.2	2.	6	2	1	5	2	0	4	0	0	0
28	106751.2	1.	6	2	1	5	2	0	4	0	0	0
28	106751.2	0.	6	2	1	5	2	0	4	0	0	0
29	106765.8	3.	6	2	1	3	2	0	4	0	0	0
29	106765.8	2.	6	2	1	3	2	0	4	0	0	0
29	106765.8	1.	6	2	1	3	2	0	4	0	0	0
30	107445.4	2.	8	0	1	5	0	0	4	0	0	0
31	107497.1	1.	8	0	1	3	0	0	4	0	0	0
32	107573.1	4.	7	2	1	5	2	0	4	0	0	0
32	107573.1	3.	7	2	1	5	2	0	4	0	0	0
32	107573.1	2.	7	2	1	5	2	0	4	0	0	0
32	107573.1	1.	7	2	1	5	2	0	4	0	0	0
32	107573.1	0.	7	2	1	5	2	0	4	0	0	0
33	107582.7	3.	7	2	1	3	2	0	4	0	0	0
33	107582.7	2.	7	2	1	3	2	0	4	0	0	0
33	107582.7	1.	7	2	1	3	2	0	4	0	0	0
34	108021.4	2.	9	0	1	5	0	0	4	0	0	0
35	108057.6	1.	9	0	1	3	0	0	4	0	0	0
36	108105.7	4.	8	2	1	5	2	0	4	0	0	0
36	108105.7	3.	8	2	1	5	2	0	4	0	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
36	108105.7	2.	8	2	1	5	2	0	4	0	0	0
36	108105.7	1.	8	2	1	5	2	0	4	0	0	0
36	108105.7	0.	8	2	1	5	2	0	4	0	0	0
37	108116.6	3.	8	2	1	3	2	0	4	0	0	0
37	108116.6	2.	8	2	1	3	2	0	4	0	0	0
37	108116.6	1.	8	2	1	3	2	0	4	0	0	0
38	108412.	2.	10	0	1	5	0	0	4	0	0	0
39	108436.1	1.	10	0	1	3	0	0	4	0	0	0
40	108470.2	4.	9	2	1	5	2	0	4	0	0	0
40	108470.2	3.	9	2	1	5	2	0	4	0	0	0
40	108470.2	2.	9	2	1	5	2	0	4	0	0	0
40	108470.2	1.	9	2	1	5	2	0	4	0	0	0
40	108470.2	0.	9	2	1	5	2	0	4	0	0	0
41	108477.8	3.	9	2	1	3	2	0	4	0	0	0
41	108477.8	2.	9	2	1	3	2	0	4	0	0	0
41	108477.8	1.	9	2	1	3	2	0	4	0	0	0
42	108688.4	2.	11	0	1	5	0	0	4	0	0	0
43	108707.3	1.	11	0	1	3	0	0	4	0	0	0
44	108731.5	4.	10	2	1	5	2	0	4	0	0	0
44	108731.5	3.	10	2	1	5	2	0	4	0	0	0
44	108731.5	2.	10	2	1	5	2	0	4	0	0	0
44	108731.5	1.	10	2	1	5	2	0	4	0	0	0
44	108731.5	0.	10	2	1	5	2	0	4	0	0	0
45	108734.4	3.	10	2	1	3	2	0	4	0	0	0
45	108734.4	2.	10	2	1	3	2	0	4	0	0	0
45	108734.4	1.	10	2	1	3	2	0	4	0	0	0
46	113294.42	3.	3	2	1	3	2	1	2	2	0	0
46	113294.55	2.	3	2	1	3	2	1	2	2	0	0
46	113298.01	1.	3	2	1	3	2	1	2	2	0	0
47	113714.06	4.	3	2	1	3	3	1	2	2	0	0
47	113721.06	3.	3	2	1	3	3	1	2	2	0	0
47	113726.81	2.	3	2	1	3	3	1	2	2	0	0
48	113910.20	2.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0
48	113920.63	1.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0
48	113926.80	0.	3	0	1	3	1	0	2	1	0	0
49	113995.81	3.	3	1	1	1	3	1	2	2	0	0
50	115918.30	1.	3	0	1	1	1	0	2	1	0	0
51	116630.51	2.	3	1	1	1	2	1	2	2	0	0
52	122798.7	2.	4	0	1	1	2	0	2	2	0	0
53	123296.6	2.	3	2	1	3	1	0	2	2	0	0
53	123355.2	1.	3	2	1	3	1	0	2	2	0	0
53	123386.9	0.	3	2	1	3	1	0	2	2	0	0
54	124213.18	4.	3	2	1	3	3	0	2	2	0	0
54	124213.18	3.	3	2	1	3	3	0	2	2	0	0
54	124213.18	2.	3	2	1	3	3	0	2	2	0	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
55	124238.21	4.	3	2	1	1	4	0	2	2	0	0
56	124239.66	5.	3	2	1	3	4	0	2	2	0	0
56	124258.37	4.	3	2	1	3	4	0	2	2	0	0
56	124252.52	3.	3	2	1	3	4	0	2	2	0	0
57	124326.32	3.	3	2	1	1	3	0	2	2	0	0
58	125774.51	3.	4	1	1	3	2	1	2	2	0	0
58	125782.09	2.	4	1	1	3	2	1	2	2	0	0
58	125787.14	1.	4	1	1	3	2	1	2	2	0	0
59	127281.85	3.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
59	127287.62	2.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
59	127290.93	1.	3	1	1	3	2	1	2	1	0	0
60	127667.85	1.	3	1	1	1	1	1	2	1	0	0
61	128595.02	2.	3	1	1	1	2	1	2	1	0	0
62	129134.	2.	5	0	1	1	2	0	2	2	0	0
63	129666.55	4.	4	2	1	3	3	0	2	2	0	0
63	129666.55	3.	4	2	1	3	3	0	2	2	0	0
63	129666.55	2.	4	2	1	3	3	0	2	2	0	0
64	129679.49	4.	4	2	1	1	4	0	2	2	0	0
65	129680.14	5.	4	2	1	3	4	0	2	2	0	0
65	129699.16	4.	4	2	1	3	4	0	2	2	0	0
65	129693.08	3.	4	2	1	3	4	0	2	2	0	0
66	129736.60	3.	4	2	1	1	3	0	2	2	0	0
67	129969.60	2.	4	2	1	3	1	0	2	2	0	0
67	129979.04	1.	4	2	1	3	1	0	2	2	0	0
67	129984.15	0.	4	2	1	3	1	0	2	2	0	0
68	130943.21	0.	3	1	1	1	0	1	2	1	0	0
69	131927.	2.	6	0	1	1	2	0	2	2	0	0
70	132190.70	4.	5	2	1	3	3	0	2	2	0	0
70	132190.70	3.	5	2	1	3	3	0	2	2	0	0
70	132190.70	2.	5	2	1	3	3	0	2	2	0	0
71	132197.6	4.	5	2	1	1	4	0	2	2	0	0
72	132198.1	5.	5	2	1	3	4	0	2	2	0	0
72	132217.8	4.	5	2	1	3	4	0	2	2	0	0
72	132217.8	3.	5	2	1	3	4	0	2	2	0	0
73	132310.	2.	5	2	1	3	1	0	2	2	0	0
73	132310.	1.	5	2	1	3	1	0	2	2	0	0
73	132310.	0.	5	2	1	3	1	0	2	2	0	0
74	133413.	2.	7	0	1	1	2	0	2	2	0	0
75	133618.	2.	6	2	1	3	1	0	2	2	0	0
75	133618.	1.	6	2	1	3	1	0	2	2	0	0
75	133618.	0.	6	2	1	3	1	0	2	2	0	0

Потенциал ионизации

1	109836.	4	0	0
2	136665.	2	2	0
3	150304.	2	1	0

Окончание табл. П. 2

АТОМ = O⁺

Z = 2 ATOMW = 16 NTSMAX = 128 NTMAX = 52 NPterm = 1

Комментарий: #S = 2S + 1, #S'' = 2S'' + 1

n'	E(n, l)	J	n	l	q	#S	L	π	#S''	L''	π''	sh
1	0.	1.5	2	1	3	4	0	0	0	0	0	0
2	26808.4	2.5	2	1	3	2	2	0	0	0	0	0
2	26829.4	1.5	2	1	3	2	2	0	0	0	0	0
3	40466.9	1.5	2	1	3	2	1	0	0	0	0	0
3	40468.4	0.5	2	1	3	2	1	0	0	0	0	0
4	119837.7	2.5	2	1	4	4	1	1	0	0	0	0
4	120001.1	1.5	2	1	4	4	1	1	0	0	0	0
4	120083.5	0.5	2	1	4	4	1	1	0	0	0	0
5	165987.7	2.5	2	1	4	2	2	1	0	0	0	0
5	165996.0	1.5	2	1	4	2	2	1	0	0	0	0
6	185235.36	0.5	3	0	1	4	1	1	3	1	1	0
6	185340.68	1.5	3	0	1	4	1	1	3	1	1	0
6	185499.20	2.5	3	0	1	4	1	1	3	1	1	0
7	188888.38	0.5	3	0	1	2	1	1	3	1	1	0
7	189068.37	1.5	3	0	1	2	1	1	3	1	1	0
8	195710.4	0.5	2	1	4	2	0	1	0	0	0	0
9	203942.21	0.5	3	1	1	2	0	0	3	1	1	0
10	206730.8	0.5	3	1	1	4	2	0	3	1	1	0
10	206786.34	1.5	3	1	1	4	2	0	3	1	1	0
10	206877.90	2.5	3	1	1	4	2	0	3	1	1	0
10	207002.52	3.5	3	1	1	4	2	0	3	1	1	0
11	208346.17	0.5	3	1	1	4	1	0	3	1	1	0
11	208392.27	1.5	3	1	1	4	1	0	3	1	1	0
11	208484.24	2.5	3	1	1	4	1	0	3	1	1	0
12	211521.98	1.5	3	1	1	2	2	0	3	1	1	0
12	211712.66	2.5	3	1	1	2	2	0	3	1	1	0
13	212161.94	1.5	3	1	1	4	0	0	3	1	1	0
14	212593.2	1.5	2	1	4	2	1	1	0	0	0	0
14	212762.4	0.5	2	1	4	2	1	1	0	0	0	0
15	214169.74	0.5	3	1	1	2	1	0	3	1	1	0
15	214229.48	1.5	3	1	1	2	1	0	3	1	1	0
16	231296.05	1.5	3	2	1	4	3	1	3	1	1	0
16	231350.08	2.5	3	2	1	4	3	1	3	1	1	0
16	231427.99	3.5	3	2	1	4	3	1	3	1	1	0
16	231530.26	4.5	3	2	1	4	3	1	3	1	1	0
17	232462.83	2.5	3	2	1	4	1	1	3	1	1	0
17	232536.06	1.5	3	2	1	4	1	1	3	1	1	0
17	232602.57	0.5	3	2	1	4	1	1	3	1	1	0
18	232711.7	0.5	3	2	1	4	2	1	3	1	1	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
18	232745.98	1.5	3	2	1	4	2	1	3	1	1	0
18	232747.51	2.5	3	2	1	4	2	1	3	1	1	0
18	232753.86	3.5	3	2	1	4	2	1	3	1	1	0
19	232796.27	2.5	3	2	1	2	3	1	3	1	1	0
19	232959.26	3.5	3	2	1	2	3	1	3	1	1	0
20	233430.1	1.5	3	2	1	2	1	1	3	1	1	0
20	233544.09	0.5	3	2	1	2	1	1	3	1	1	0
21	234402.48	1.5	3	2	1	2	2	1	3	1	1	0
21	234454.45	2.5	3	2	1	2	2	1	3	1	1	0
22	238626.32	0.5	4	0	1	4	1	1	3	1	1	0
22	238731.54	1.5	4	0	1	4	1	1	3	1	1	0
22	238892.96	2.5	4	0	1	4	1	1	3	1	1	0
23	240328.75	0.5	4	0	1	2	1	1	3	1	1	0
23	240516.28	1.5	4	0	1	2	1	1	3	1	1	0
24	245767.80	0.5	4	1	1	4	2	0	3	1	1	0
24	245816.29	1.5	4	1	1	4	2	0	3	1	1	0
24	245902.85	2.5	4	1	1	4	2	0	3	1	1	0
24	246028.95	3.5	4	1	1	4	2	0	3	1	1	0
25	248009.1	1.5	4	1	1	2	2	0	3	1	1	0
25	248185.3	2.5	4	1	1	2	2	0	3	1	1	0
26	248425.35	0.5	4	1	1	2	1	0	3	1	1	0
26	248514.23	1.5	4	1	1	2	1	0	3	1	1	0
27	254481.5	3.5	4	2	1	4	3	1	3	1	1	0
27	254590.7	4.5	4	2	1	4	3	1	3	1	1	0
28	254895.2	2.5	4	2	1	4	2	1	3	1	1	0
29	255104.6	2.5	4	2	1	4	1	1	3	1	1	0
29	255140.9	1.5	4	2	1	4	1	1	3	1	1	0
29	255162.6	0.5	4	2	1	4	1	1	3	1	1	0
30	255172.5	1.5	4	2	1	2	1	1	3	1	1	0
30	255281.4	0.5	4	2	1	2	1	1	3	1	1	0
31	255301.3	2.5	4	2	1	2	3	1	3	1	1	0
31	255465.2	3.5	4	2	1	2	3	1	3	1	1	0
32	255689.6	2.5	4	3	1	2	2	0	3	1	1	0
32	255812.2	1.5	4	3	1	2	2	0	3	1	1	0
33	255691.4	3.5	4	3	1	4	2	0	3	1	1	0
33	255813.1	2.5	4	3	1	4	2	0	3	1	1	0
33	255913.0	1.5	4	3	1	4	2	0	3	1	1	0
33	255912.0	0.5	4	3	1	4	2	0	3	1	1	0
34	255755.8	2.5	4	3	1	4	4	0	3	1	1	0
34	255759.4	3.5	4	3	1	4	4	0	3	1	1	0
34	255827.6	4.5	4	3	1	4	4	0	3	1	1	0
34	255977.5	5.5	4	3	1	4	4	0	3	1	1	0
35	255829.4	3.5	4	3	1	2	4	0	3	1	1	0
35	255983.6	4.5	4	3	1	2	4	0	3	1	1	0
36	255843.1	1.5	4	2	1	2	2	1	3	1	1	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
36	255897.2	2.5	4	2	1	2	2	1	3	1	1	0
37	256083.5	1.5	4	3	1	4	3	0	3	1	1	0
37	256087.6	2.5	4	3	1	4	3	0	3	1	1	0
37	256123.1	3.5	4	3	1	4	3	0	3	1	1	0
37	256136.2	4.5	4	3	1	4	3	0	3	1	1	0
38	256125.8	2.5	4	3	1	2	3	0	3	1	1	0
38	256143.3	3.5	4	3	1	2	3	0	3	1	1	0
39	257693.7	0.5	5	0	1	4	1	1	3	1	1	0
39	257797.9	1.5	5	0	1	4	1	1	3	1	1	0
39	257963.8	2.5	5	0	1	4	1	1	3	1	1	0
40	258408.6	0.5	5	0	1	2	1	1	3	1	1	0
40	258601.7	1.5	5	0	1	2	1	1	3	1	1	0
41	260959.0	1.5	5	1	1	4	2	0	3	1	1	0
41	261042.0	2.5	5	1	1	4	2	0	3	1	1	0
41	261180.0	3.5	5	1	1	4	2	0	3	1	1	0
42	261261.7	1.5	5	1	1	4	1	0	3	1	1	0
42	261354.3	2.5	5	1	1	4	1	0	3	1	1	0
43	261697.5	1.5	5	1	1	2	2	0	3	1	1	0
43	261869.4	2.5	5	1	1	2	2	0	3	1	1	0
44	265220.3	0.5	5	2	1	4	2	1	3	1	1	0
44	265220.3	1.5	5	2	1	4	2	1	3	1	1	0
44	265220.3	2.5	5	2	1	4	2	1	3	1	1	0
44	265220.3	3.5	5	2	1	4	2	1	3	1	1	0
45	265431.5	2.5	5	2	1	4	1	1	3	1	1	0
45	265468.2	1.5	5	2	1	4	1	1	3	1	1	0
45	265468.2	0.5	5	2	1	4	1	1	3	1	1	0
46	265578.	3.5	5	2	1	2	3	1	3	1	1	0
47	265639.	3.5	5	3	1	4	2	0	3	1	1	0
47	265705.	2.5	5	3	1	4	2	0	3	1	1	0
47	265762.	1.5	5	3	1	4	2	0	3	1	1	0
47	265859.	0.5	5	3	1	4	2	0	3	1	1	0
48	265665.	2.5	5	3	1	4	4	0	3	1	1	0
48	265691.	3.5	5	3	1	4	4	0	3	1	1	0
48	265761.	4.5	5	3	1	4	4	0	3	1	1	0
48	265925.	5.5	5	3	1	4	4	0	3	1	1	0
49	265763.	3.5	5	3	1	2	4	0	3	1	1	0
50	265856.	1.5	5	2	1	1	2	2	3	1	1	0
50	265856.	2.5	5	2	1	1	2	2	3	1	1	0
51	265928.	1.5	5	3	1	4	3	0	3	1	1	0
51	265961.	2.5	5	3	1	4	3	0	3	1	1	0
51	265985.	3.5	5	3	1	4	3	0	3	1	1	0
51	265999.	4.5	5	3	1	4	3	0	3	1	1	0
52	265988.	2.5	5	3	1	2	3	0	3	1	1	0
52	265999.	3.5	5	3	1	2	3	0	3	1	1	0

n'	$E(n, l)$	J	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''	sh
===== Потенциал ионизации =====												
1	283550.9								3	1	1	

Таблица П.3

Электронная база данных атомных термов

АТОМ = C

ZАТОМ = 1. NTMAX = 67 NPTER = 1

Комментарий: $\#S = 2S + 1$, $\#S'' = 2S'' + 1$

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
1	.2963334E+02	9	2	1	2	3	1	1	0	0	0
2	.1019370E+05	5	2	1	2	1	2	1	0	0	0
3	.2164840E+05	1	2	1	2	1	0	1	0	0	0
4	.3373520E+05	5	2	1	3	5	0	0	0	0	0
5	.6037338E+05	9	3	0	1	3	1	0	2	1	0
6	.6198220E+05	3	3	0	1	1	1	0	2	1	0
7	.6409080E+05	15	2	1	3	3	2	0	0	0	0
8	.6885800E+05	3	3	1	1	1	1	1	2	1	0
9	.6972234E+05	15	3	1	1	3	2	1	2	1	0
10	.7074426E+05	3	3	1	1	3	0	1	2	1	0
11	.7137522E+05	9	3	1	1	3	1	1	2	1	0
12	.7261106E+05	5	3	1	1	1	2	1	2	1	0
13	.7397623E+05	1	3	1	1	1	0	1	2	1	0
14	.7525630E+05	9	2	1	3	3	1	0	0	0	0
15	.7768050E+05	5	3	2	1	1	2	0	2	1	0
16	.7813313E+05	9	4	0	1	3	1	0	2	1	0
17	.7822664E+05	21	3	2	1	3	3	0	2	1	0
18	.7830996E+05	15	3	2	1	3	2	0	2	1	0
19	.7833800E+05	3	4	0	1	1	1	0	2	1	0
20	.7853100E+05	7	3	2	1	1	3	0	2	1	0
21	.7872791E+05	3	3	2	1	1	1	0	2	1	0
22	.7931511E+05	9	3	2	1	3	1	0	2	1	0
23	.8020277E+05	15	4	1	1	3	2	1	2	1	0
24	.8056357E+05	3	4	1	1	1	1	1	2	1	0
25	.8110570E+05	3	4	1	1	3	0	1	2	1	0
26	.8133477E+05	9	4	1	1	3	1	0	2	1	0
27	.8177036E+05	5	4	1	1	1	2	1	2	1	0
28	.8225231E+05	1	4	1	1	1	0	1	2	1	0
29	.8350000E+05	5	4	2	1	1	2	0	2	1	0
30	.8376100E+05	21	4	2	1	3	3	0	2	1	0
31	.8384027E+05	15	4	2	1	3	2	0	2	1	0

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
32	.8388250E+05	3	5	0	1	1	1	0	2	1	0
33	.8394900E+05	7	4	2	1	1	3	0	2	1	0
34	.8403200E+05	3	4	2	1	1	1	0	2	1	0
35	.8410613E+05	8	4	2	1	3	1	0	2	1	0
36	.8485213E+05	3	5	1	1	1	1	1	2	1	0
37	.8497195E+05	12	5	1	1	3	2	1	2	1	0
38	.8540038E+05	5	5	1	1	1	2	1	2	1	0
39	.8562584E+05	1	5	1	1	1	0	1	2	1	0
40	.8618700E+05	5	5	2	1	1	2	0	2	1	0
41	.8632361E+05	12	5	2	1	3	3	0	2	1	0
42	.8638571E+05	12	5	2	1	3	2	0	2	1	0
43	.8641396E+05	3	6	0	1	1	1	0	2	1	0
44	.8645000E+05	7	5	2	1	1	3	0	2	1	0
45	.8649100E+05	3	5	2	1	1	1	0	2	1	0
46	.8650888E+05	8	5	2	1	3	1	0	2	1	0
47	.8763200E+05	5	6	2	1	1	2	0	2	1	0
48	.8771009E+05	12	6	2	1	3	3	0	2	1	0
49	.8776425E+05	12	6	2	1	3	2	0	2	1	0
50	.8779529E+05	3	7	0	1	1	1	0	2	1	0
51	.8780700E+05	7	6	2	1	1	3	0	2	1	0
52	.8783338E+05	8	6	2	1	3	1	0	2	1	0
53	.8783129E+05	3	6	2	1	1	1	0	2	1	0
54	.8854484E+05	12	7	2	1	3	3	0	2	1	0
55	.8860700E+05	7	7	2	1	3	2	0	2	1	0
56	.8862400E+05	7	7	2	1	1	3	0	2	1	0
57	.8863244E+05	3	7	2	1	1	1	0	2	1	0
58	.8863900E+05	5	7	2	1	3	1	0	2	1	0
59	.8908141E+05	12	8	2	1	3	3	0	2	1	0
60	.8914600E+05	7	8	2	1	3	2	0	2	1	0
61	.8915500E+05	7	8	2	1	1	3	0	2	1	0
62	.8915800E+05	5	8	2	1	3	1	0	2	1	0
63	.8945000E+05	5	9	2	1	3	3	0	2	1	0
64	.8951400E+05	7	9	2	1	3	2	0	2	1	0
65	.8951700E+05	7	9	2	1	1	3	0	2	1	0
66	.8977900E+05	7	10	2	1	3	2	0	2	1	0
67	.8996840E+05	7	11	2	1	3	2	0	2	1	0

Потенциал ионизации

1	.9087830E+05	2	1	0
---	--------------	---	---	---

Продолжение табл. П.3

АТОМ = C+

ZАТОМ = 2. NTMAX = 64 NPTER = 2

Комментарий: #S=2S+1, #S''=2S''+1

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	#S	L	π	#S''	L''	π''
1	.4266667E+02	6	2	1	1	2	1	0	1	0	1
2	.4303265E+05	12	2	1	2	4	1	1	0	0	0
3	.7493182E+05	10	2	1	2	2	2	1	0	0	0
4	.9649410E+05	4	2	1	2	2	0	1	0	0	0
5	.1106526E+06	6	2	1	2	2	1	1	0	0	0
6	.1165379E+06	2	3	0	1	2	0	1	1	0	1
7	.1317321E+06	6	3	1	1	2	1	0	1	0	1
8	.1420244E+06	4	2	1	3	4	0	0	0	0	0
9	.1455508E+06	10	3	2	1	2	2	1	1	0	1
10	.1504648E+06	10	2	1	3	2	2	0	0	0	0
11	.1572344E+06	4	4	0	1	2	0	1	1	0	1
12	.1625226E+06	6	4	1	1	2	1	0	1	0	1
13	.1670070E+06	12	3	0	1	4	1	0	3	1	0
14	.1681242E+06	10	4	2	1	2	2	1	1	0	1
15	.1687440E+06	6	2	1	3	2	1	0	0	0	0
16	.1689790E+06	14	4	3	1	2	3	0	1	0	1
17	.1733482E+06	2	5	0	1	2	0	1	1	0	1
18	.1752928E+06	6	5	1	1	2	1	0	1	0	1
19	.1782119E+06	6	3	0	1	2	1	0	3	1	0
20	.1784948E+06	6	5	2	1	2	2	1	1	0	1
21	.1789565E+06	14	5	3	1	2	3	0	1	0	1
22	.1812580E+06	2	6	0	1	2	0	1	1	0	1
23	.1817398E+06	20	3	1	1	4	2	1	3	1	0
24	.1820380E+06	6	3	1	1	2	1	1	3	1	0
25	.1840649E+06	6	6	2	1	2	2	1	1	0	1
26	.1843762E+06	14	6	3	1	2	3	0	1	0	1
27	.1846887E+06	4	3	1	1	4	0	1	3	1	0
28	.1864498E+06	12	3	1	1	4	1	1	3	1	0
29	.1885993E+06	10	3	1	1	2	2	1	3	1	0
30	.1945719E+06	2	3	1	1	2	0	1	3	1	0
31	.1957855E+06	28	3	2	1	4	3	0	3	1	0
32	.1965715E+06	20	3	2	1	4	2	0	3	1	0
33	.1984329E+06	10	3	2	1	2	2	0	3	1	0
34	.1988551E+06	12	3	2	1	4	1	0	3	1	0
35	.1999659E+06	14	3	2	1	2	3	0	3	1	0
36	.2021883E+06	6	3	2	1	2	1	0	3	1	0

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
37	.2095843E+06	12	4	0	1	4	1	0	3	1	0
38	.2144205E+06	10	4	1	1	2	1	1	3	1	0
39	.2147999E+06	20	4	1	1	4	2	1	3	1	0
40	.2157656E+06	4	4	1	1	4	0	1	3	1	0
41	.2163898E+06	10	4	1	1	4	1	1	3	1	0
42	.2169270E+06	6	4	1	1	2	2	1	3	1	0
43	.2195896E+06	28	4	2	1	4	3	0	3	1	0
44	.2201394E+06	18	4	2	1	4	2	0	3	1	0
45	.2206090E+06	10	4	2	1	2	2	0	3	1	0
46	.2208207E+06	12	4	2	1	4	1	0	3	1	0
47	.2210949E+06	14	4	3	1	2	3	1	3	1	0
48	.2211069E+06	18	4	3	1	4	3	1	3	1	0
49	.2215020E+06	8	4	2	1	2	3	0	3	1	0
50	.2215742E+06	36	4	3	1	4	4	1	3	1	0
51	.2216089E+06	18	4	3	1	2	4	1	3	1	0
52	.2217179E+06	18	4	3	1	4	2	1	3	1	0
53	.2217259E+06	10	4	3	1	2	2	1	3	1	0
54	.2222681E+06	6	4	2	1	2	1	0	3	1	0
55	.2258130E+06	6	5	0	1	4	1	0	3	1	0
56	.2279010E+06	6	5	1	1	2	1	0	3	1	0
57	.2307630E+06	8	5	2	1	4	2	0	3	1	0
58	.2310500E+06	6	5	2	1	4	1	0	3	1	0
59	.2312210E+06	14	5	3	1	2	3	1	3	1	0
60	.2312268E+06	10	5	3	1	4	3	1	3	1	0
61	.2314993E+06	12	5	3	1	4	4	1	3	1	0
62	.2315204E+06	8	5	3	1	4	2	1	3	1	0
63	.2364440E+06	8	6	2	1	4	2	0	3	1	0
64	.2366050E+06	6	6	2	1	4	1	0	3	1	0

 Потенциал ноннзации

1	.1966590E+06								1	0	1
2	.2489740E+06								3	1	0

Продолжение табл. П.3

АТОМ = N

ZАТОМ = 1.

NTMAX = 90

NPTER = 2

Комментарий: $\#S = 2S + 1$, $\#S'' = 2S'' + 1$

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
1	.0000000E+00	4	2	1	3	4	0	0	0	0	0
2	.1922620E+05	10	2	1	3	2	2	0	0	0	0
3	.2884000E+05	6	2	1	3	2	1	0	0	0	0
4	.8333702E+05	12	3	0	1	4	1	1	3	1	1

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
5	.8619260E+05	6	3	0	1	2	1	1	3	1	1
6	.8813472E+05	12	2	1	4	4	1	1	0	0	0
7	.9358230E+05	2	3	1	1	3	1	0	3	1	1
8	.9483905E+05	20	3	1	1	4	2	0	3	1	1
9	.9551099E+05	12	3	1	1	4	1	0	3	1	1
10	.9675170E+05	4	3	1	1	4	0	0	3	1	1
11	.9683380E+05	10	3	1	1	2	2	0	3	1	1
12	.9779390E+05	6	3	1	1	2	1	0	3	1	1
13	.9966220E+05	10	3	1	1	2	2	1	1	2	1
14	.1036941E+06	12	4	0	1	4	1	1	3	1	1
15	.1041990E+06	6	4	0	1	2	1	1	3	1	1
16	.1046286E+06	6	3	2	1	2	1	1	3	1	1
17	.1047211E+06	28	3	2	1	4	3	1	3	1	1
18	.1048519E+06	14	3	2	1	2	3	1	3	1	1
19	.1049192E+06	12	3	2	1	4	1	1	3	1	1
20	.1050096E+06	20	3	2	1	4	2	1	3	1	1
21	.1051349E+06	10	3	2	1	2	2	1	3	1	1
22	.1064786E+06	2	4	1	1	2	0	0	3	1	1
23	.1068252E+06	20	4	1	1	4	2	0	3	1	1
24	.1070071E+06	12	4	1	1	4	1	0	3	1	1
25	.1074472E+06	4	4	1	1	4	0	0	3	1	1
26	.1098855E+06	12	5	0	1	4	1	1	3	1	1
27	.1100821E+06	6	5	0	1	2	1	1	3	1	1
28	.1102533E+06	28	4	2	1	4	3	1	3	1	1
29	.1102991E+06	20	4	2	1	4	2	1	3	1	1
30	.1102293E+06	6	4	2	1	2	1	1	3	1	1
31	.1103464E+06	14	4	2	1	2	3	1	3	1	1
32	.1103727E+06	12	4	2	1	4	1	1	3	1	1
33	.1104616E+06	10	4	2	1	2	2	1	3	1	1
34	.1105362E+06	10	3	1	1	2	2	0	1	2	1
35	.1123121E+06	6	3	1	1	2	1	0	1	2	1
36	.1126391E+06	12	6	0	1	4	1	1	3	1	1
37	.1127937E+06	6	6	0	1	2	1	1	3	1	1
38	.1128069E+06	28	5	2	1	4	3	1	3	1	1
39	.1128060E+06	6	5	2	1	2	1	1	3	1	1
40	.1128601E+06	14	5	2	1	2	3	1	3	1	1
41	.1128518E+06	20	5	2	1	4	2	1	3	1	1
42	.1128898E+06	12	5	2	1	4	1	1	3	1	1
43	.1129402E+06	10	5	2	1	2	2	1	3	1	1
44	.1140995E+06	12	7	0	1	4	1	1	3	1	1

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
45	.1141520E+06	6	7	0	1	2	1	1	3	1	1
46	.1141600E+06	28	6	2	1	4	3	1	3	1	1
47	.1142084E+06	20	6	2	1	4	2	1	3	1	1
48	.1141983E+06	6	6	2	1	2	1	1	3	1	1
49	.1142411E+06	14	6	2	1	2	3	1	3	1	1
50	.1142672E+06	10	6	2	1	2	2	1	3	1	1
51	.1142665E+06	12	6	2	1	4	1	1	3	1	1
52	.1149025E+06	12	8	0	1	4	1	1	3	1	1
53	.1149500E+06	6	8	0	1	2	1	1	3	1	1
54	.1149880E+06	20	7	2	1	4	2	1	3	1	1
55	.1150040E+06	14	7	2	1	2	3	1	3	1	1
56	.1150170E+06	6	7	2	1	2	1	1	3	1	1
57	.1150831E+06	10	7	2	1	2	2	1	3	1	1
58	.1151030E+06	12	7	2	1	4	1	1	3	1	1
59	.1154800E+06	6	9	0	1	2	1	1	3	1	1
60	.1154830E+06	12	9	0	1	4	1	1	3	1	1
61	.1155240E+06	20	8	2	1	4	2	1	3	1	1
62	.1155300E+06	6	8	2	1	2	1	1	3	1	1
63	.1155350E+06	14	8	2	1	2	3	1	3	1	1
64	.1156120E+06	10	8	2	1	2	2	1	3	1	1
65	.1156180E+06	12	8	2	1	4	1	1	3	1	1
66	.1158420E+06	6	10	0	1	2	1	1	3	1	1
67	.1158550E+06	12	10	0	1	4	1	1	3	1	1
68	.1158870E+06	20	9	2	1	4	2	1	3	1	1
69	.1158890E+06	6	9	2	1	2	1	1	3	1	1
70	.1159020E+06	14	9	2	1	2	3	1	3	1	1
71	.1159838E+06	10	9	2	1	2	2	1	3	1	1
72	.1159900E+06	12	9	2	1	4	1	1	3	1	1
73	.1161070E+06	6	11	0	1	2	1	1	3	1	1
74	.1161240E+06	12	11	0	1	4	1	1	3	1	1
75	.1161550E+06	6	10	2	1	2	1	1	3	1	1
76	.1161590E+06	14	10	2	1	2	3	1	3	1	1
77	.1161640E+06	20	10	2	1	4	2	1	3	1	1
78	.1162400E+06	10	10	2	1	2	2	1	3	1	1
79	.1162590E+06	12	10	2	1	4	1	1	3	1	1
80	.1163050E+06	6	12	0	1	2	1	1	3	1	1
81	.1163120E+06	12	12	0	1	4	1	1	3	1	1
82	.1163510E+06	6	11	2	1	2	1	1	3	1	1
83	.1163590E+06	14	11	2	1	2	3	1	3	1	1
84	.1163670E+06	20	11	2	1	4	2	1	3	1	1
85	.1164360E+06	10	11	2	1	2	2	1	3	1	1

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
86	.1164410E+06	12	11	2	1	4	1	1	3	1	1
87	.1164670E+06	6	13	0	1	2	1	1	3	1	1
88	.1165020E+06	6	12	2	1	2	1	1	3	1	1
89	.1165810E+06	12	12	2	1	4	1	1	3	1	1
90	.1166250E+06	10	12	2	1	2	2	1	3	1	1

===== Потенциал ионизации =====

1	.1173450E+06								3	1	1
2	.1326600E+06								1	2	1

Продолжение табл. П.3

АТОМ = N+

ZАТОМ = 2. NTMAX = 43 NPTER = 1

Комментарий: $\#S = 2S + 1$, $\#S'' = 2S'' + 1$

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
1	.8931111E+02	9	2	1	1	3	1	1	0	0	0
2	.1531570E+05	5	2	1	1	1	2	1	0	0	0
3	.3268710E+05	1	2	1	1	1	0	1	0	0	0
4	.1490132E+06	9	3	0	1	3	1	0	2	1	0
5	.1491887E+06	3	3	0	1	1	1	0	2	1	0
6	.1646116E+06	3	3	1	1	1	1	1	2	1	0
7	.1666160E+06	15	3	1	1	3	2	1	2	1	0
8	.1688930E+06	3	3	1	1	3	0	1	2	1	0
9	.1706371E+06	9	3	1	1	3	1	1	2	1	0
10	.1742129E+06	5	3	1	1	1	2	1	2	1	0
11	.1782742E+06	1	3	1	1	1	0	1	2	1	0
12	.1865926E+06	21	3	2	1	3	3	0	2	1	0
13	.1870920E+06	5	3	2	1	1	2	0	2	1	0
14	.1874717E+06	15	3	2	1	3	2	0	2	1	0
15	.1888842E+06	9	3	2	1	3	1	0	2	1	0
16	.1893360E+06	7	3	2	1	1	3	0	2	1	0
17	.1901212E+06	3	3	2	1	1	1	0	2	1	0
18	.1966534E+06	9	4	0	1	3	1	0	2	1	0
19	.1978593E+06	3	4	0	1	1	1	0	2	1	0
20	.2021699E+06	3	4	1	1	1	1	1	2	1	0
21	.2028006E+06	15	4	1	1	3	2	1	2	1	0
22	.2032255E+06	9	4	1	1	3	1	1	2	1	0
23	.2035328E+06	3	4	1	1	3	0	1	2	1	0

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
24	.2053507E+06	5	4	1	1	1	2	1	2	1	0
25	.2063275E+06	1	4	1	1	1	0	1	2	1	0
26	.2097610E+06	21	4	2	1	3	3	0	2	1	0
27	.2099269E+06	5	4	2	1	1	2	0	2	1	0
28	.2102776E+06	15	4	2	1	3	2	0	2	1	0
29	.2107287E+06	9	4	2	1	3	1	0	2	1	0
30	.2110309E+06	7	4	3	1	1	3	1	2	1	0
31	.2110532E+06	21	4	3	1	3	3	1	2	1	0
32	.2111048E+06	7	4	2	1	1	3	0	2	1	0
33	.2113324E+06	27	4	3	1	3	4	1	2	1	0
34	.2113355E+06	3	4	2	1	1	1	0	2	1	0
35	.2114029E+06	9	4	3	1	1	4	1	2	1	0
36	.2114281E+06	15	4	3	1	3	2	1	2	1	0
37	.2114912E+06	5	4	3	1	1	2	1	2	1	0
38	.2143237E+06	9	5	0	1	3	1	0	2	1	0
39	.2148280E+06	3	5	0	1	1	1	0	2	1	0
40	.2210725E+06	16	5	3	1	3	3	1	2	1	0
41	.2211376E+06	7	5	2	1	1	3	0	2	1	0
42	.2212597E+06	27	5	3	1	3	4	1	2	1	0
43	.2213121E+06	9	5	3	1	1	4	1	2	1	0

===== Потенциал ионизации =====

1	.2388467E+06								2	1	0
---	--------------	--	--	--	--	--	--	--	---	---	---

Продолжение табл. П. 3

АТОМ = O

ZАТОМ = 1.

NTMAX = 75

NPTER = 3

Комментарий: $\#S = 2S + 1$, $\#S'' = 2S'' + 1$

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
1	.7800000E+02	9	2	1	4	3	1	1	0	0	0
2	.1586770E+05	5	2	1	4	1	2	1	0	0	0
3	.3379240E+05	1	2	1	4	1	0	1	0	0	0
4	.7376781E+05	5	3	0	1	5	0	0	4	0	0
5	.7679469E+05	3	3	0	1	3	0	0	4	0	0
6	.8662867E+05	15	3	1	1	5	1	1	4	0	0
7	.8863068E+05	9	3	1	1	3	1	1	4	0	0
8	.9547643E+05	5	4	0	1	5	0	0	4	0	0
9	.9622550E+05	3	4	0	1	3	0	0	4	0	0

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
10	.9742037E+05	30	3	2	1	5	2	0	4	0	0
11	.9748814E+05	15	3	2	1	3	2	0	4	0	0
12	.9909374E+05	15	4	1	1	5	1	1	4	0	0
13	.9968040E+05	9	4	1	1	3	1	1	4	0	0
14	.1011431E+06	15	3	0	1	3	2	0	2	2	0
15	.1021162E+06	5	5	0	1	5	0	0	4	0	0
16	.1024116E+06	3	5	0	1	3	0	0	4	0	0
17	.1026616E+06	5	3	0	1	1	2	0	2	2	0
18	.1028651E+06	25	4	2	1	5	2	0	4	0	0
19	.1029081E+06	15	4	2	1	3	2	0	4	0	0
20	.1038694E+06	9	5	1	1	3	1	1	4	0	0
21	.1050190E+06	5	6	0	1	5	0	0	4	0	0
22	.1051649E+06	3	6	0	1	3	0	0	4	0	0
23	.1053853E+06	25	5	2	1	5	2	0	4	0	0
24	.1054086E+06	15	5	2	1	3	2	0	4	0	0
25	.1059113E+06	9	6	1	1	3	1	1	4	0	0
26	.1065451E+06	5	7	0	1	5	0	0	4	0	0
27	.1066279E+06	3	7	0	1	3	0	0	4	0	0
28	.1067512E+06	25	6	2	1	5	2	0	4	0	0
29	.1067658E+06	15	6	2	1	3	2	0	4	0	0
30	.1074454E+06	5	8	0	1	5	0	0	4	0	0
31	.1074971E+06	3	8	0	1	3	0	0	4	0	0
32	.1075731E+06	25	7	2	1	5	2	0	4	0	0
33	.1075827E+06	15	7	2	1	3	2	0	4	0	0
34	.1080214E+06	5	9	0	1	5	0	0	4	0	0
35	.1080576E+06	3	9	0	1	3	0	0	4	0	0
36	.1081057E+06	25	8	2	1	5	2	0	4	0	0
37	.1081166E+06	15	8	2	1	3	2	0	4	0	0
38	.1084120E+06	5	10	0	1	5	0	0	4	0	0
39	.1084361E+06	3	10	0	1	3	0	0	4	0	0
40	.1084702E+06	25	9	2	1	5	2	0	4	0	0
41	.1084778E+06	15	9	2	1	3	2	0	4	0	0
42	.1086884E+06	5	11	0	1	5	0	0	4	0	0
43	.1087073E+06	3	11	0	1	3	0	0	4	0	0
44	.1087315E+06	25	10	2	1	5	2	0	4	0	0
45	.1087344E+06	15	10	2	1	3	2	0	4	0	0
46	.1132952E+06	15	3	2	1	3	2	1	2	2	0
47	.1137194E+06	21	3	2	1	3	3	1	2	2	0
48	.1139155E+06	9	3	0	1	3	1	0	2	1	0
49	.1139958E+06	7	3	1	1	1	3	1	2	2	0
50	.1159183E+06	3	3	0	1	1	1	0	2	1	0
51	.1166305E+06	5	3	1	1	1	2	1	2	2	0

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
52	.1227987E+06	5	4	0	1	1	2	0	2	2	0
53	.1233262E+06	9	3	2	1	3	1	0	2	2	0
54	.1242132E+06	21	3	2	1	3	3	0	2	2	0
55	.1242382E+06	9	3	2	1	1	4	0	2	2	0
56	.1242492E+06	27	3	2	1	3	4	0	2	2	0
57	.1243263E+06	7	3	2	1	1	3	0	2	2	0
58	.1257796E+06	15	4	1	1	3	2	1	2	2	0
59	.1272856E+06	15	3	1	1	3	2	1	2	1	0
60	.1276679E+06	3	3	1	1	1	1	1	2	1	0
61	.1285950E+06	5	3	1	1	1	2	1	2	1	0
62	.1291340E+06	5	5	0	1	1	2	0	2	2	0
63	.1296665E+06	21	4	2	1	3	3	0	2	2	0
64	.1296795E+06	9	4	2	1	1	4	0	2	2	0
65	.1296898E+06	27	4	2	1	3	4	0	2	2	0
66	.1297366E+06	7	4	2	1	1	3	0	2	2	0
67	.1299744E+06	9	4	2	1	3	1	0	2	2	0
68	.1309432E+06	1	3	1	1	1	0	1	2	1	0
69	.1319270E+06	5	6	0	1	1	2	0	2	2	0
70	.1321907E+06	21	5	2	1	3	3	0	2	2	0
71	.1321976E+06	9	5	2	1	1	4	0	2	2	0
72	.1322098E+06	27	5	2	1	3	4	0	2	2	0
73	.1323100E+06	9	5	2	1	3	1	0	2	2	0
74	.1334130E+06	5	7	0	1	1	2	0	2	2	0
75	.1336180E+06	9	6	2	1	3	1	0	2	2	0

 Потенциал ионизации

1	.1098360E+06								4	0	0
2	.1366650E+06								2	2	0
3	.1503040E+06								2	1	0

Окончание табл. П. 3

АТОМ = O+

ZАТОМ = 2. NTMAX = 52 NPTER = 1

Комментарий: $\#S = 2S + 1$, $\#S'' = 2S'' + 1$

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
1	.0000000E+00	4	2	1	3	4	0	0	0	0	0
2	.2681680E+05	10	2	1	3	2	2	0	0	0	0
3	.4046740E+05	6	2	1	3	2	1	0	0	0	0
4	.1199331E+06	12	2	1	4	4	1	1	0	0	0
5	.1659910E+06	10	2	1	4	2	2	1	0	0	0

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
6	.1854024E+06	12	3	0	1	4	1	1	3	1	1
7	.1890084E+06	6	3	0	1	2	1	1	3	1	1
8	.1957104E+06	2	2	1	4	2	0	1	0	0	0
9	.2039422E+06	2	3	1	1	2	0	0	3	1	1
10	.2068947E+06	20	3	1	1	4	2	0	3	1	1
11	.2084306E+06	12	3	1	1	4	1	0	3	1	1
12	.2116364E+06	10	3	1	1	2	2	0	3	1	1
13	.2121619E+06	4	3	1	1	4	0	0	3	1	1
14	.2126496E+06	6	2	1	4	2	1	1	0	0	0
15	.2142096E+06	6	3	1	1	2	1	0	3	1	1
16	.2314290E+06	28	3	2	1	4	3	1	3	1	1
17	.2325105E+06	12	3	2	1	4	1	1	3	1	1
18	.2327462E+06	20	3	2	1	4	2	1	3	1	1
19	.2328894E+06	14	3	2	1	2	3	1	3	1	1
20	.2334681E+06	6	3	2	1	2	1	1	3	1	1
21	.2344337E+06	10	3	2	1	2	2	1	3	1	1
22	.2387947E+06	12	4	0	1	4	1	1	3	1	1
23	.2404538E+06	6	4	0	1	2	1	1	3	1	1
24	.2459225E+06	20	4	1	1	4	2	0	3	1	1
25	.2481148E+06	10	4	1	1	2	2	0	3	1	1
26	.2484846E+06	6	4	1	1	2	1	0	3	1	1
27	.2545422E+06	18	4	2	1	4	3	1	3	1	1
28	.2548952E+06	6	4	2	1	4	2	1	3	1	1
29	.2551264E+06	12	4	2	1	4	1	1	3	1	1
30	.2552088E+06	6	4	2	1	2	1	1	3	1	1
31	.2553950E+06	14	4	2	1	2	3	1	3	1	1
32	.2557386E+06	10	4	3	1	2	2	0	3	1	1
33	.2557943E+06	20	4	3	1	4	2	0	3	1	1
34	.2558504E+06	36	4	3	1	4	4	0	3	1	1
35	.2559151E+06	18	4	3	1	2	4	0	3	1	1
36	.2558755E+06	10	4	2	1	2	2	1	3	1	1
37	.2561145E+06	28	4	3	1	4	3	0	3	1	1
38	.2561358E+06	14	4	3	1	2	3	0	3	1	1
39	.2578635E+06	12	5	0	1	4	1	1	3	1	1
40	.2585373E+06	6	5	0	1	2	1	1	3	1	1
41	.2610849E+06	18	5	1	1	4	2	0	3	1	1
42	.2613173E+06	10	5	1	1	4	1	0	3	1	1
43	.2618007E+06	10	5	1	1	2	2	0	3	1	1
44	.2652203E+06	20	5	2	1	4	2	1	3	1	1
45	.2654498E+06	12	5	2	1	4	1	1	3	1	1
46	.2655780E+06	8	5	2	1	2	3	1	3	1	1
47	.2657054E+06	20	5	3	1	4	2	0	3	1	1
48	.2657841E+06	36	5	3	1	4	4	0	3	1	1
49	.2657630E+06	8	5	3	1	2	4	0	3	1	1
50	.2658560E+06	10	5	2	1	1	2	2	3	1	1

n'	$E(n, l)$	g	n	l	q	$\#S$	L	π	$\#S''$	L''	π''
51	.2659767E+06	28	5	3	1	4	3	0	3	1	1
52	.2659943E+06	14	5	3	1	2	3	0	3	1	1
===== Потенциал ионизации =====											
1	.2835509E+06								3	1	1

Примечание. В компьютерном представлении информации по атомным термам используются следующие идентификаторы:

ZATOM – зарядовое число (1 – нейтральный атом, 2 – ион первой кратности); NTMAX – число термов; NPTEP – число родительских термов.

Таблица П. 4

Пример характеристик спектральных серий

Атом N

Число спектральных серий = 18

$$M = 2S + 1, \quad M'' = 2S'' + 1$$

l	M	l''	M''	Потенциал ионизации
0	3	1	1	.1173450E+06
0	3	1	1	.1173450E+06
1	3	1	1	.1173450E+06
1	3	1	1	.1173450E+06
1	3	1	1	.1173450E+06
1	3	1	1	.1173450E+06
1	3	1	1	.1173450E+06
1	3	1	1	.1173450E+06
1	1	2	1	.1326600E+06
2	3	1	1	.1173450E+06
2	3	1	1	.1173450E+06
2	3	1	1	.1173450E+06
2	3	1	1	.1173450E+06
2	3	1	1	.1173450E+06
2	3	1	1	.1173450E+06
1	3	1	1	.1173450E+06
1	1	2	1	.1326600E+06
1	1	2	1	.1326600E+06

Атом O

Число спектральных серий = 24

$$M = 2S + 1, \quad M'' = 2S'' + 1$$

l	M	l''	M''	Потенциал ионизации
0	4	0	0	.1098360E+06
0	4	0	0	.1098360E+06
1	4	0	0	.1098360E+06
1	4	0	0	.1098360E+06
2	4	0	0	.1098360E+06
2	4	0	0	.1098360E+06
0	2	2	0	.1366650E+06
0	2	2	0	.1366650E+06
2	2	2	0	.1366650E+06
2	2	2	0	.1366650E+06
0	2	1	0	.1503040E+06
1	2	2	0	.1366650E+06
0	2	1	0	.1503040E+06
1	2	2	0	.1366650E+06
2	2	2	0	.1366650E+06
2	2	2	0	.1366650E+06
2	2	2	0	.1366650E+06
2	2	2	0	.1366650E+06
1	2	2	0	.1366650E+06
1	2	1	0	.1503040E+06
1	2	1	0	.1503040E+06
1	2	1	0	.1503040E+06
1	2	1	0	.1503040E+06

Таблица П.5

База данных атомных линий

Атом: С

φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	φ_7
206.4142	18.3923	0.0060356	-0.33029	6.9157	-2.035	0.314

NLIN = 317, A = 12

E	ω	g	f	S4
.0	60333.80	1.00	.049182	.005300
16.4	60336.60	3.00	.007099	.021327
16.4	60377.12	3.00	.011840	.011372
43.5	60309.50	5.00	.007096	.021436
43.5	60350.02	5.00	.021302	.011481
.0	78105.23	1.00	.006424	.000311
16.4	78100.66	3.00	.000927	.123924
16.4	78131.96	3.00	.001546	.056837
43.5	78073.56	5.00	.000927	.124034
43.5	78104.86	5.00	.002782	.056947
16.4	78284.40	3.00	.000203	.008235
16.4	78290.60	3.00	.000608	.009456
43.5	78257.30	5.00	.000008	.008344
43.5	78263.50	5.00	.000122	.009565
43.5	78272.50	5.00	.000681	.006658
.0	79323.32	1.00	.000009	.000311
16.4	79294.70	3.00	.000002	.009456
16.4	79302.66	3.00	.000001	.008235
43.5	79267.60	5.00	.000004	.009565
43.5	79275.56	5.00	.000001	.008344
16.4	87813.60	3.00	.000293	.000229
16.4	87822.60	3.00	.000176	.000229
43.5	87786.50	5.00	.000528	.000338
43.5	87795.50	5.00	.000176	.000338
43.5	88563.50	5.00	.002663	.000338
10193.7	67486.80	5.00	.001982	.009565
60353.0	9336.79	3.00	.028505	.038718
60353.0	9357.99	3.00	.085708	.038332
60393.5	9296.27	5.00	.001135	.028763
60393.5	9317.47	5.00	.017067	.028376
60393.5	9350.88	5.00	.095921	.016370
60333.8	11019.01	1.00	.136163	.012372
60353.0	11012.23	3.00	.019641	.038718
60353.0	11032.70	3.00	.032796	.038332
60393.5	10971.71	5.00	.019569	.028763
60393.5	10992.18	5.00	.058817	.028376

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
60353.0	19820.29	3.00	.000483	.066297
60353.0	19839.49	3.00	.001450	.044569
60393.5	19779.77	5.00	.000019	.056342
60393.5	19798.97	5.00	.000289	.034613
60393.5	19829.22	5.00	.001623	.020257
60353.0	24599.00	3.00	.000015	.105040
60393.5	24558.48	5.00	.000003	.095084
60393.5	24592.68	5.00	.000017	.026884
61982.2	6875.80	3.00	.163577	.038718
61982.2	18581.37	3.00	.002886	.066297
61982.2	22869.93	3.00	.002033	.142218
68858.0	9480.00	3.00	.071124	.141316
68858.0	15024.50	3.00	.009986	.261605
68858.0	17555.96	3.00	.003539	.017620
68858.0	18937.30	3.00	.001702	.017620
68858.0	9869.91	3.00	.012271	.025626
68858.0	15174.00	3.00	.000869	.044076
68858.0	17633.00	3.00	.000216	.017620
68858.0	18973.30	3.00	.000080	.017620
68858.0	19774.44	3.00	.000428	.017620
69689.8	8427.27	3.00	.012935	.141316
69689.8	8458.57	3.00	.000866	.074228
69711.0	8406.07	5.00	.023225	.140929
69711.0	8437.37	5.00	.007771	.073842
69744.4	8403.96	7.00	.030959	.061836
69689.8	8509.55	3.00	.013746	.026847
69711.0	8488.35	5.00	.001524	.026461
69711.0	8504.83	5.00	.012212	.023553
69744.4	8454.95	7.00	.000031	.014455
69744.4	8471.42	7.00	.001086	.011547
69744.4	8505.82	7.00	.012618	.009099
69689.8	8611.01	3.00	.001856	.025626
69689.8	8617.21	3.00	.000619	.026847
69711.0	8589.80	5.00	.000370	.025240
69711.0	8596.01	5.00	.001715	.026461
69711.0	8605.01	5.00	.000385	.023553
69744.4	8562.60	7.00	.000273	.014455
69744.4	8571.60	7.00	.002190	.011547
69689.8	9621.31	3.00	.000005	.026847
69689.8	9629.27	3.00	.000069	.025626
69711.0	9600.11	5.00	.000041	.026461
69711.0	9608.07	5.00	.000123	.025240
69744.4	9566.70	7.00	.000164	.014455
69689.8	14071.21	3.00	.000634	.035456
69711.0	14050.01	5.00	.000070	.035070

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
69711.0	14050.01	5.00	.000563	.037701
69744.4	14016.60	7.00	.000001	.023064
69744.4	14016.60	7.00	.000050	.025695
69744.4	14016.60	7.00	.000580	.017402
69689.8	14140.21	3.00	.000095	.044076
69689.8	14147.21	3.00	.000032	.035456
69711.0	14119.01	5.00	.000019	.043690
69711.0	14126.01	5.00	.000088	.035070
69711.0	14136.01	5.00	.000020	.037701
69744.4	14092.60	7.00	.000014	.023064
69744.4	14102.60	7.00	.000112	.025695
69689.8	14412.81	3.00	.000000	.035456
69689.8	14422.21	3.00	.000005	.044076
69711.0	14391.61	5.00	.000003	.035070
69711.0	14401.01	5.00	.000008	.043690
69744.4	14358.20	7.00	.000011	.023064
69689.8	16814.21	3.00	.000000	.017620
69689.8	16827.21	3.00	.000001	.017620
69711.0	16793.01	5.00	.000001	.017234
69711.0	16806.01	5.00	.000002	.017234
69744.4	16759.60	7.00	.000002	.005228
69689.8	18140.21	3.00	.000000	.017620
69689.8	18149.21	3.00	.000000	.017620
69711.0	18119.01	5.00	.000000	.017234
69711.0	18128.01	5.00	.000000	.017234
69744.4	18085.60	7.00	.000001	.005228
69689.8	18852.01	3.00	.000225	.017620
69711.0	18830.80	5.00	.000025	.017234
69711.0	18836.01	5.00	.000200	.017234
69744.4	18797.40	7.00	.000001	.005228
69744.4	18802.60	7.00	.000018	.005228
69711.0	18896.01	5.00	.000011	.017234
69744.4	18862.60	7.00	.000060	.005228
71352.8	6752.41	1.00	.071975	.007383
71365.2	6751.84	3.00	.010388	.141316
71365.2	6783.13	3.00	.017393	.074228
71385.7	6731.36	5.00	.010356	.140929
71385.7	6762.66	5.00	.031213	.073842
71365.2	6935.57	3.00	.002999	.025626
71365.2	6941.77	3.00	.009004	.026847
71385.7	6915.09	5.00	.000120	.025240
71385.7	6921.30	5.00	.001796	.026461
71385.7	6930.30	5.00	.010068	.023553
71352.8	7970.51	1.00	.007543	.007383
71365.2	7945.88	3.00	.001809	.026847

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
71365.2	7953.84	3.00	.001086	.025626
71385.7	7925.40	5.00	.003248	.026461
71385.7	7933.36	5.00	.001084	.025240
71365.2	12464.77	3.00	.000114	.044076
71365.2	12471.77	3.00	.000341	.035456
71385.7	12444.30	5.00	.000005	.043690
71385.7	12451.30	5.00	.000068	.035070
71385.7	12461.30	5.00	.000381	.037701
71365.2	12737.38	3.00	.000050	.035456
71365.2	12746.77	3.00	.000030	.044076
71385.7	12716.90	5.00	.000090	.035070
71385.7	12726.30	5.00	.000030	.043690
71365.2	15006.07	3.00	.000001	.017620
71385.7	14985.59	5.00	.000000	.017234
71385.7	15010.30	5.00	.000001	.017234
71365.2	15138.77	3.00	.000004	.017620
71365.2	15151.77	3.00	.000003	.017620
71385.7	15118.30	5.00	.000008	.017234
71385.7	15131.30	5.00	.000003	.017234
71365.2	16464.77	3.00	.000000	.017620
71365.2	16473.77	3.00	.000000	.017620
71385.7	16444.30	5.00	.000001	.017234
71385.7	16453.30	5.00	.000000	.017234
71385.7	17221.30	5.00	.000259	.017234
72611.1	5069.44	5.00	.009592	.026461
72611.1	10888.94	5.00	.000121	.035070
72611.1	13575.94	5.00	.000288	.017234
72611.1	15020.94	5.00	.000229	.017234
77680.5	4089.86	5.00	.002700	.032698
77680.5	7719.88	5.00	.000257	.093169
78117.1	2056.23	3.00	.033695	.168895
78117.1	2075.43	3.00	.102028	.147166
78148.4	2024.93	5.00	.001327	.101808
78148.4	2044.13	5.00	.020098	.080079
78148.4	2074.38	5.00	.114214	.065723
78117.1	6834.94	3.00	.000129	.207637
78148.4	6803.64	5.00	.000026	.140550
78148.4	6837.84	5.00	.000144	.072350
78199.3	1973.95	5.00	.002428	.054426
78199.3	1993.15	5.00	.000454	.032698
78199.3	2023.40	5.00	.000013	.018341
78215.8	1976.67	7.00	.002573	.029790
78215.8	2006.92	7.00	.000327	.015434
78250.2	1972.52	9.00	.002888	.012986
78199.3	6752.66	5.00	.000017	.093169

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
78199.3	6786.86	5.00	.000000	.024969
78215.8	6736.18	7.00	.000095	.090261
78215.8	6770.38	7.00	.000012	.022061
78250.2	6735.98	9.00	.000106	.019613
78300.8	1872.49	3.00	.000533	.053206
78300.8	1891.70	3.00	.000179	.031477
78307.0	1866.29	5.00	.000106	.054426
78307.0	1885.49	5.00	.000497	.032698
78307.0	1915.74	5.00	.000113	.018341
78316.0	1876.49	7.00	.000079	.029790
78316.0	1906.74	7.00	.000643	.015434
78300.8	6651.20	3.00	.000006	.091948
78307.0	6645.00	5.00	.000017	.093169
78307.0	6679.20	5.00	.000004	.024969
78316.0	6636.00	7.00	.000003	.090261
78316.0	6670.20	7.00	.000022	.022061
78338.0	2225.57	3.00	.270855	.168895
78338.0	6514.13	3.00	.001275	.244816
78727.9	1835.66	3.00	.003803	.053206
78727.9	6124.23	3.00	.000039	.129126
79311.1	862.19	5.00	.000001	.054426
79311.1	881.39	5.00	.000008	.032698
79311.1	911.64	5.00	.000049	.018341
79319.1	854.23	3.00	.000014	.053206
79319.1	873.43	3.00	.000042	.031477
79311.1	5640.90	5.00	.000000	.093169
79311.1	5675.10	5.00	.000000	.024969
79319.1	5632.94	3.00	.000000	.091948
80173.3	3587.71	3.00	.016993	.063035
80192.5	3568.51	5.00	.001878	.041307
80192.5	3568.51	5.00	.015024	.043938
80222.7	3538.26	7.00	.000038	.026950
80222.7	3538.26	7.00	.001330	.029582
80222.7	3538.26	7.00	.015391	.021288
80173.3	3656.71	3.00	.002203	.071655
80173.3	3663.71	3.00	.000736	.063035
80192.5	3637.51	5.00	.000438	.049927
80192.5	3644.51	5.00	.002033	.041307
80192.5	3654.51	5.00	.000457	.043938
80222.7	3614.26	7.00	.000323	.026950
80222.7	3624.26	7.00	.002588	.029582
80173.3	3929.31	3.00	.000005	.063035
80173.3	3938.71	3.00	.000076	.071655
80192.5	3910.11	5.00	.000046	.041307
80192.5	3919.51	5.00	.000137	.049927

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
80222.7	3879.86	7.00	.000181	.026950
80173.3	6145.71	3.00	.001481	.045199
80192.5	6126.51	5.00	.000164	.023471
80192.5	6134.41	5.00	.001314	.023471
80222.7	6096.26	7.00	.000003	.009114
80222.7	6104.16	7.00	.000117	.009114
80173.3	6198.01	3.00	.000076	.045199
80192.5	6178.80	5.00	.000211	.023471
80192.5	6203.51	5.00	.000047	.023471
80222.7	6148.55	7.00	.000034	.009114
80222.7	6173.26	7.00	.000270	.009114
80173.3	6330.71	3.00	.000001	.045199
80173.3	6343.71	3.00	.000010	.045199
80192.5	6311.51	5.00	.000006	.023471
80192.5	6324.51	5.00	.000018	.023471
80222.7	6281.26	7.00	.000023	.009114
80173.3	7532.71	3.00	.000322	.045199
80192.5	7513.51	5.00	.000036	.023471
80192.5	7520.51	5.00	.000285	.023471
80222.7	7483.26	7.00	.000001	.009114
80222.7	7490.26	7.00	.000025	.009114
80173.3	7578.71	3.00	.000021	.045199
80192.5	7559.51	5.00	.000059	.023471
80192.5	7580.51	5.00	.000013	.023471
80222.7	7529.26	7.00	.000009	.009114
80222.7	7550.26	7.00	.000075	.009114
80173.3	7656.71	3.00	.000000	.045199
80173.3	7665.71	3.00	.000003	.045199
80192.5	7637.51	5.00	.000002	.023471
80192.5	7646.51	5.00	.000005	.023471
80222.7	7607.26	7.00	.000007	.009114
80173.3	8368.51	3.00	.000004	.045199
80192.5	8349.30	5.00	.000000	.023471
80192.5	8354.51	5.00	.000003	.023471
80222.7	8319.05	7.00	.000000	.009114
80222.7	8324.26	7.00	.000000	.009114
80192.5	8414.51	5.00	.000001	.023471
80222.7	8384.26	7.00	.000007	.009114
80563.6	3318.93	3.00	.146940	.289185
80563.6	5850.39	3.00	.019573	.045199
80563.6	7231.73	3.00	.006988	.045199
80563.6	3468.43	3.00	.015440	.071655
80563.6	5927.43	3.00	.001433	.045199
80563.6	7267.73	3.00	.000411	.045199
80563.6	8068.87	3.00	.000039	.045199

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
81770.4	1729.64	5.00	.014061	.041307
81770.4	4416.64	5.00	.000165	.023471
81770.4	5861.64	5.00	.000227	.023471
83500.0	1900.38	5.00	.005511	.101778
83761.0	1191.00	5.00	.000970	.101778
83761.0	1225.20	5.00	.000029	.033577
83761.0	1191.00	7.00	.005544	.104410
83761.0	1225.20	7.00	.000713	.036209
83761.0	1225.20	9.00	.006416	.027916
83830.0	1122.00	3.00	.000396	.110398
83837.0	1115.00	5.00	.001092	.101778
83837.0	1149.20	5.00	.000252	.033577
83847.0	1105.00	7.00	.000173	.104410
83847.0	1139.20	7.00	.001428	.036209
83882.5	969.63	3.00	.360558	.365105
84032.0	820.13	3.00	.007397	.147576
84102.6	849.40	5.00	.000025	.101778
84102.6	883.60	5.00	.000148	.033577
84112.0	840.00	3.00	.000125	.110398
84852.1	1561.83	3.00	.218091	.121120
84852.1	2943.16	3.00	.027633	.121120
84852.1	1638.87	3.00	.018150	.121120
84852.1	2979.16	3.00	.001928	.121120
84852.1	3780.30	3.00	.000495	.121120
84952.0	1367.00	5.00	.002588	.083942
84952.0	1374.90	5.00	.020828	.083942
84986.2	1332.80	7.00	.000052	.015742
84986.2	1340.70	7.00	.001813	.015742
84952.0	1419.30	5.00	.002808	.083942
84952.0	1444.00	5.00	.000640	.083942
84986.2	1385.09	7.00	.000438	.015742
84986.2	1409.80	7.00	.003570	.015742
84952.0	1552.00	5.00	.000064	.083942
84952.0	1565.00	5.00	.000195	.083942
84986.2	1517.80	7.00	.000252	.015742
84952.0	2754.00	5.00	.000108	.083942
84952.0	2761.00	5.00	.000863	.083942
84986.2	2719.80	7.00	.000002	.015742
84986.2	2726.80	7.00	.000076	.015742
84952.0	2800.00	5.00	.000176	.083942
84952.0	2821.00	5.00	.000040	.083942
84986.2	2765.80	7.00	.000028	.015742
84986.2	2786.80	7.00	.000224	.015742
84952.0	2878.00	5.00	.000006	.083942
84952.0	2887.00	5.00	.000017	.083942

E	ω	g	f	$C4$
84986.2	2843.80	7.00	.000023	.015742
84952.0	3589.80	5.00	.000009	.083942
84952.0	3595.00	5.00	.000070	.083942
84986.2	3555.59	7.00	.000000	.015742
84986.2	3560.80	7.00	.000006	.015742
84952.0	3655.00	5.00	.000008	.083942
84986.2	3620.80	7.00	.000048	.015742
84952.0	3687.00	5.00	.000001	.083942
84986.2	3652.80	7.00	.000005	.015742
85400.4	786.62	5.00	.017882	.083942
85400.4	2231.62	5.00	.000153	.083942

Таблица П. 6

База данных атомных линий

Ион: C+

Φ_1	Φ_2	Φ_3	Φ_4	Φ_5	Φ_6	Φ_7
208.6357	22.1460	-0.0062645	0.18028	-3.1132	1.271	-0.112

NLIN = 530, A = 12

E	ω	g	f	$C4$
.0	145550.00	2.00	.003568	.485086
64.0	145486.00	4.00	.000357	.782130
64.0	145487.40	4.00	.003210	.839409
131724.7	13825.30	2.00	.010541	2.284480
131735.8	13814.17	4.00	.001053	2.607935
131735.8	13815.63	4.00	.009480	2.665214
131724.7	36399.23	2.00	.000725	3.083874
131735.8	36388.11	4.00	.000073	3.407330
131735.8	36388.52	4.00	.000653	3.648187
131735.8	46758.98	4.00	.000598	3.435727
131735.8	52329.09	4.00	.000446	3.734953
145550.0	16968.72	4.00	.001548	2.429197
145550.0	16974.64	4.00	.000310	5.540718
145551.4	16973.19	6.00	.001858	5.597996
145550.0	29737.92	4.00	.000182	.477022
145550.0	29745.22	4.00	.000036	2.808772
145551.4	29743.77	6.00	.000218	2.866051
145550.0	23429.06	4.00	.004646	.587484
145551.4	23427.61	6.00	.000221	.644763
145551.4	23427.61	6.00	.004424	.555087
145550.0	33406.47	4.00	.000791	.478106
145551.4	33405.02	6.00	.000038	.535385

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
145551.4	33405.02	6.00	.000753	.565280
162518.7	5605.22	2.00	.017340	3.228592
162524.6	5599.30	4.00	.001732	6.340113
162524.6	5599.70	4.00	.015591	6.580970
162524.6	15970.17	4.00	.000410	6.368509
162524.6	21540.28	4.00	.000362	6.667736
166964.8	14729.70	2.00	.047177	9.566460
166964.8	14744.41	2.00	.047224	9.889915
166988.5	14706.05	4.00	.004710	9.736443
166988.5	14720.75	4.00	.030175	10.059900
166988.5	14745.75	4.00	.059508	9.574986
167033.4	14675.77	6.00	.001880	5.552451
167033.4	14700.77	6.00	.016950	5.067539
167033.4	14737.05	6.00	.075521	3.967188
166964.8	19460.22	2.00	.012695	9.566460
166964.8	19476.52	2.00	.063527	9.889915
166988.5	19436.56	4.00	.031698	9.736443
166988.5	19452.86	4.00	.010152	10.059900
166988.5	19475.30	4.00	.034302	9.574986
167033.4	19407.88	6.00	.022789	5.552451
167033.4	19430.31	6.00	.053236	5.067539
166964.8	47793.50	2.00	.001922	9.711177
166964.8	47807.80	2.00	.001922	12.822700
166988.5	47769.84	4.00	.000192	9.881160
166988.5	47784.14	4.00	.001230	12.992680
166988.5	47806.14	4.00	.002422	13.054110
167033.4	47739.16	6.00	.000077	8.485233
167033.4	47761.16	6.00	.000691	8.546664
167033.4	47794.56	6.00	.003075	5.724965
166964.8	49413.20	2.00	.000053	12.822700
166988.5	49389.55	4.00	.000009	12.992680
166988.5	49409.25	4.00	.000029	13.054110
167033.4	49344.56	6.00	.000019	8.485233
167033.4	49364.27	6.00	.000045	8.546664
168123.9	7163.98	4.00	.003908	1.276417
168123.9	7171.28	4.00	.000782	3.608167
168124.3	7170.88	6.00	.004694	3.849025
168123.9	855.13	4.00	.000489	1.386879
168124.3	854.72	6.00	.000023	1.627737
168124.3	854.72	6.00	.000466	1.538060
168123.9	10832.53	4.00	.003688	1.277501
168124.3	10832.13	6.00	.000176	1.518359
168124.3	10832.13	6.00	.003512	1.548253
168123.9	16252.28	4.00	.003839	1.276417
168124.3	16251.88	6.00	.000183	1.517274

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
168124.3	16251.88	6.00	.003656	1.517274
168750.2	9744.59	4.00	.007709	1.609922
168750.2	15314.70	4.00	.001715	1.909148
168979.0	9515.75	6.00	.000006	1.415276
168979.0	9515.75	8.00	.000093	1.325600
168979.0	15085.86	6.00	.000001	1.714503
168979.0	15085.86	8.00	.000017	1.624826
175295.2	3199.59	4.00	.022670	3.636564
175295.2	8769.70	4.00	.000027	3.935791
178194.1	3830.91	2.00	.011489	9.566460
178194.1	3850.41	2.00	.005774	9.889915
178220.8	3804.20	4.00	.002852	9.736443
178220.8	3823.70	4.00	.014334	10.059900
178194.1	10385.20	2.00	.088142	9.889915
178220.8	10358.50	4.00	.008792	10.059900
178220.8	10391.91	4.00	.079379	9.574986
178194.1	36212.50	2.00	.007251	12.822700
178220.8	36185.80	4.00	.018114	12.992680
178220.8	38706.20	4.00	.008388	13.054110
178494.8	461.66	6.00	.000045	1.305898
178494.8	461.66	6.00	.000892	1.335793
178494.8	5881.41	6.00	.000071	1.304813
178494.8	5881.41	6.00	.001410	1.304813
178956.5	5108.45	6.00	.000017	1.605125
178956.5	5108.45	8.00	.000253	1.635019
181694.5	27855.77	2.00	.019846	15.077860
181694.5	27879.78	2.00	.003973	13.773070
181709.2	27841.06	4.00	.009918	15.401320
181709.2	27865.08	4.00	.012706	14.096530
181709.2	27893.16	4.00	.001192	16.271180
181734.2	27840.08	6.00	.016661	13.611610
181734.2	27868.16	6.00	.007148	15.786270
181770.5	27831.88	8.00	.023795	14.685920
181709.2	44103.80	4.00	.000184	2.130913
181734.2	44078.80	6.00	.001104	1.646001
181770.5	44042.52	8.00	.003676	.545650
181694.5	14056.30	2.00	.008143	2.284480
181709.2	14041.59	4.00	.001627	2.607935
181709.2	14055.89	4.00	.006514	2.665214
181734.2	14016.59	6.00	.000077	2.123023
181734.2	14030.89	6.00	.001415	2.180301
181734.2	14050.50	6.00	.006644	1.916197
181770.5	13994.61	8.00	.000041	1.079951
181770.5	14014.22	8.00	.000828	.815847
181770.5	14041.81	8.00	.007263	.630496

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
181694.5	14861.70	2.00	.000787	1.965458
181694.5	14867.30	2.00	.000787	2.284480
181709.2	14847.00	4.00	.000393	2.288913
181709.2	14852.59	4.00	.000629	2.607935
181709.2	14861.30	4.00	.000551	2.665214
181734.2	14827.59	6.00	.000366	2.123023
181734.2	14836.30	6.00	.000905	2.180301
181734.2	14846.59	6.00	.000299	1.916197
181770.5	14800.02	8.00	.000224	1.079951
181770.5	14810.31	8.00	.001344	.815847
181694.5	17169.00	2.00	.000022	2.284480
181694.5	17183.20	2.00	.000108	1.965458
181709.2	17132.80	4.00	.000006	2.665214
181709.2	17154.30	4.00	.000069	2.607935
181709.2	17168.50	4.00	.000054	2.288913
181734.2	17107.80	6.00	.000039	2.180301
181734.2	17129.30	6.00	.000090	2.123023
181770.5	17071.52	8.00	.000128	1.079951
181694.5	37859.30	2.00	.000894	3.083874
181709.2	37844.59	4.00	.000179	3.407330
181709.2	37859.30	4.00	.000716	3.648187
181734.2	37819.59	6.00	.000009	2.922418
181734.2	37834.30	6.00	.000156	3.163275
181734.2	37855.00	6.00	.000730	2.309697
181770.5	37798.02	8.00	.000005	2.062924
181770.5	37818.72	8.00	.000091	1.209346
181770.5	37846.52	8.00	.000798	.814330
181694.5	38433.30	2.00	.000039	3.083874
181709.2	38418.59	4.00	.000031	3.407330
181709.2	38427.80	4.00	.000027	3.648187
181734.2	38393.59	6.00	.000018	2.922418
181734.2	38402.80	6.00	.000045	3.163275
181734.2	38412.80	6.00	.000015	2.309697
181770.5	38366.52	8.00	.000011	2.062924
181770.5	38376.52	8.00	.000067	1.209346
181694.5	39134.47	2.00	.000000	3.083874
181694.5	39146.38	2.00	.000001	1.906686
181709.2	39099.27	4.00	.000000	3.648187
181709.2	39119.77	4.00	.000000	3.407330
181709.2	39131.67	4.00	.000000	2.230141
181734.2	39074.27	6.00	.000000	3.163275
181734.2	39094.77	6.00	.000001	2.922418
181770.5	39037.98	8.00	.000001	2.062924
181734.2	49028.80	6.00	.000013	2.239663
181770.5	48992.52	8.00	.000061	1.139312

E	ω	g	f	$C4$
181709.2	49340.80	4.00	.000000	3.435727
181734.2	49315.80	6.00	.000001	2.950814
181770.5	49279.52	8.00	.000003	1.850464
181734.2	54709.80	6.00	.000008	1.646001
181770.5	54673.52	8.00	.000035	.545650
181709.2	54895.80	4.00	.000000	3.734953
181734.2	54870.80	6.00	.000000	3.250041
181770.5	54834.52	8.00	.000002	2.149690
182025.0	16401.41	2.00	.009209	2.284480
182044.5	16381.91	4.00	.000920	2.607935
182044.5	16392.70	4.00	.008284	2.665214
182025.0	20155.30	2.00	.001330	2.284480
182025.0	20179.41	2.00	.002664	1.965458
182044.5	20135.80	4.00	.003323	2.607935
182044.5	20159.91	4.00	.000665	2.288913
182025.0	38576.09	2.00	.000170	3.083874
182044.5	38556.59	4.00	.000017	3.407330
182044.5	38569.70	4.00	.000153	3.648187
182025.0	40234.09	2.00	.000000	3.083874
182025.0	40261.00	2.00	.000001	1.906686
182044.5	40214.59	4.00	.000001	3.407330
182044.5	40241.50	4.00	.000000	2.230141
184064.9	311.30	6.00	.000072	1.604040
184064.9	311.30	6.00	.001446	1.604040
186425.0	23125.25	2.00	.006097	15.077860
186425.0	23149.27	2.00	.030518	13.773070
186441.3	23108.95	4.00	.015233	15.401320
186441.3	23132.97	4.00	.004879	14.096530
186441.3	23161.05	4.00	.016488	16.271180
186463.8	23110.53	6.00	.010968	13.611610
186463.8	23138.61	6.00	.025623	15.786270
186441.3	39371.69	4.00	.002114	2.130913
186463.8	39349.25	6.00	.003286	1.646001
186425.0	10131.19	2.00	.002842	1.965458
186425.0	10136.78	2.00	.002844	2.284480
186441.3	10114.89	4.00	.000284	2.288913
186441.3	10120.48	4.00	.001817	2.607935
186441.3	10129.19	4.00	.003581	2.665214
186463.8	10098.05	6.00	.000113	2.123023
186463.8	10106.75	6.00	.001021	2.180301
186463.8	10117.05	6.00	.004541	1.916197
186425.0	12438.48	2.00	.002122	2.284480
186425.0	12452.69	2.00	.000425	1.965458
186441.3	12400.69	4.00	.001142	2.665214
186441.3	12422.19	4.00	.000339	2.607935

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
186441.3	12436.39	4.00	.001061	2.288913
186463.8	12378.25	6.00	.001774	2.180301
186463.8	12399.75	6.00	.000761	2.123023
186425.0	33702.78	2.00	.000727	3.083874
186441.3	33686.48	4.00	.000465	3.407330
186441.3	33695.69	4.00	.000915	3.648187
186463.8	33664.05	6.00	.000029	2.922418
186463.8	33673.25	6.00	.000261	3.163275
186463.8	33683.25	6.00	.001162	2.309697
186425.0	34403.95	2.00	.000191	3.083874
186425.0	34415.86	2.00	.000038	1.906686
186441.3	34367.16	4.00	.000103	3.648187
186441.3	34387.66	4.00	.000031	3.407330
186441.3	34399.56	4.00	.000096	2.230141
186463.8	34344.72	6.00	.000160	3.163275
186463.8	34365.22	6.00	.000069	2.922418
186463.8	44299.25	6.00	.000595	2.239663
186441.3	44608.69	4.00	.000082	3.435727
186463.8	44586.25	6.00	.000128	2.950814
186463.8	49980.25	6.00	.000339	1.646001
186441.3	50163.69	4.00	.000053	3.734953
186463.8	50141.25	6.00	.000082	3.250041
188579.3	9847.11	4.00	.001098	2.607935
188579.3	9857.91	4.00	.000122	2.665214
188612.7	9813.70	6.00	.000081	2.123023
188612.7	9824.50	6.00	.001136	2.180301
188579.3	11362.11	4.00	.008385	2.665214
188612.7	11328.70	6.00	.000398	2.180301
188612.7	11371.50	6.00	.007993	1.916197
188579.3	13601.00	4.00	.000021	2.607935
188579.3	13625.11	4.00	.000106	2.288913
188612.7	13567.59	6.00	.000127	2.123023
188579.3	32021.80	4.00	.000283	3.407330
188579.3	32034.91	4.00	.000031	3.648187
188612.7	31988.39	6.00	.000021	2.922418
188612.7	32001.50	6.00	.000293	3.163275
188612.7	32889.30	6.00	.000588	2.309697
188579.3	33679.80	4.00	.000001	3.407330
188579.3	33706.70	4.00	.000007	2.230141
188612.7	33646.39	6.00	.000008	2.922418
195750.8	19007.50	4.00	.000981	2.429197
195750.8	19021.80	4.00	.000393	5.540718
195750.8	19043.80	4.00	.000028	5.602149
195765.1	19007.50	6.00	.001047	5.597996
195765.1	19029.50	6.00	.000342	5.659427

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
195765.1	19062.91	6.00	.000013	2.837728
195784.7	19009.89	8.00	.001202	5.395323
195784.7	19043.30	8.00	.000201	2.573624
195812.3	19015.70	10.00	.001402	2.388273
195765.1	25341.20	6.00	.000062	.555087
195784.7	25321.59	8.00	.000262	.290982
195784.7	25322.70	8.00	.000036	.273038
195812.3	25294.00	10.00	.000029	.105632
195812.3	25295.11	10.00	.000315	.087687
195750.8	25792.20	4.00	.003773	.587484
195765.1	25777.91	6.00	.000404	.644763
195765.1	25788.11	6.00	.003368	.555087
195784.7	25758.30	8.00	.000011	.380659
195784.7	25768.50	8.00	.000399	.290982
195784.7	25789.80	8.00	.003362	.273038
195812.3	25740.91	10.00	.000007	.105632
195812.3	25762.20	10.00	.000244	.087687
195812.3	25791.30	10.00	.003521	.084846
195750.8	25976.61	4.00	.000000	.587484
195750.8	25995.50	4.00	.000003	.585675
195765.1	25931.41	6.00	.000000	.555087
195765.1	25962.31	6.00	.000002	.644763
195765.1	25981.20	6.00	.000007	.642954
195784.7	25911.80	8.00	.000001	.290982
195784.7	25942.70	8.00	.000008	.380659
195812.3	25884.20	10.00	.000009	.105632
195784.7	35442.09	8.00	.000007	.281846
195812.3	35414.50	10.00	.000061	.096495
195812.3	35687.00	10.00	.000791	.084846
195765.1	35755.31	6.00	.000000	.565280
195784.7	35735.70	8.00	.000000	.301175
195812.3	35708.11	10.00	.000002	.115825
196556.2	18202.09	2.00	.000196	2.110176
196556.2	18216.39	2.00	.000196	5.221696
196561.8	18196.50	4.00	.000098	2.429197
196561.8	18210.80	4.00	.000157	5.540718
196561.8	18232.80	4.00	.000137	5.602149
196570.5	18202.09	6.00	.000091	5.597996
196570.5	18224.09	6.00	.000226	5.659427
196570.5	18257.50	6.00	.000075	2.837728
196580.8	18213.80	8.00	.000056	5.395323
196580.8	18247.20	8.00	.000336	2.573624
196556.2	19821.80	2.00	.000133	5.221696
196561.8	19816.20	4.00	.000425	5.540718
196561.8	19835.91	4.00	.000040	5.602149

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
196570.5	19807.50	6.00	.000558	5.597996
196570.5	19827.20	6.00	.000239	5.659427
196580.8	19816.91	8.00	.000798	5.395323
196570.5	24535.80	6.00	.003254	.555087
196580.8	24525.50	8.00	.000407	.290982
196580.8	24526.61	8.00	.003558	.273038
196556.2	25190.09	2.00	.000233	.266653
196561.8	25165.61	4.00	.000163	.587484
196561.8	25184.50	4.00	.000187	.585675
196570.5	25126.00	6.00	.000089	.555087
196570.5	25156.91	6.00	.000268	.644763
196570.5	25175.80	6.00	.000109	.642954
196580.8	25115.70	8.00	.000399	.290982
196580.8	25146.61	8.00	.000067	.380659
196580.8	34646.00	8.00	.000646	.281846
196570.5	34949.91	6.00	.000020	.565280
196580.8	34939.61	8.00	.000088	.301175
198426.4	15980.19	4.00	.000267	5.540718
198437.2	15969.39	6.00	.001602	5.597996
198426.4	18500.59	4.00	.000032	5.602149
198437.2	18489.80	6.00	.000296	5.659427
198426.4	22663.19	4.00	.004287	.587484
198437.2	22652.39	6.00	.000204	.644763
198437.2	22661.59	6.00	.004083	.555087
198426.4	23281.50	4.00	.000051	.587484
198426.4	23326.50	4.00	.000457	.585675
198437.2	23270.70	6.00	.000473	.644763
198437.2	23315.70	6.00	.000034	.642954
198426.4	32794.59	4.00	.000670	.478106
198437.2	32783.80	6.00	.000032	.535385
198437.2	32783.80	6.00	.000638	.565280
198842.0	15930.59	6.00	.000001	5.597996
198842.0	15952.59	6.00	.000011	5.659427
198842.0	15986.00	6.00	.000047	2.837728
198863.5	15894.80	4.00	.000003	2.429197
198863.5	15909.09	4.00	.000019	5.540718
198863.5	15931.09	4.00	.000037	5.602149
198877.7	15880.59	2.00	.000029	2.110176
198877.7	15894.89	2.00	.000029	5.221696
198842.0	17536.00	6.00	.000194	5.597996
198842.0	17555.70	6.00	.000454	5.659427
198863.5	17514.50	4.00	.000086	5.540718
198863.5	17534.20	4.00	.000292	5.602149
198877.7	17500.30	2.00	.000539	5.221696
198842.0	22854.50	6.00	.003721	.555087

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
198842.0	22885.41	6.00	.000838	.644763
198842.0	22904.30	6.00	.000093	.642954
198863.5	22863.91	4.00	.002932	.587484
198863.5	22882.80	4.00	.001490	.585675
198877.7	22868.59	2.00	.002327	.266653
198842.0	32678.41	6.00	.000691	.565280
199941.4	16985.59	6.00	.000109	5.659427
199984.2	16942.80	8.00	.001629	5.395323
199941.4	21148.19	6.00	.000385	.644763
199941.4	21157.39	6.00	.000019	.555087
199984.2	21105.39	8.00	.000014	.380659
199984.2	21114.59	8.00	.000389	.290982
199941.4	21643.59	6.00	.004511	.555087
199984.2	21600.80	8.00	.000125	.290982
199984.2	21643.80	8.00	.004386	.273038
199941.4	21766.50	6.00	.000001	.644763
199941.4	21811.50	6.00	.000010	.642954
199984.2	21723.70	8.00	.000011	.380659
199941.4	31279.59	6.00	.000052	.535385
199941.4	31279.59	6.00	.000003	.565280
199984.2	31236.80	8.00	.000002	.271281
199984.2	31236.80	8.00	.000052	.301175
202180.3	12226.30	4.00	.001090	5.540718
202204.4	12202.19	2.00	.000435	5.221696
202180.3	14746.70	4.00	.000057	5.602149
202180.3	19527.61	4.00	.004761	.587484
202180.3	19572.61	4.00	.000530	.585675
202204.4	19548.50	2.00	.005296	.266653
209550.3	5208.03	2.00	.070621	15.222580
209550.3	5222.33	2.00	.070815	18.334100
209574.3	5184.02	4.00	.007030	13.917790
209574.3	5198.31	4.00	.045113	17.029310
209574.3	5220.31	4.00	.089193	17.090740
209602.4	5170.23	6.00	.002804	19.203960
209602.4	5192.23	6.00	.025347	19.265400
209602.4	5225.64	6.00	.113376	16.443700
209550.3	6827.73	2.00	.090276	18.334100
209574.3	6803.72	4.00	.014393	17.029310
209574.3	6823.42	4.00	.048718	17.090740
209602.4	6775.64	6.00	.032251	19.203960
209602.4	6795.34	6.00	.075472	19.265400
214406.6	6194.50	4.00	.001398	6.340113
214406.6	6207.61	4.00	.012611	6.580970
214406.6	7852.50	4.00	.004758	6.340113
214406.6	7879.41	4.00	.000955	5.162924

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
214772.6	11040.41	4.00	.002166	5.063696
214794.6	11018.41	6.00	.012969	5.125127
214828.0	10985.00	8.00	.043100	2.303428
214758.3	4795.50	2.00	.012366	3.228592
214772.6	4781.20	4.00	.002466	6.340113
214772.6	4795.91	4.00	.009893	6.580970
214794.6	4759.20	6.00	.000117	6.401544
214794.6	4773.91	6.00	.002144	6.642401
214794.6	4794.61	6.00	.010092	5.788823
214828.0	4740.50	8.00	.000062	3.820702
214828.0	4761.20	8.00	.001253	2.967124
214828.0	4789.00	8.00	.011026	2.572107
214758.3	5369.50	2.00	.001244	3.228592
214772.6	5355.20	4.00	.000993	6.340113
214772.6	5364.41	4.00	.000870	6.580970
214794.6	5333.20	6.00	.000577	6.401544
214794.6	5342.41	6.00	.001427	6.642401
214794.6	5352.41	6.00	.000473	5.788823
214828.0	5309.00	8.00	.000352	3.820702
214828.0	5319.00	8.00	.002113	2.967124
214758.3	6070.67	2.00	.000031	3.228592
214758.3	6082.58	2.00	.000156	2.051404
214772.6	6035.88	4.00	.000009	6.580970
214772.6	6056.38	4.00	.000099	6.340113
214772.6	6068.28	4.00	.000078	5.162924
214794.6	6013.88	6.00	.000056	6.642401
214794.6	6034.38	6.00	.000130	6.401544
214828.0	5980.47	8.00	.000184	3.820702
214794.6	15968.41	6.00	.000014	5.718789
214828.0	15935.00	8.00	.000064	2.897089
214772.6	16277.41	4.00	.000000	6.368509
214794.6	16255.41	6.00	.000001	6.429940
214828.0	16222.00	8.00	.000002	3.608241
214794.6	21649.41	6.00	.000009	5.125127
214828.0	21616.00	8.00	.000040	2.303428
214772.6	21832.41	4.00	.000000	6.667736
214794.6	21810.41	6.00	.000000	6.729167
214828.0	21777.00	8.00	.000001	3.907468
216378.0	9435.00	4.00	.027316	5.063696
216397.7	9415.30	6.00	.042403	5.125127
216378.0	3749.80	4.00	.002991	6.340113
216378.0	3759.00	4.00	.005902	6.580970
216397.7	3730.09	6.00	.000186	6.401544
216397.7	3739.30	6.00	.001677	6.642401
216397.7	3749.30	6.00	.007475	5.788823

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C</i> ₄
216378.0	4430.47	4.00	.001686	6.580970
216378.0	4450.97	4.00	.000502	6.340113
216378.0	4462.88	4.00	.001573	5.162924
216397.7	4410.77	6.00	.002612	6.642401
216397.7	4431.27	6.00	.001125	6.401544
216397.7	14365.30	6.00	.001115	5.718789
216378.0	14672.00	4.00	.000121	6.368509
216397.7	14652.30	6.00	.000188	6.429940
216397.7	20046.30	6.00	.000479	5.125127
216378.0	20227.00	4.00	.000063	6.667736
216397.7	20207.30	6.00	.000098	6.729167
216927.0	3674.09	6.00	.000127	6.401544
216927.0	3687.20	6.00	.001778	6.642401
216927.0	4575.00	6.00	.012882	5.788823
216927.0	5332.09	6.00	.000190	6.401544
219568.5	1537.80	6.00	.000013	1.538060
219589.2	1517.09	8.00	.000053	.684482
219589.2	1518.20	8.00	.000007	.666538
219617.0	1489.30	10.00	.000006	.289466
219617.0	1490.41	10.00	.000063	.271521
219553.8	1989.20	4.00	.001128	1.386879
219568.5	1974.50	6.00	.000120	1.627737
219568.5	1984.70	6.00	.001005	1.538060
219589.2	1953.80	8.00	.000003	.774159
219589.2	1964.00	8.00	.000118	.684482
219589.2	1985.30	8.00	.001004	.666538
219617.0	1936.20	10.00	.000002	.289466
219617.0	1957.50	10.00	.000072	.271521
219617.0	1986.59	10.00	.001052	.268679
219553.8	2173.61	4.00	.000000	1.386879
219553.8	2192.50	4.00	.000001	1.385070
219568.5	2128.00	6.00	.000000	1.538060
219568.5	2158.91	6.00	.000001	1.627737
219568.5	2177.80	6.00	.000002	1.625927
219589.2	2107.30	8.00	.000000	.684482
219589.2	2138.20	8.00	.000003	.774159
219617.0	2079.50	10.00	.000003	.289466
219589.2	11637.59	8.00	.000025	.675346
219617.0	11609.80	10.00	.000223	.280329
219617.0	11882.30	10.00	.002171	.268679
219568.5	11951.91	6.00	.000000	1.548253
219589.2	11931.20	8.00	.000001	.694675
219617.0	11903.41	10.00	.000006	.299659
220137.0	969.30	6.00	.000396	1.538060
220147.0	959.30	8.00	.000049	.684482

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
220147.0	960.41	8.00	.000429	.666538
220127.8	1599.61	4.00	.000039	1.386879
220127.8	1618.50	4.00	.000045	1.385070
220137.0	1559.50	6.00	.000021	1.538060
220137.0	1590.41	6.00	.000063	1.627737
220137.0	1609.30	6.00	.000026	1.625927
220147.0	1549.50	8.00	.000092	.684482
220147.0	1580.41	8.00	.000016	.774159
220147.0	11079.80	8.00	.002794	.675346
220137.0	11383.41	6.00	.000062	1.548253
220147.0	11373.41	8.00	.000278	.694675
220601.1	488.50	4.00	.000238	1.386879
220614.2	475.39	6.00	.000011	1.627737
220614.2	484.59	6.00	.000225	1.538060
220601.1	1106.81	4.00	.000008	1.386879
220601.1	1151.81	4.00	.000070	1.385070
220614.2	1093.70	6.00	.000069	1.627737
220614.2	1138.70	6.00	.000005	1.625927
220601.1	10619.91	4.00	.003502	1.277501
220614.2	10606.80	6.00	.000167	1.518359
220614.2	10606.80	6.00	.003331	1.548253
220808.5	888.03	6.00	.000429	1.538060
220808.5	918.94	6.00	.000100	1.627737
220808.5	937.83	6.00	.000011	1.625927
220829.0	898.44	4.00	.000341	1.386879
220829.0	917.33	4.00	.000177	1.385070
220840.9	905.42	2.00	.000273	.207881
220808.5	10711.94	6.00	.002807	1.548253
221089.6	412.41	6.00	.000001	.774159
221098.8	403.20	8.00	.000016	.684482
221106.3	9656.70	8.00	.000011	.614448
221107.4	9655.59	10.00	.000076	.596504
221106.3	15337.70	8.00	.000002	.020786
221107.4	15336.59	10.00	.000012	.002842
221502.0	83.00	8.00	.000001	.684482
221502.0	126.00	8.00	.000064	.666538
221502.0	205.91	8.00	.000000	.774159
221502.0	9719.00	8.00	.000013	.664781
221502.0	9719.00	8.00	.000361	.694675
221696.5	9066.50	8.00	.000018	.614448
221727.4	9035.59	6.00	.000004	.704124
221696.5	9353.50	8.00	.000080	1.325600
221727.4	9322.59	6.00	.000024	1.415276
221746.3	9303.70	4.00	.000004	1.413466
221696.5	14747.50	8.00	.000003	.020786

E	ω	g	f	C_4
221727.4	14716.59	6.00	.000001	.110463
221696.5	14908.50	8.00	.000012	1.624826
221727.4	14877.59	6.00	.000004	1.714503
221746.3	14858.70	4.00	.000001	1.712693
221707.9	551.19	6.00	.000182	1.386879
221752.9	506.19	4.00	.000028	1.385070
221752.9	533.09	4.00	.000147	.207881
230763.0	463.80	8.00	.000742	.605312
230763.0	757.41	8.00	.000154	.624641
231050.0	470.41	6.00	.000793	1.335793
231226.8	5217.20	10.00	.000185	.011650
231520.4	4923.59	8.00	.000041	.030979
231520.4	5084.59	8.00	.000185	1.635019

Таблица П. 7

База данных атомных линий

Атом: N

Φ_1	Φ_2	Φ_3	Φ_4	Φ_5	Φ_6	Φ_7
198.223	14.0513	0.0393072	- 1.33253	10.3337	-0.125	-0.337

NLIN = 861, A = 14

E	ω	g	f	C_4
19223.0	67000.20	6.00	.020673	.019486
19231.0	66900.40	4.00	.017202	.018332
19231.0	66992.20	4.00	.003445	.019876
19223.0	85004.40	6.00	.003088	.071714
19231.0	84911.20	4.00	.002570	.064658
19231.0	84996.40	4.00	.000515	.072104
19223.0	90885.50	6.00	.001124	.000229
19231.0	90798.20	4.00	.000936	.000620
19231.0	90877.50	4.00	.000187	.000620
19223.0	93600.00	6.00	.000483	.000229
19231.0	93504.00	4.00	.000402	.000620
19231.0	93592.00	4.00	.000080	.000620
19223.0	94940.00	6.00	.000160	.000229
19231.0	94899.00	4.00	.000134	.000620
19231.0	94932.00	4.00	.000027	.000620
19223.0	95727.00	6.00	.000162	.000229
19231.0	95719.00	4.00	.000135	.000620
19231.0	95719.00	4.00	.000027	.000620
19223.0	96257.00	6.00	.000163	.000229
19231.0	96249.00	4.00	.000135	.000620
19231.0	96249.00	4.00	.000027	.000620

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
19223.0	96619.00	6.00	.000163	.000229
19231.0	96611.00	4.00	.000136	.000620
19231.0	96611.00	4.00	.000027	.000620
19223.0	96884.00	6.00	.000164	.000229
19231.0	96876.00	4.00	.000136	.000620
19231.0	96876.00	4.00	.000027	.000620
19223.0	97082.00	6.00	.000164	.000229
19231.0	97074.00	4.00	.000137	.000620
19231.0	97074.00	4.00	.000027	.000620
19223.0	97244.00	6.00	.000164	.000229
19231.0	97236.00	4.00	.000137	.000620
19231.0	97236.00	4.00	.000027	.000620
19223.0	85392.40	6.00	.000008	.015008
19231.0	85384.40	4.00	.000001	.015398
19231.0	85423.90	4.00	.000006	.009515
19223.0	85587.90	6.00	.000022	.014058
19223.0	85659.70	6.00	.000434	.009565
19231.0	85579.90	4.00	.000456	.014449
19223.0	85897.80	6.00	.000002	.015008
19223.0	85921.30	6.00	.000029	.014058
19231.0	85889.80	4.00	.000028	.015398
19231.0	85913.30	4.00	.000003	.014449
19223.0	95781.00	6.00	.000076	.000229
19223.0	95781.00	6.00	.001522	.000229
19231.0	95773.00	4.00	.001598	.000620
19223.0	95794.00	6.00	.000021	.000229
19231.0	95786.00	4.00	.000004	.000620
19231.0	95786.00	4.00	.000018	.000620
19223.0	95834.50	6.00	.000037	.000229
19223.0	95877.10	6.00	.000516	.000229
19231.0	95826.50	4.00	.000497	.000620
19231.0	95869.10	4.00	.000055	.000620
28840.0	57291.40	4.00	.004093	.018332
28840.0	57383.20	4.00	.020499	.019876
28840.0	57291.40	2.00	.016373	.018078
28840.0	57383.20	2.00	.008200	.019622
28840.0	75302.20	4.00	.000570	.064658
28840.0	75387.40	4.00	.002852	.072104
28840.0	75302.20	2.00	.002279	.064404
28840.0	75387.40	2.00	.001141	.071850
28840.0	81189.20	4.00	.000200	.000620
28840.0	81268.50	4.00	.001000	.000620
28840.0	81189.20	2.00	.000799	.000366
28840.0	81268.50	2.00	.000400	.000366
28840.0	83895.00	4.00	.000087	.000620

E	ω	g	f	$C4$
28840.0	83983.00	4.00	.000436	.000620
28840.0	83895.00	2.00	.000348	.000366
28840.0	83983.00	2.00	.000174	.000366
28840.0	85290.00	4.00	.000024	.000620
28840.0	85323.00	4.00	.000121	.000620
28840.0	85290.00	2.00	.000097	.000366
28840.0	85323.00	2.00	.000048	.000366
28840.0	86110.00	4.00	.000024	.000620
28840.0	86110.00	4.00	.000122	.000620
28840.0	86110.00	2.00	.000098	.000366
28840.0	86110.00	2.00	.000049	.000366
28840.0	86640.00	4.00	.000025	.000620
28840.0	86640.00	4.00	.000123	.000620
28840.0	86640.00	2.00	.000098	.000366
28840.0	86640.00	2.00	.000049	.000366
28840.0	87002.00	4.00	.000025	.000620
28840.0	87002.00	4.00	.000123	.000620
28840.0	87002.00	2.00	.000099	.000366
28840.0	87002.00	2.00	.000049	.000366
28840.0	87267.00	4.00	.000025	.000620
28840.0	87267.00	4.00	.000124	.000620
28840.0	87267.00	2.00	.000099	.000366
28840.0	87267.00	2.00	.000050	.000366
28840.0	87465.00	4.00	.000025	.000620
28840.0	87465.00	4.00	.000124	.000620
28840.0	87465.00	2.00	.000099	.000366
28840.0	87465.00	2.00	.000050	.000366
28840.0	87627.00	4.00	.000025	.000620
28840.0	87627.00	4.00	.000124	.000620
28840.0	87627.00	2.00	.000099	.000366
28840.0	87627.00	2.00	.000050	.000366
28840.0	75775.40	4.00	.000209	.015398
28840.0	75814.90	4.00	.000042	.009515
28840.0	75775.40	2.00	.000084	.015144
28840.0	75814.90	2.00	.000167	.009261
28840.0	76280.80	4.00	.000044	.015398
28840.0	76304.30	4.00	.000395	.014449
28840.0	76280.80	2.00	.000438	.015144
28840.0	86177.00	4.00	.000402	.000620
28840.0	86177.00	4.00	.000080	.000620
28840.0	86177.00	2.00	.000161	.000366
28840.0	86177.00	2.00	.000321	.000366
28840.0	86217.50	4.00	.000249	.000620
28840.0	86260.10	4.00	.002238	.000620
28840.0	86217.50	2.00	.002486	.000366

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
83285.5	11486.70	2.00	.057149	.040330
83285.5	11509.30	2.00	.057262	.050022
83319.3	11452.91	4.00	.005698	.041875
83319.3	11475.50	4.00	.036540	.051566
83319.3	11512.80	4.00	.072172	.039631
83366.0	11428.80	6.00	.002274	.041229
83366.0	11466.10	6.00	.020537	.029294
83366.0	11517.10	6.00	.091681	.014164
83285.5	12191.00	2.00	.012043	.040330
83285.5	12209.40	2.00	.060304	.050022
83319.3	12157.20	4.00	.030023	.041875
83319.3	12175.60	4.00	.009622	.051566
83319.3	12213.91	4.00	.032576	.039631
83366.0	12128.90	6.00	.021566	.041229
83366.0	12167.20	6.00	.050481	.029294
83285.5	23475.00	2.00	.000202	.086809
83285.5	23494.60	2.00	.000203	.097855
83319.3	23441.20	4.00	.000020	.088353
83319.3	23460.80	4.00	.000129	.099399
83319.3	23496.80	4.00	.000255	.092658
83366.0	23414.10	6.00	.000008	.089062
83366.0	23450.10	6.00	.000073	.082320
83366.0	23504.70	6.00	.000324	.038547
83285.5	23643.20	2.00	.000115	.086809
83285.5	23712.80	2.00	.000576	.097855
83319.3	23609.41	4.00	.000287	.088353
83319.3	23679.00	4.00	.000092	.099399
83319.3	23719.70	4.00	.000311	.092658
83366.0	23632.30	6.00	.000207	.089062
83366.0	23673.00	6.00	.000483	.082320
86131.4	10656.80	2.00	.123996	.050022
86223.2	10565.00	4.00	.012293	.051566
86223.2	10641.00	4.00	.111431	.039631
86131.4	11638.70	2.00	.052822	.040330
86131.4	11674.40	2.00	.026492	.050022
86223.2	11546.90	4.00	.013101	.041875
86223.2	11582.59	4.00	.065710	.051566
94772.2	8845.90	2.00	.026454	.086656
94772.2	8895.90	2.00	.005321	.094102
94794.8	8823.30	4.00	.013193	.096348
94794.8	8873.30	4.00	.016983	.103794
94794.8	8942.00	4.00	.001605	.097882
94832.1	8836.00	6.00	.022197	.091859
94832.1	8904.70	6.00	.009587	.085947
94883.1	8853.70	8.00	.031773	.070818

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
94772.2	15041.30	2.00	.002948	.022618
94772.2	15085.59	2.00	.000591	.022618
94794.8	15018.70	4.00	.001472	.032310
94794.8	15063.00	4.00	.001889	.032310
94794.8	15133.10	4.00	.000178	.032310
94832.1	15025.70	6.00	.002473	.020375
94832.1	15095.80	6.00	.001065	.020375
94883.1	15044.80	8.00	.003538	.005246
94772.2	17793.70	2.00	.001000	.022618
94772.2	17838.40	2.00	.000200	.022618
94794.8	17771.10	4.00	.000499	.032310
94794.8	17815.80	4.00	.000641	.032310
94794.8	17887.80	4.00	.000060	.032310
94832.1	17778.50	6.00	.000839	.020375
94832.1	17850.50	6.00	.000361	.020375
94883.1	17799.50	8.00	.001200	.005246
94772.2	19242.80	2.00	.000462	.022618
94772.2	19299.80	2.00	.000093	.022618
94794.8	19220.20	4.00	.000231	.032310
94794.8	19277.20	4.00	.000296	.032310
94794.8	19351.20	4.00	.000028	.032310
94832.1	19239.90	6.00	.000388	.020375
94832.1	19313.90	6.00	.000167	.020375
94883.1	19262.90	8.00	.000555	.005246
94772.2	20036.80	2.00	.000148	.022618
94772.2	20117.80	2.00	.000030	.022618
94794.8	20014.20	4.00	.000074	.032310
94794.8	20095.20	4.00	.000095	.032310
94794.8	20147.20	4.00	.000009	.032310
94832.1	20057.90	6.00	.000124	.020375
94832.1	20109.90	6.00	.000053	.020375
94883.1	20058.90	8.00	.000178	.005246
94772.2	20710.80	2.00	.000153	.022618
94772.2	20710.80	2.00	.000031	.022618
94794.8	20688.20	4.00	.000076	.032310
94794.8	20688.20	4.00	.000098	.032310
94794.8	20688.20	4.00	.000009	.032310
94832.1	20650.90	6.00	.000128	.020375
94832.1	20650.90	6.00	.000055	.020375
94883.1	20599.90	8.00	.000183	.005246
94772.2	21082.80	2.00	.000156	.022618
94772.2	21082.80	2.00	.000031	.022618
94794.8	21060.20	4.00	.000078	.032310
94794.8	21060.20	4.00	.000100	.032310
94794.8	21060.20	4.00	.000009	.032310

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
94832.1	21022.90	6.00	.000130	.020375
94832.1	21022.90	6.00	.000056	.020375
94883.1	20971.90	8.00	.000186	.005246
94772.2	21351.80	2.00	.000158	.022618
94772.2	21351.80	2.00	.000032	.022618
94794.8	21329.20	4.00	.000079	.032310
94794.8	21329.20	4.00	.000101	.032310
94794.8	21329.20	4.00	.000009	.032310
94832.1	21291.90	6.00	.000132	.020375
94832.1	21291.90	6.00	.000057	.020375
94883.1	21240.90	8.00	.000188	.005246
94772.2	21539.80	2.00	.000159	.022618
94772.2	21539.80	2.00	.000032	.022618
94794.8	21517.20	4.00	.000079	.032310
94794.8	21517.20	4.00	.000102	.032310
94794.8	21517.20	4.00	.000010	.032310
94832.1	21479.90	6.00	.000133	.020375
94832.1	21479.90	6.00	.000057	.020375
94883.1	21428.90	8.00	.000190	.005246
94772.2	9892.80	2.00	.013648	.037397
94794.8	9870.20	4.00	.002723	.047089
94794.8	9891.20	4.00	.010917	.046139
94832.1	9832.90	6.00	.000129	.035154
94832.1	9853.90	6.00	.002367	.034204
94832.1	9885.90	6.00	.011133	.029711
94883.1	9802.90	8.00	.000069	.019075
94883.1	9834.90	8.00	.001384	.014582
94883.1	9883.90	8.00	.012175	.008808
94772.2	10091.80	2.00	.000135	.031513
94772.2	10117.80	2.00	.000027	.037397
94794.8	10069.20	4.00	.000068	.041205
94794.8	10095.20	4.00	.000087	.047089
94794.8	10162.20	4.00	.000008	.046139
94832.1	10057.90	6.00	.000113	.035154
94832.1	10124.90	6.00	.000049	.034204
94883.1	10073.90	8.00	.000162	.019075
94772.2	10214.80	2.00	.001221	.031513
94772.2	10225.80	2.00	.001222	.037397
94794.8	10192.20	4.00	.000609	.041205
94794.8	10203.20	4.00	.000976	.047089
94794.8	10216.20	4.00	.000855	.046139
94832.1	10165.90	6.00	.000567	.035154
94832.1	10178.90	6.00	.001402	.034204
94832.1	10187.90	6.00	.000464	.029711
94883.1	10127.90	8.00	.000346	.019075

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
94883.1	10136.90	8.00	.002077	.014582
94772.2	15423.80	2.00	.000591	.022618
94794.8	15401.20	4.00	.000118	.032310
94794.8	15419.20	4.00	.000473	.032310
94832.1	15363.90	6.00	.000006	.020375
94832.1	15381.90	6.00	.000103	.020375
94832.1	15415.90	6.00	.000482	.020375
94883.1	15330.90	8.00	.000003	.005246
94883.1	15364.90	8.00	.000060	.005246
94883.1	15420.90	8.00	.000528	.005246
94772.2	15448.80	2.00	.000052	.022618
94772.2	15502.80	2.00	.000053	.022618
94794.8	15426.20	4.00	.000026	.032310
94794.8	15480.20	4.00	.000042	.032310
94794.8	15493.20	4.00	.000037	.032310
94832.1	15442.90	6.00	.000024	.020375
94832.1	15455.90	6.00	.000061	.020375
94832.1	15506.90	6.00	.000020	.020375
94883.1	15404.90	8.00	.000015	.005246
94883.1	15455.90	8.00	.000090	.005246
94772.2	15552.80	2.00	.000006	.022618
94772.2	15578.80	2.00	.000001	.022618
94794.8	15530.20	4.00	.000003	.032310
94794.8	15556.20	4.00	.000004	.032310
94794.8	15608.20	4.00	.000000	.032310
94832.1	15518.90	6.00	.000005	.020375
94832.1	15570.90	6.00	.000002	.020375
94883.1	15519.90	8.00	.000007	.005246
94772.2	20215.80	2.00	.000017	.022618
94772.2	20215.80	2.00	.000017	.022618
94794.8	20193.20	4.00	.000009	.032310
94794.8	20193.20	4.00	.000014	.032310
94794.8	20193.20	4.00	.000012	.032310
94832.1	20155.90	6.00	.000008	.020375
94832.1	20155.90	6.00	.000020	.020375
94832.1	20155.90	6.00	.000007	.020375
94883.1	20104.90	8.00	.000005	.005246
94883.1	20104.90	8.00	.000029	.005246
94772.2	20330.80	2.00	.000005	.022618
94772.2	20330.80	2.00	.000001	.022618
94794.8	20308.20	4.00	.000003	.032310
94794.8	20308.20	4.00	.000003	.032310
94794.8	20308.20	4.00	.000000	.032310
94832.1	20270.90	6.00	.000004	.020375
94832.1	20270.90	6.00	.000002	.020375

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
94883.1	20219.90	8.00	.000006	.005246
95476.5	8141.60	2.00	.005884	.086656
95476.5	8191.60	2.00	.029602	.094102
95494.9	8123.20	4.00	.014677	.096348
95494.9	8173.20	4.00	.004726	.103794
95494.9	8241.90	4.00	.016083	.097882
95533.2	8134.90	6.00	.010583	.091859
95533.2	8203.59	6.00	.024902	.085947
95476.5	14337.00	2.00	.000603	.022618
95476.5	14381.30	2.00	.003025	.022618
95494.9	14318.60	4.00	.001506	.032310
95494.9	14362.90	4.00	.000483	.032310
95494.9	14433.00	4.00	.001640	.032310
95533.2	14324.59	6.00	.001085	.020375
95533.2	14394.70	6.00	.002544	.020375
95476.5	17089.40	2.00	.000198	.022618
95476.5	17134.10	2.00	.000993	.022618
95494.9	17071.00	4.00	.000494	.032310
95494.9	17115.70	4.00	.000159	.032310
95494.9	17187.70	4.00	.000538	.032310
95533.2	17077.40	6.00	.000356	.020375
95533.2	17149.40	6.00	.000835	.020375
95476.5	18538.50	2.00	.000088	.022618
95476.5	18595.50	2.00	.000441	.022618
95494.9	18520.10	4.00	.000220	.032310
95494.9	18577.10	4.00	.000070	.032310
95494.9	18651.10	4.00	.000239	.032310
95533.2	18538.80	6.00	.000158	.020375
95533.2	18612.80	6.00	.000371	.020375
95476.5	19332.50	2.00	.000031	.022618
95476.5	19413.50	2.00	.000154	.022618
95494.9	19314.10	4.00	.000077	.032310
95494.9	19395.10	4.00	.000025	.032310
95494.9	19447.10	4.00	.000083	.032310
95533.2	19356.80	6.00	.000055	.020375
95533.2	19408.80	6.00	.000130	.020375
95476.5	20006.50	2.00	.000032	.022618
95476.5	20006.50	2.00	.000159	.022618
95494.9	19988.10	4.00	.000079	.032310
95494.9	19988.10	4.00	.000025	.032310
95494.9	19988.10	4.00	.000086	.032310
95533.2	19949.80	6.00	.000057	.020375
95533.2	19949.80	6.00	.000133	.020375
95476.5	20378.50	2.00	.000032	.022618
95476.5	20378.50	2.00	.000162	.022618

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
95494.9	20360.10	4.00	.000081	.032310
95494.9	20360.10	4.00	.000026	.032310
95494.9	20360.10	4.00	.000087	.032310
95533.2	20321.80	6.00	.000058	.020375
95533.2	20321.80	6.00	.000136	.020375
95476.5	20647.50	2.00	.000033	.022618
95476.5	20647.50	2.00	.000164	.022618
95494.9	20629.10	4.00	.000082	.032310
95494.9	20629.10	4.00	.000026	.032310
95494.9	20629.10	4.00	.000089	.032310
95533.2	20590.80	6.00	.000059	.020375
95533.2	20590.80	6.00	.000137	.020375
95476.5	20835.50	2.00	.000033	.022618
95476.5	20835.50	2.00	.000166	.022618
95494.9	20817.10	4.00	.000083	.032310
95494.9	20817.10	4.00	.000026	.032310
95494.9	20817.10	4.00	.000089	.032310
95533.2	20778.80	6.00	.000059	.020375
95533.2	20778.80	6.00	.000139	.020375
95476.5	9387.50	2.00	.000684	.031513
95476.5	9413.50	2.00	.003431	.037397
95494.9	9369.10	4.00	.001707	.041205
95494.9	9395.10	4.00	.000548	.047089
95494.9	9462.10	4.00	.001862	.046139
95533.2	9356.80	6.00	.001228	.035154
95533.2	9423.80	6.00	.002885	.034204
95476.5	9510.50	2.00	.006184	.031513
95476.5	9521.50	2.00	.006191	.037397
95494.9	9492.10	4.00	.000617	.041205
95494.9	9503.10	4.00	.003955	.047089
95494.9	9516.10	4.00	.007796	.046139
95533.2	9464.80	6.00	.000246	.035154
95533.2	9477.80	6.00	.002219	.034204
95533.2	9486.80	6.00	.009870	.029711
95476.5	14744.50	2.00	.000308	.022618
95476.5	14798.50	2.00	.000309	.022618
95494.9	14726.10	4.00	.000031	.032310
95494.9	14780.10	4.00	.000197	.032310
95494.9	14793.10	4.00	.000389	.032310
95533.2	14741.80	6.00	.000012	.020375
95533.2	14754.80	6.00	.000111	.020375
95533.2	14805.80	6.00	.000494	.020375
95476.5	14848.50	2.00	.000034	.022618
95476.5	14874.50	2.00	.000171	.022618
95494.9	14830.10	4.00	.000085	.032310

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
95494.9	14856.10	4.00	.000027	.032310
95494.9	14908.10	4.00	.000093	.032310
95533.2	14817.80	6.00	.000061	.020375
95533.2	14869.80	6.00	.000144	.020375
95476.5	19511.50	2.00	.000083	.022618
95476.5	19511.50	2.00	.000083	.022618
95494.9	19493.10	4.00	.000008	.032310
95494.9	19493.10	4.00	.000053	.032310
95494.9	19493.10	4.00	.000105	.032310
95533.2	19454.80	6.00	.000003	.020375
95533.2	19454.80	6.00	.000030	.020375
95533.2	19454.80	6.00	.000133	.020375
95476.5	19626.50	2.00	.000024	.022618
95476.5	19626.50	2.00	.000121	.022618
95494.9	19608.10	4.00	.000061	.032310
95494.9	19608.10	4.00	.000019	.032310
95494.9	19608.10	4.00	.000065	.032310
95533.2	19569.80	6.00	.000044	.020375
95533.2	19569.80	6.00	.000102	.020375
96788.2	7354.00	4.00	.032276	.096348
96788.2	7439.20	4.00	.006530	.103794
96864.2	7363.20	6.00	.038780	.091859
96788.2	13241.00	4.00	.003075	.032310
96788.2	13320.30	4.00	.000619	.032310
96864.2	13244.30	6.00	.003691	.020375
96788.2	15946.80	4.00	.001070	.032310
96788.2	16034.80	4.00	.000215	.032310
96864.2	15958.80	6.00	.001285	.020375
96788.2	17341.80	4.00	.000436	.032310
96788.2	17374.80	4.00	.000087	.032310
96864.2	17298.80	6.00	.000522	.020375
96788.2	18161.80	4.00	.000168	.032310
96788.2	18161.80	4.00	.000034	.032310
96864.2	18085.80	6.00	.000200	.020375
96788.2	18691.80	4.00	.000172	.032310
96788.2	18691.80	4.00	.000034	.032310
96864.2	18615.80	6.00	.000206	.020375
96788.2	19053.80	4.00	.000176	.032310
96788.2	19053.80	4.00	.000035	.032310
96864.2	18977.80	6.00	.000210	.020375
96788.2	19318.80	4.00	.000178	.032310
96788.2	19318.80	4.00	.000036	.032310
96864.2	19242.80	6.00	.000213	.020375
96788.2	19516.80	4.00	.000180	.032310
96788.2	19516.80	4.00	.000036	.032310

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
96864.2	19440.80	6.00	.000215	.020375
96788.2	19678.80	4.00	.000181	.032310
96788.2	19678.80	4.00	.000036	.032310
96864.2	19602.80	6.00	.000217	.020375
96788.2	7827.20	4.00	.000027	.047089
96788.2	7866.70	4.00	.000136	.041205
96864.2	7751.20	6.00	.000161	.035154
96788.2	8022.70	4.00	.013849	.046139
96864.2	7946.70	6.00	.000653	.034204
96864.2	8018.50	6.00	.013183	.029711
96788.2	8332.59	4.00	.002277	.047089
96788.2	8356.09	4.00	.000254	.046139
96864.2	8256.59	6.00	.000167	.035154
96864.2	8280.09	6.00	.002346	.034204
96788.2	13433.50	4.00	.000001	.032310
96788.2	13456.40	4.00	.000006	.032310
96864.2	13357.50	6.00	.000007	.020375
96788.2	13522.80	4.00	.000746	.032310
96864.2	13446.80	6.00	.000035	.020375
96864.2	13508.80	6.00	.000709	.020375
96788.2	13660.09	4.00	.000139	.032310
96788.2	13682.30	4.00	.000016	.032310
96864.2	13584.09	6.00	.000010	.020375
96864.2	13606.30	6.00	.000144	.020375
96788.2	18215.80	4.00	.000203	.032310
96864.2	18139.80	6.00	.000010	.020375
96864.2	18139.80	6.00	.000192	.020375
96788.2	18228.80	4.00	.000000	.032310
96788.2	18228.80	4.00	.000002	.032310
96864.2	18152.80	6.00	.000003	.020375
96788.2	18269.30	4.00	.000063	.032310
96788.2	18311.90	4.00	.000007	.032310
96864.2	18193.30	6.00	.000005	.020375
96864.2	18235.90	6.00	.000065	.020375
97770.1	6372.10	2.00	.029493	.086656
97770.1	6457.30	2.00	.014944	.094102
97805.8	6336.41	4.00	.007332	.096348
97805.8	6421.60	4.00	.037153	.103794
97770.1	12259.10	2.00	.002290	.022618
97770.1	12338.40	2.00	.001152	.022618
97805.8	12223.41	4.00	.000571	.032310
97805.8	12302.70	4.00	.002872	.032310
97770.1	14964.90	2.00	.000765	.022618
97770.1	15052.90	2.00	.000385	.022618
97805.8	14929.20	4.00	.000191	.032310

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
97805.8	15017.20	4.00	.000960	.032310
97770.1	16359.90	2.00	.000303	.022618
97770.1	16392.90	2.00	.000152	.022618
97805.8	16324.20	4.00	.000076	.032310
97805.8	16357.20	4.00	.000378	.032310
97770.1	17179.90	2.00	.000142	.022618
97770.1	17179.90	2.00	.000071	.022618
97805.8	17144.20	4.00	.000035	.032310
97805.8	17144.20	4.00	.000177	.032310
97770.1	17709.90	2.00	.000146	.022618
97770.1	17709.90	2.00	.000073	.022618
97805.8	17674.20	4.00	.000037	.032310
97805.8	17674.20	4.00	.000183	.032310
97770.1	18071.90	2.00	.000149	.022618
97770.1	18071.90	2.00	.000075	.022618
97805.8	18036.20	4.00	.000037	.032310
97805.8	18036.20	4.00	.000186	.032310
97770.1	18336.90	2.00	.000152	.022618
97770.1	18336.90	2.00	.000076	.022618
97805.8	18301.20	4.00	.000038	.032310
97805.8	18301.20	4.00	.000189	.032310
97770.1	18534.90	2.00	.000153	.022618
97770.1	18534.90	2.00	.000077	.022618
97805.8	18499.20	4.00	.000038	.032310
97805.8	18499.20	4.00	.000191	.032310
97770.1	18696.90	2.00	.000155	.022618
97770.1	18696.90	2.00	.000077	.022618
97805.8	18661.20	4.00	.000039	.032310
97805.8	18661.20	4.00	.000193	.032310
97770.1	6845.30	2.00	.001307	.037397
97770.1	6884.80	2.00	.002629	.031513
97805.8	6809.60	4.00	.003251	.047089
97805.8	6849.10	4.00	.000654	.041205
97770.1	7350.70	2.00	.012539	.037397
97805.8	7315.00	4.00	.001248	.047089
97805.8	7338.50	4.00	.011267	.046139
97770.1	12451.60	2.00	.000033	.022618
97770.1	12474.50	2.00	.000065	.022618
97805.8	12415.91	4.00	.000081	.032310
97805.8	12438.80	4.00	.000016	.032310
97770.1	12678.20	2.00	.000775	.022618
97805.8	12642.50	4.00	.000077	.032310
97805.8	12664.70	4.00	.000697	.032310
97770.1	15030.90	2.00	.000001	.022618
97770.1	15045.90	2.00	.000001	.022618

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
97805.8	14995.20	4.00	.000001	.032310
97805.8	15010.20	4.00	.000000	.032310
97770.1	17246.90	2.00	.000021	.022618
97770.1	17246.90	2.00	.000043	.022618
97805.8	17211.20	4.00	.000053	.032310
97805.8	17211.20	4.00	.000011	.032310
97770.1	17287.40	2.00	.000332	.022618
97805.8	17251.70	4.00	.000033	.032310
97805.8	17294.30	4.00	.000299	.032310
103618.1	3142.40	2.00	.086536	.133135
103618.1	3162.00	2.00	.087076	.144181
103668.1	3092.40	4.00	.008516	.140581
103668.1	3112.00	4.00	.054847	.151627
103668.1	3148.00	4.00	.109230	.144886
103736.8	3043.30	6.00	.003352	.145715
103736.8	3079.30	6.00	.030527	.138973
103736.8	3133.91	6.00	.138083	.095200
103618.1	3310.60	2.00	.017823	.133135
103618.1	3380.20	2.00	.090988	.144181
103668.1	3260.60	4.00	.043885	.140581
103668.1	3330.20	4.00	.014343	.151627
103668.1	3370.90	4.00	.048999	.144886
103736.8	3261.50	6.00	.031606	.145715
103736.8	3302.20	6.00	.074667	.138973
104665.0	2095.50	4.00	.002087	.083875
104665.0	2115.10	4.00	.000843	.094922
104665.0	2151.10	4.00	.000061	.088180
104686.0	2094.10	6.00	.002225	.093972
104686.0	2130.10	6.00	.000739	.087230
104686.0	2184.70	6.00	.000030	.043457
104718.0	2098.10	8.00	.002559	.082737
104718.0	2152.70	8.00	.000438	.038964
104767.0	2103.70	10.00	.002994	.033190
104864.0	1896.50	2.00	.000041	.077992
104864.0	1916.10	2.00	.000041	.089038
104890.0	1870.50	4.00	.000004	.083875
104890.0	1890.10	4.00	.000026	.094922
104890.0	1926.10	4.00	.000052	.088180
104957.0	1823.10	6.00	.000002	.093972
104957.0	1859.10	6.00	.000014	.087230
104957.0	1913.70	6.00	.000066	.043457
104864.0	2064.70	2.00	.000212	.077992
104864.0	2134.30	2.00	.001095	.089038
104890.0	2038.70	4.00	.000523	.083875
104890.0	2108.30	4.00	.000173	.094922

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
104890.0	2149.00	4.00	.000595	.088180
104957.0	2041.30	6.00	.000377	.093972
104957.0	2082.00	6.00	.000897	.087230
104987.0	1773.50	2.00	.000357	.077992
104987.0	1793.10	2.00	.000361	.089038
104998.0	1762.50	4.00	.000178	.083875
104998.0	1782.10	4.00	.000287	.094922
104998.0	1818.10	4.00	.000257	.088180
105011.0	1769.10	6.00	.000166	.093972
105011.0	1805.10	6.00	.000419	.087230
105011.0	1859.70	6.00	.000143	.043457
105020.0	1796.10	8.00	.000103	.082737
105020.0	1850.70	8.00	.000639	.038964
104987.0	1941.70	2.00	.001865	.077992
104987.0	2011.30	2.00	.000386	.089038
104998.0	1930.70	4.00	.000927	.083875
104998.0	2000.30	4.00	.001230	.094922
104998.0	2041.00	4.00	.000118	.088180
105011.0	1987.30	6.00	.001604	.093972
105011.0	2028.00	6.00	.000701	.087230
105020.0	2019.00	8.00	.002327	.082737
106760.5	3053.00	2.00	.051423	.069097
106760.5	3097.30	2.00	.010434	.069097
106780.1	3033.40	4.00	.025546	.080143
106780.1	3077.70	4.00	.033177	.080143
106780.1	3147.80	4.00	.003181	.080143
106816.1	3041.70	6.00	.043035	.073401
106816.1	3111.80	6.00	.018869	.073401
106870.7	3057.20	8.00	.061792	.029628
106760.5	5805.40	2.00	.005255	.069097
106760.5	5850.10	2.00	.001059	.069097
106780.1	5785.80	4.00	.002619	.080143
106780.1	5830.50	4.00	.003378	.080143
106780.1	5902.50	4.00	.000321	.080143
106816.1	5794.50	6.00	.004406	.073401
106816.1	5866.50	6.00	.001912	.073401
106870.7	5811.90	8.00	.006314	.029628
106760.5	7254.50	2.00	.001692	.069097
106760.5	7311.50	2.00	.000341	.069097
106780.1	7234.90	4.00	.000844	.080143
106780.1	7291.90	4.00	.001088	.080143
106780.1	7365.90	4.00	.000103	.080143
106816.1	7255.90	6.00	.001421	.073401
106816.1	7329.90	6.00	.000615	.073401
106870.7	7275.30	8.00	.002036	.029628

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
106760.5	8048.50	2.00	.000493	.069097
106760.5	8129.50	2.00	.000100	.069097
106780.1	8028.90	4.00	.000246	.080143
106780.1	8109.90	4.00	.000318	.080143
106780.1	8161.90	4.00	.000030	.080143
106816.1	8073.90	6.00	.000415	.073401
106816.1	8125.90	6.00	.000179	.073401
106870.7	8071.30	8.00	.000593	.029628
106760.5	8722.50	2.00	.000348	.069097
106760.5	8722.50	2.00	.000070	.069097
106780.1	8702.90	4.00	.000174	.080143
106780.1	8702.90	4.00	.000222	.080143
106780.1	8702.90	4.00	.000021	.080143
106816.1	8666.90	6.00	.000291	.073401
106816.1	8666.90	6.00	.000125	.073401
106870.7	8612.30	8.00	.000413	.029628
106760.5	9094.50	2.00	.000363	.069097
106760.5	9094.50	2.00	.000073	.069097
106780.1	9074.90	4.00	.000181	.080143
106780.1	9074.90	4.00	.000232	.080143
106780.1	9074.90	4.00	.000022	.080143
106816.1	9038.90	6.00	.000303	.073401
106816.1	9038.90	6.00	.000130	.073401
106870.7	8984.30	8.00	.000431	.029628
106760.5	9363.50	2.00	.000374	.069097
106760.5	9363.50	2.00	.000075	.069097
106780.1	9343.90	4.00	.000187	.080143
106780.1	9343.90	4.00	.000239	.080143
106780.1	9343.90	4.00	.000022	.080143
106816.1	9307.90	6.00	.000312	.073401
106816.1	9307.90	6.00	.000134	.073401
106870.7	9253.30	8.00	.000443	.029628
106760.5	9551.50	2.00	.000381	.069097
106760.5	9551.50	2.00	.000076	.069097
106780.1	9531.90	4.00	.000190	.080143
106780.1	9531.90	4.00	.000244	.080143
106780.1	9531.90	4.00	.000023	.080143
106816.1	9495.90	6.00	.000319	.073401
106816.1	9495.90	6.00	.000137	.073401
106870.7	9441.30	8.00	.000452	.029628
106760.5	3435.50	2.00	.017243	.069097
106780.1	3415.90	4.00	.003429	.080143
106780.1	3433.90	4.00	.013788	.080143
106816.1	3379.90	6.00	.000162	.073401
106816.1	3397.90	6.00	.002970	.073401

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
106816.1	3431.90	6.00	.014062	.073401
106870.7	3343.30	8.00	.000086	.029628
106870.7	3377.30	8.00	.001730	.029628
106870.7	3433.30	8.00	.015386	.029628
106760.5	3460.50	2.00	.001508	.069097
106760.5	3514.50	2.00	.001531	.069097
106780.1	3440.90	4.00	.000750	.080143
106780.1	3494.90	4.00	.001218	.080143
106780.1	3507.90	4.00	.001070	.080143
106816.1	3458.90	6.00	.000703	.073401
106816.1	3471.90	6.00	.001743	.073401
106816.1	3522.90	6.00	.000585	.073401
106870.7	3417.30	8.00	.000425	.029628
106870.7	3468.30	8.00	.002590	.029628
106760.5	3564.50	2.00	.000164	.069097
106760.5	3590.50	2.00	.000033	.069097
106780.1	3544.90	4.00	.000082	.080143
106780.1	3570.90	4.00	.000105	.080143
106780.1	3622.90	4.00	.000010	.080143
106816.1	3534.90	6.00	.000137	.073401
106816.1	3586.90	6.00	.000060	.073401
106870.7	3532.30	8.00	.000195	.029628
106760.5	5990.50	2.00	.001379	.069097
106780.1	5970.90	4.00	.000275	.080143
106780.1	5982.90	4.00	.001102	.080143
106816.1	5934.90	6.00	.000013	.073401
106816.1	5946.90	6.00	.000238	.073401
106816.1	5982.90	6.00	.001124	.073401
106870.7	5892.30	8.00	.000007	.029628
106870.7	5928.30	8.00	.000139	.029628
106870.7	5991.30	8.00	.001231	.029628
106760.5	6064.50	2.00	.000141	.069097
106760.5	6064.50	2.00	.000141	.069097
106780.1	6044.90	4.00	.000070	.080143
106780.1	6044.90	4.00	.000112	.080143
106780.1	6044.90	4.00	.000098	.080143
106816.1	6008.90	6.00	.000065	.073401
106816.1	6008.90	6.00	.000161	.073401
106816.1	6075.90	6.00	.000054	.073401
106870.7	5954.30	8.00	.000040	.029628
106870.7	6021.30	8.00	.000240	.029628
106760.5	6094.50	2.00	.000017	.069097
106760.5	6113.50	2.00	.000003	.069097
106780.1	6074.90	4.00	.000009	.080143
106780.1	6093.90	4.00	.000011	.080143

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
106780.1	6131.90	4.00	.000001	.080143
106816.1	6057.90	6.00	.000014	.073401
106816.1	6095.90	6.00	.000006	.073401
106870.7	6041.30	8.00	.000020	.029628
106760.5	7399.50	2.00	.000215	.069097
106780.1	7379.90	4.00	.000043	.080143
106780.1	7379.90	4.00	.000172	.080143
106816.1	7343.90	6.00	.000002	.073401
106816.1	7343.90	6.00	.000037	.073401
106816.1	7343.90	6.00	.000174	.073401
106870.7	7289.30	8.00	.000001	.029628
106870.7	7289.30	8.00	.000022	.029628
106870.7	7289.30	8.00	.000189	.029628
106760.5	7421.50	2.00	.000031	.069097
106760.5	7421.50	2.00	.000031	.069097
106780.1	7401.90	4.00	.000016	.080143
106780.1	7401.90	4.00	.000025	.080143
106780.1	7401.90	4.00	.000022	.080143
106816.1	7365.90	6.00	.000015	.073401
106816.1	7365.90	6.00	.000036	.073401
106816.1	7431.90	6.00	.000012	.073401
106870.7	7311.30	8.00	.000009	.029628
106870.7	7377.30	8.00	.000053	.029628
106760.5	7498.50	2.00	.000005	.069097
106760.5	7498.50	2.00	.000001	.069097
106780.1	7478.90	4.00	.000003	.080143
106780.1	7478.90	4.00	.000003	.080143
106780.1	7493.90	4.00	.000000	.080143
106816.1	7442.90	6.00	.000004	.073401
106816.1	7457.90	6.00	.000002	.073401
106870.7	7403.30	8.00	.000006	.029628
106760.5	8227.50	2.00	.000000	.069097
106760.5	8227.50	2.00	.000000	.069097
106780.1	8207.90	4.00	.000000	.080143
106780.1	8207.90	4.00	.000000	.080143
106780.1	8207.90	4.00	.000000	.080143
106816.1	8171.90	6.00	.000000	.073401
106816.1	8171.90	6.00	.000000	.073401
106816.1	8171.90	6.00	.000000	.073401
106870.7	8117.30	8.00	.000000	.029628
106870.7	8117.30	8.00	.000000	.029628
106760.5	8342.50	2.00	.000001	.069097
106760.5	8342.50	2.00	.000000	.069097
106780.1	8322.90	4.00	.000000	.080143
106780.1	8322.90	4.00	.000000	.080143

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
106780.1	8322.90	4.00	.000000	.080143
106816.1	8286.90	6.00	.000001	.073401
106816.1	8286.90	6.00	.000000	.073401
106870.7	8232.30	8.00	.000001	.029628
106928.7	2884.80	2.00	.011046	.069097
106928.7	2929.09	2.00	.056078	.069097
106998.3	2815.20	4.00	.026949	.080143
106998.3	2859.50	4.00	.008759	.080143
106998.3	2929.60	4.00	.030287	.080143
107039.0	2818.80	6.00	.019428	.073401
107039.0	2888.90	6.00	.046459	.073401
106928.7	5637.20	2.00	.000997	.069097
106928.7	5681.90	2.00	.005024	.069097
106998.3	5567.60	4.00	.002461	.080143
106998.3	5612.30	4.00	.000794	.080143
106998.3	5684.30	4.00	.002714	.080143
107039.0	5571.60	6.00	.001773	.073401
107039.0	5643.60	6.00	.004192	.073401
106928.7	7086.30	2.00	.000312	.069097
106928.7	7143.30	2.00	.001573	.069097
106998.3	7016.70	4.00	.000773	.080143
106998.3	7073.70	4.00	.000249	.080143
106998.3	7147.70	4.00	.000850	.080143
107039.0	7033.00	6.00	.000558	.073401
107039.0	7107.00	6.00	.001315	.073401
106928.7	7880.30	2.00	.000082	.069097
106928.7	7961.30	2.00	.000416	.069097
106998.3	7810.70	4.00	.000204	.080143
106998.3	7891.70	4.00	.000066	.080143
106998.3	7943.70	4.00	.000224	.080143
107039.0	7851.00	6.00	.000148	.073401
107039.0	7903.00	6.00	.000347	.073401
106928.7	8554.30	2.00	.000071	.069097
106928.7	8554.30	2.00	.000354	.069097
106998.3	8484.70	4.00	.000176	.080143
106998.3	8484.70	4.00	.000056	.080143
106998.3	8484.70	4.00	.000190	.080143
107039.0	8444.00	6.00	.000126	.073401
107039.0	8444.00	6.00	.000294	.073401
106928.7	8926.30	2.00	.000074	.069097
106928.7	8926.30	2.00	.000370	.069097
106998.3	8856.70	4.00	.000183	.080143
106998.3	8856.70	4.00	.000059	.080143
106998.3	8856.70	4.00	.000198	.080143
107039.0	8816.00	6.00	.000132	.073401

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
107039.0	8816.00	6.00	.000307	.073401
106928.7	9195.30	2.00	.000076	.069097
106928.7	9195.30	2.00	.000381	.069097
106998.3	9125.70	4.00	.000189	.080143
106998.3	9125.70	4.00	.000060	.080143
106998.3	9125.70	4.00	.000204	.080143
107039.0	9085.00	6.00	.000136	.073401
107039.0	9085.00	6.00	.000316	.073401
106928.7	9383.30	2.00	.000078	.069097
106928.7	9383.30	2.00	.000389	.069097
106998.3	9313.70	4.00	.000193	.080143
106998.3	9313.70	4.00	.000062	.080143
106998.3	9313.70	4.00	.000208	.080143
107039.0	9273.00	6.00	.000138	.073401
107039.0	9273.00	6.00	.000323	.073401
106928.7	3292.30	2.00	.007814	.069097
106928.7	3346.30	2.00	.007942	.069097
106998.3	3222.70	4.00	.000765	.080143
106998.3	3276.70	4.00	.004977	.080143
106998.3	3289.70	4.00	.009838	.080143
107039.0	3236.00	6.00	.000307	.073401
107039.0	3249.00	6.00	.002776	.073401
107039.0	3300.00	6.00	.012531	.073401
106928.7	3396.30	2.00	.000857	.069097
106928.7	3422.30	2.00	.004320	.069097
106998.3	3326.70	4.00	.002100	.080143
106998.3	3352.70	4.00	.000677	.080143
106998.3	3404.70	4.00	.002321	.080143
107039.0	3312.00	6.00	.001505	.073401
107039.0	3364.00	6.00	.003567	.073401
106928.7	5896.30	2.00	.000620	.069097
106928.7	5896.30	2.00	.000620	.069097
106998.3	5826.70	4.00	.000061	.080143
106998.3	5826.70	4.00	.000392	.080143
106998.3	5826.70	4.00	.000772	.080143
107039.0	5786.00	6.00	.000024	.073401
107039.0	5786.00	6.00	.000219	.073401
107039.0	5853.00	6.00	.000985	.073401
106928.7	5926.30	2.00	.000078	.069097
106928.7	5945.30	2.00	.000390	.069097
106998.3	5856.70	4.00	.000192	.080143
106998.3	5875.70	4.00	.000062	.080143
106998.3	5913.70	4.00	.000209	.080143
107039.0	5835.00	6.00	.000138	.073401
107039.0	5873.00	6.00	.000323	.073401

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
106928.7	7253.30	2.00	.000121	.069097
106928.7	7253.30	2.00	.000121	.069097
106998.3	7183.70	4.00	.000012	.080143
106998.3	7183.70	4.00	.000077	.080143
106998.3	7183.70	4.00	.000151	.080143
107039.0	7143.00	6.00	.000005	.073401
107039.0	7143.00	6.00	.000043	.073401
107039.0	7209.00	6.00	.000192	.073401
106928.7	7330.30	2.00	.000022	.069097
106928.7	7330.30	2.00	.000112	.069097
106998.3	7260.70	4.00	.000056	.080143
106998.3	7260.70	4.00	.000018	.080143
106998.3	7275.70	4.00	.000060	.080143
107039.0	7220.00	6.00	.000040	.073401
107039.0	7235.00	6.00	.000093	.073401
106928.7	8059.30	2.00	.000001	.069097
106928.7	8059.30	2.00	.000001	.069097
106998.3	7989.70	4.00	.000000	.080143
106998.3	7989.70	4.00	.000001	.080143
106998.3	7989.70	4.00	.000001	.080143
107039.0	7949.00	6.00	.000000	.073401
107039.0	7949.00	6.00	.000000	.073401
107039.0	7949.00	6.00	.000001	.073401
106928.7	8174.30	2.00	.000003	.069097
106928.7	8174.30	2.00	.000013	.069097
106998.3	8104.70	4.00	.000006	.080143
106998.3	8104.70	4.00	.000002	.080143
106998.3	8104.70	4.00	.000007	.080143
107039.0	8064.00	6.00	.000005	.073401
107039.0	8064.00	6.00	.000011	.073401

Таблица П. 8

База данных атомных линий

Ион: N+

φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	φ_7
209.4475	18.5854	0.0107095	-0.48985	4.313	-0.787	0.074

NLIN = 319, A = 14

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
.0	148909.40	1.00	.010608	1.910855
49.1	148891.90	3.00	.001531	5.717934
49.1	149028.20	3.00	.002554	2.882772
131.3	148809.70	5.00	.001530	5.727175

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
131.3	148946.00	5.00	.004595	2.892014
.0	196541.10	1.00	.001677	8.114037
49.1	196543.80	3.00	.000242	25.752080
49.1	196663.10	3.00	.000404	12.486510
131.3	196461.60	5.00	.000242	25.761330
131.3	196580.90	5.00	.000726	12.495760
.0	214212.40	1.00	.000613	.028283
49.1	214209.10	3.00	.000089	.013544
49.1	214336.20	3.00	.000148	.013544
131.3	214126.90	5.00	.000088	.022786
131.3	214254.00	5.00	.000266	.022786
49.1	187389.30	3.00	.000379	.300964
49.1	187413.30	3.00	.001136	.404357
131.3	187307.00	5.00	.000015	.310205
131.3	187331.10	5.00	.000227	.413598
131.3	187361.40	5.00	.001272	.294403
.0	188938.00	1.00	.000632	.071406
49.1	188809.00	3.00	.000152	.404357
49.1	188860.80	3.00	.000091	.300964
131.3	188726.80	5.00	.000273	.413598
131.3	188778.60	5.00	.000091	.310205
15315.7	171776.30	5.00	.001983	.413598
148941.0	17581.52	3.00	.023590	7.275256
148941.0	17642.30	3.00	.071016	7.110672
149077.3	17445.16	5.00	.000936	4.440094
149077.3	17505.94	5.00	.014093	4.275511
149077.3	17602.13	5.00	.079356	3.379665
148909.4	21664.00	1.00	.123177	2.790092
148941.0	21667.66	3.00	.017782	7.275256
148941.0	21726.03	3.00	.029717	7.110672
149077.3	21531.30	5.00	.017670	4.440094
149077.3	21589.67	5.00	.053154	4.275511
148941.0	53773.97	3.00	.000688	12.271980
148941.0	53824.89	3.00	.002066	11.153850
149077.3	53637.61	5.00	.000027	9.436814
149077.3	53688.53	5.00	.000412	8.318690
149077.3	53784.73	5.00	.002313	5.111028
148909.4	54255.33	1.00	.002019	4.872397
148941.0	54247.83	3.00	.000291	12.271980
148941.0	54318.73	3.00	.000486	11.153850
149077.3	54111.47	5.00	.000291	9.436814
149077.3	54182.38	5.00	.000873	8.318690
149188.7	15422.86	3.00	.147017	7.275256
149188.7	52981.17	3.00	.009954	12.271980
164611.6	33247.69	3.00	.048805	27.309410

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
164611.6	50216.41	3.00	.008458	1.570866
164611.6	25509.56	3.00	.012208	1.858286
164611.6	46723.91	3.00	.000486	1.949624
166522.5	30070.39	3.00	.010313	27.309410
166522.5	30189.69	3.00	.000690	14.043830
166583.3	30009.61	5.00	.018526	27.144820
166583.3	30128.91	5.00	.006200	13.879250
166679.5	30032.72	7.00	.024721	12.983410
166522.5	47735.72	3.00	.001540	1.570866
166522.5	47862.81	3.00	.000103	1.570866
166583.3	47674.94	5.00	.002768	1.406283
166583.3	47802.03	5.00	.000925	1.406283
166679.5	47705.84	7.00	.003694	.510437
166522.5	19989.89	3.00	.010881	1.961679
166583.3	19929.11	5.00	.001205	1.797095
166583.3	19988.53	5.00	.009672	1.677900
166679.5	19832.92	7.00	.000024	.901250
166679.5	19892.34	7.00	.000859	.782054
166679.5	19973.89	7.00	.009985	.620882
166522.5	20915.86	3.00	.001549	1.858286
166522.5	20939.89	3.00	.000517	1.961679
166583.3	20855.08	5.00	.000309	1.693702
166583.3	20879.11	5.00	.001431	1.797095
166583.3	20909.45	5.00	.000321	1.677900
166679.5	20782.92	7.00	.000228	.901250
166679.5	20813.27	7.00	.001826	.782054
166522.5	22335.61	3.00	.000004	1.961679
166522.5	22387.41	3.00	.000063	1.858286
166583.3	22274.83	5.00	.000037	1.797095
166583.3	22326.63	5.00	.000113	1.693702
166679.5	22178.64	7.00	.000149	.901250
166522.5	43152.81	3.00	.000059	2.430482
166583.3	43092.03	5.00	.000007	2.265899
166583.3	43156.23	5.00	.000053	1.978565
166679.5	42995.84	7.00	.000000	1.370053
166679.5	43060.05	7.00	.000005	1.082719
166679.5	43145.84	7.00	.000054	.794354
166522.5	43717.31	3.00	.000000	1.949624
166522.5	43743.81	3.00	.000000	2.430482
166583.3	43656.53	5.00	.000000	1.785040
166583.3	43683.03	5.00	.000000	2.265899
166583.3	43718.64	5.00	.000000	1.978565
166679.5	43586.84	7.00	.000000	1.370053
166679.5	43622.45	7.00	.000000	1.082719
166522.5	44182.92	3.00	.000000	2.430482

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
166522.5	44229.02	3.00	.000000	1.949624
166583.3	44122.14	5.00	.000000	2.265899
166583.3	44168.23	5.00	.000001	1.785040
166679.5	44025.95	7.00	.000001	1.370053
170573.4	25967.72	1.00	.058801	8.993274
170608.6	25984.25	3.00	.008493	27.309410
170608.6	26103.55	3.00	.014219	14.043830
170667.0	25925.88	5.00	.008474	27.144820
170667.0	26045.17	5.00	.025538	13.879250
170573.4	43639.03	1.00	.007636	.907519
170608.6	43649.58	3.00	.001102	1.570866
170608.6	43776.67	3.00	.001843	1.570866
170667.0	43591.20	5.00	.001101	1.406283
170667.0	43718.30	5.00	.003313	1.406283
170608.6	16829.72	3.00	.002259	1.858286
170608.6	16853.75	3.00	.006788	1.961679
170667.0	16771.34	5.00	.000090	1.693702
170667.0	16795.38	5.00	.001353	1.797095
170667.0	16825.72	5.00	.007590	1.677900
170573.4	18364.58	1.00	.005862	.950643
170608.6	18249.47	3.00	.001401	1.961679
170608.6	18301.27	3.00	.000843	1.858286
170667.0	18191.09	5.00	.002514	1.797095
170667.0	18242.89	5.00	.000840	1.693702
170608.6	39631.17	3.00	.000035	1.949624
170608.6	39657.67	3.00	.000105	2.430482
170667.0	39572.80	5.00	.000001	1.785040
170667.0	39599.30	5.00	.000021	2.265899
170667.0	39634.91	5.00	.000118	1.978565
170573.4	40203.63	1.00	.000011	.907519
170608.6	40096.78	3.00	.000003	2.430482
170608.6	40142.88	3.00	.000002	1.949624
170667.0	40038.41	5.00	.000005	2.265899
170667.0	40084.50	5.00	.000002	1.785040
174212.9	12879.06	5.00	.007260	1.797095
174212.9	35713.98	5.00	.000939	2.265899
186512.4	16202.56	5.00	.001827	6.958399
186512.4	16253.48	5.00	.000339	5.840275
186512.4	16349.69	5.00	.000010	2.632612
186571.8	16194.06	7.00	.001932	5.721079
186571.8	16290.27	7.00	.000243	2.513417
186653.3	16208.72	9.00	.002176	2.352244
186512.4	24521.33	5.00	.000317	.390813
186512.4	24544.69	5.00	.000040	.489482
186571.8	24461.91	7.00	.000028	.271617

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
186571.8	24485.27	7.00	.000299	.370286
186571.8	24489.23	7.00	.000029	.271617
186653.3	24403.72	9.00	.000022	.209114
186653.3	24407.69	9.00	.000333	.110444
186512.4	24775.64	5.00	.004001	.489482
186571.8	24716.22	7.00	.000249	.370286
186571.8	24723.86	7.00	.003743	.271617
186653.3	24634.67	9.00	.000003	.209114
186653.3	24642.31	9.00	.000193	.110444
186653.3	24737.42	9.00	.003798	.110444
186512.4	24898.88	5.00	.000000	.489482
186512.4	24903.83	5.00	.000002	.390813
186512.4	24974.91	5.00	.000008	.390813
186571.8	24839.45	7.00	.000001	.370286
186571.8	24844.41	7.00	.000009	.271617
186653.3	24757.91	9.00	.000010	.209114
186512.4	34557.83	5.00	.000007	.390813
186571.8	34498.41	7.00	.000053	.271617
186571.8	34502.50	7.00	.000005	.271617
186653.3	34416.86	9.00	.000004	.110444
186653.3	34420.95	9.00	.000059	.110444
186512.4	34715.33	5.00	.000807	.390813
186571.8	34655.91	7.00	.000050	.271617
186571.8	34660.91	7.00	.000756	.271617
186653.3	34574.36	9.00	.000001	.110444
186653.3	34579.36	9.00	.000039	.110444
186653.3	34648.86	9.00	.000766	.110444
187092.0	18258.70	5.00	.001864	5.840275
187092.0	24399.16	5.00	.002429	.390813
187438.3	15276.59	3.00	.000445	6.855006
187438.3	15327.52	3.00	.000149	5.736882
187462.4	15252.56	5.00	.000089	6.958399
187462.4	15303.48	5.00	.000412	5.840275
187462.4	15399.69	5.00	.000093	2.632612
187492.7	15273.14	7.00	.000066	5.721079
187492.7	15369.34	7.00	.000530	2.513417
187438.3	15750.45	3.00	.000707	6.855006
187438.3	15821.36	3.00	.000047	5.736882
187462.4	15726.42	5.00	.001270	6.958399
187462.4	15797.33	5.00	.000425	5.840275
187492.7	15766.98	7.00	.001698	5.721079
187438.3	23595.36	3.00	.004129	.287420
187462.4	23571.33	5.00	.000458	.390813
187462.4	23594.69	5.00	.003670	.489482
187492.7	23540.98	7.00	.000009	.271617

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
187492.7	23564.34	7.00	.000327	.370286
187492.7	23568.31	7.00	.003788	.271617
187438.3	23977.86	3.00	.000125	.287420
187438.3	24048.94	3.00	.000375	.287420
187462.4	23948.88	5.00	.000077	.489482
187462.4	23953.83	5.00	.000346	.390813
187462.4	24024.91	5.00	.000075	.390813
187492.7	23918.53	7.00	.000442	.370286
187492.7	23923.48	7.00	.000055	.271617
187462.4	33607.83	5.00	.000609	.390813
187492.7	33577.48	7.00	.000054	.271617
187492.7	33581.58	7.00	.000629	.271617
188858.1	13856.84	5.00	.000001	6.958399
188858.1	13907.77	5.00	.000011	5.840275
188858.1	14003.97	5.00	.000064	2.632612
188909.9	13805.05	3.00	.000019	6.855006
188909.9	13855.97	3.00	.000056	5.736882
188858.1	14330.70	5.00	.000271	6.958399
188858.1	14401.61	5.00	.000818	5.840275
188909.9	14278.91	3.00	.000270	6.855006
188909.9	14349.81	3.00	.000453	5.736882
188938.0	14226.75	1.00	.001865	3.032948
188858.1	22553.16	5.00	.003994	.489482
188858.1	22558.11	5.00	.000713	.390813
188858.1	22629.19	5.00	.000048	.390813
188909.9	22506.31	3.00	.003559	.287420
188909.9	22577.39	3.00	.001190	.287420
189336.0	21694.91	7.00	.002767	.370286
190121.2	12048.75	3.00	.003911	6.855006
196592.9	6122.06	3.00	.036313	32.306130
196592.9	6172.98	3.00	.109846	31.188000
196712.2	6002.77	5.00	.001424	19.040560
196712.2	6053.69	5.00	.021545	17.922430
196712.2	6149.89	5.00	.122567	14.714770
196541.1	6623.61	1.00	.162813	11.075580
196592.9	6595.92	3.00	.023402	32.306130
196592.9	6666.83	3.00	.039422	31.188000
196712.2	6476.63	5.00	.022979	19.040560
196712.2	6547.53	5.00	.069690	17.922430
197859.3	4310.63	3.00	.194228	32.306130
202169.9	12658.09	3.00	.101083	6.567586
202169.9	9165.59	3.00	.016744	6.946344
202714.9	11543.27	3.00	.019523	6.567586
202714.9	11670.36	3.00	.001316	6.567586
202765.9	11492.34	5.00	.034987	5.449462

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
202765.9	11619.44	5.00	.011791	5.449462
202862.1	11523.23	7.00	.046775	2.241800
202714.9	6960.36	3.00	.016154	7.427202
202765.9	6909.44	5.00	.001782	6.309078
202765.9	6973.64	5.00	.014387	6.021744
202862.1	6813.23	7.00	.000036	3.101416
202862.1	6877.44	7.00	.001267	2.814081
202862.1	6963.23	7.00	.014842	2.525716
202714.9	7524.86	3.00	.002304	6.946344
202714.9	7551.36	3.00	.000771	7.427202
202765.9	7473.94	5.00	.000458	5.828220
202765.9	7500.44	5.00	.002126	6.309078
202765.9	7536.05	5.00	.000479	6.021744
202862.1	7404.23	7.00	.000336	3.101416
202862.1	7439.84	7.00	.002700	2.814081
202714.9	7990.47	3.00	.000006	7.427202
202714.9	8036.56	3.00	.000090	6.946344
202765.9	7939.55	5.00	.000053	6.309078
202765.9	7985.64	5.00	.000160	5.828220
202862.1	7843.34	7.00	.000210	3.101416
203164.7	11047.70	1.00	.087174	2.989825
203188.8	11069.41	3.00	.012607	6.567586
203188.8	11196.50	3.00	.021253	6.567586
203259.7	10998.50	5.00	.012527	5.449462
203259.7	11125.59	5.00	.038014	5.449462
203188.8	7051.00	3.00	.003718	6.946344
203188.8	7077.50	3.00	.011197	7.427202
203259.7	6980.09	5.00	.000147	5.828220
203259.7	7006.59	5.00	.002217	6.309078
203259.7	7042.20	5.00	.012479	6.021744
203164.7	7612.30	1.00	.009122	2.989825
203188.8	7516.61	3.00	.002167	7.427202
203188.8	7562.70	3.00	.001308	6.946344
203259.7	7445.70	5.00	.003864	6.309078
203259.7	7491.80	5.00	.001296	5.828220
205350.7	4576.22	5.00	.010957	6.309078
209675.3	1358.41	5.00	.000055	.859616
209675.3	1381.77	5.00	.000007	.958285
209739.5	1294.20	7.00	.000005	.572282
209739.5	1317.56	7.00	.000051	.670951
209739.5	1321.53	7.00	.000005	.572282
209825.3	1231.77	9.00	.000004	.382586
209825.3	1235.73	9.00	.000053	.283917
209675.3	1612.72	5.00	.000893	.958285
209739.5	1548.52	7.00	.000054	.670951

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
209739.5	1556.16	7.00	.000808	.572282
209825.3	1462.72	9.00	.000001	.382586
209825.3	1470.36	9.00	.000040	.283917
209825.3	1565.47	9.00	.000824	.283917
209675.3	1735.95	5.00	.000000	.958285
209675.3	1740.91	5.00	.000000	.859616
209675.3	1811.98	5.00	.000002	.859616
209739.5	1671.75	7.00	.000000	.670951
209739.5	1676.70	7.00	.000002	.572282
209825.3	1585.95	9.00	.000002	.382586
209675.3	11394.91	5.00	.000030	.859616
209739.5	11330.70	7.00	.000225	.572282
209739.5	11334.80	7.00	.000022	.572282
209825.3	11244.91	9.00	.000017	.283917
209825.3	11249.00	9.00	.000249	.283917
209675.3	11552.41	5.00	.002758	.859616
209739.5	11488.20	7.00	.000171	.572282
209739.5	11493.20	7.00	.002572	.572282
209825.3	11402.41	9.00	.000002	.283917
209825.3	11407.41	9.00	.000132	.283917
209825.3	11476.91	9.00	.002604	.283917
209926.9	1564.23	5.00	.000534	.859616
210239.8	793.91	3.00	.000396	.378758
210266.3	767.41	5.00	.000043	.859616
210266.3	790.77	5.00	.000351	.958285
210301.9	731.80	7.00	.000001	.572282
210301.9	755.16	7.00	.000030	.670951
210301.9	759.13	7.00	.000348	.572282
210239.8	1176.41	3.00	.000020	.378758
210239.8	1247.48	3.00	.000062	.378758
210266.3	1144.95	5.00	.000012	.958285
210266.3	1149.91	5.00	.000053	.859616
210266.3	1220.98	5.00	.000012	.859616
210301.9	1109.34	7.00	.000066	.670951
210301.9	1114.30	7.00	.000008	.572282
210266.3	10803.91	5.00	.003008	.859616
210301.9	10768.30	7.00	.000268	.572282
210301.9	10772.39	7.00	.003099	.572282
210705.4	705.84	5.00	.000347	.958285
210705.4	710.80	5.00	.000062	.859616
210705.4	781.88	5.00	.000005	.859616
210751.5	664.70	3.00	.000292	.378758
210751.5	735.78	3.00	.000108	.378758
211030.9	73.89	7.00	.000022	.670951
211030.9	10106.69	7.00	.000030	.098669

Таблица П.9

База данных атомных линий

Атом: O

Φ_1	Φ_2	Φ_3	Φ_4	Φ_5	Φ_6	Φ_7
211.14	18.574	0.0115484	-0.48578	4.2308	-0.744	0.044

NLIN = 258, A = 16

E	ω	g	f	S4
.0	101135.00	5.00	.021690	.003322
.0	101147.20	5.00	.003874	.014903
.0	101155.10	5.00	.000258	.013607
158.5	100988.70	3.00	.019338	.013864
158.5	100996.60	3.00	.006446	.012567
.0	113910.20	5.00	.011139	.014903
.0	113920.60	5.00	.003713	.013607
158.5	113751.70	3.00	.006179	.013864
158.5	113762.10	3.00	.003708	.012567
226.5	113700.30	1.00	.025676	.000088
.0	97488.14	5.00	.000018	.016848
.0	97488.14	5.00	.000003	.025912
.0	97488.14	5.00	.000000	.012594
158.5	97329.64	3.00	.000016	.024872
158.5	97329.64	3.00	.000005	.011554
.0	107582.70	5.00	.003294	.003310
.0	107582.70	5.00	.000588	.003310
.0	107582.70	5.00	.000039	.003310
158.5	107424.20	3.00	.002937	.002270
158.5	107424.20	3.00	.000979	.002270
.0	123296.60	5.00	.000030	.025912
.0	123355.20	5.00	.000010	.012594
158.5	123138.10	3.00	.000017	.024872
158.5	123196.70	3.00	.000010	.011554
226.5	123160.40	1.00	.000070	.000088
.0	133618.00	5.00	.001194	.003310
.0	133618.00	5.00	.000398	.003310
158.5	133459.50	3.00	.000663	.002270
158.5	133459.50	3.00	.000398	.002270
226.5	133391.50	1.00	.002753	.000088
15867.7	86793.93	5.00	.227418	.014903
15867.7	106931.00	5.00	.033590	.003310
15867.7	113266.30	5.00	.012153	.003310
15867.7	116059.30	5.00	.005891	.003310
15867.7	117545.30	5.00	.001956	.003310
86625.4	10795.02	3.00	.005574	.024872

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
86625.4	10795.15	3.00	.005574	.024872
86625.4	10795.15	3.00	.007167	.011554
86627.4	10793.00	5.00	.008917	.016848
86627.4	10793.00	5.00	.005573	.025912
86627.4	10793.13	5.00	.005573	.025912
86627.4	10793.13	5.00	.001433	.012594
86631.0	10789.20	7.00	.012280	.010120
86631.0	10789.33	7.00	.003184	.015384
86631.0	10789.33	7.00	.000455	.024448
86631.0	10789.46	7.00	.000455	.024448
86625.4	16239.74	3.00	.000197	.022840
86625.4	16239.74	3.00	.000253	.013201
86627.4	16237.73	5.00	.000315	.020139
86627.4	16237.73	5.00	.000197	.023880
86627.4	16237.73	5.00	.000051	.014241
86631.0	16234.05	7.00	.000433	.001846
86631.0	16234.05	7.00	.000112	.018675
86631.0	16234.05	7.00	.000016	.022416
86625.4	20947.75	3.00	.000187	.002270
86625.4	20947.75	3.00	.000240	.002270
86627.4	20945.73	5.00	.000298	.003310
86627.4	20945.73	5.00	.000187	.003310
86627.4	20945.73	5.00	.000048	.003310
86631.0	20942.06	7.00	.000411	.001846
86631.0	20942.06	7.00	.000107	.001846
86631.0	20942.06	7.00	.000015	.001846
88630.8	8857.30	5.00	.013979	.032531
88630.8	8857.30	5.00	.002496	.041595
88630.8	8857.30	5.00	.000166	.028277
88630.3	8857.84	3.00	.012482	.024842
88630.3	8857.84	3.00	.004161	.011524
88630.8	14277.30	5.00	.000800	.035821
88630.8	14277.30	5.00	.000143	.039563
88630.8	14277.30	5.00	.000010	.029924
88630.3	14277.84	3.00	.000714	.022810
88630.3	14277.84	3.00	.000238	.013171
88630.8	18951.86	5.00	.000435	.018992
88630.8	18951.86	5.00	.000078	.018992
88630.8	18951.86	5.00	.000005	.018992
88630.3	18952.41	3.00	.000389	.002239
88630.3	18952.41	3.00	.000130	.002239
97420.2	1674.28	9.00	.002758	.022259
97420.4	1672.95	7.00	.001837	.038467
97420.4	1674.16	7.00	.000919	.027523
97420.4	1672.27	5.00	.000964	.044418

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
97420.4	1672.95	5.00	.001607	.047531
97420.4	1674.16	5.00	.000184	.036587
97420.5	1672.14	5.00	.000964	.044418
97420.5	1672.81	5.00	.001607	.047531
97420.5	1674.02	5.00	.000184	.036587
97420.5	1672.14	3.00	.002066	.031100
97420.5	1672.81	3.00	.000689	.034213
97488.1	2192.26	7.00	.003179	.038467
97488.1	2192.26	5.00	.000795	.047531
97488.1	2192.26	5.00	.002384	.044418
97488.1	2192.26	3.00	.000088	.034213
97488.1	2192.26	3.00	.001324	.031100
97488.1	6381.26	7.00	.000065	.043921
97488.1	6381.26	5.00	.000016	.052985
97488.1	6381.26	5.00	.000049	.053068
97488.1	6381.26	3.00	.000002	.039667
97488.1	6381.26	3.00	.000027	.039750
97488.1	8423.16	7.00	.000007	.086719
97488.1	8423.16	5.00	.000002	.095783
97488.1	8423.16	5.00	.000005	.095984
97488.1	8423.16	3.00	.000000	.082465
97488.1	8423.16	3.00	.000003	.082665
99092.6	3772.45	3.00	.006517	.042386
99092.6	3772.45	3.00	.008380	.032747
99093.3	3771.78	5.00	.010426	.041757
99093.3	3771.78	5.00	.006516	.045499
99093.3	3771.78	5.00	.001676	.035860
99094.5	3770.57	7.00	.014358	.013984
99094.5	3770.57	7.00	.003722	.030813
99094.5	3770.57	7.00	.000532	.034555
99092.6	6292.66	3.00	.000804	.084024
99092.6	6292.66	3.00	.001034	.054875
99093.3	6291.98	5.00	.001287	.075821
99093.3	6291.98	5.00	.000804	.087137
99093.3	6291.98	5.00	.000207	.057988
99094.5	6290.77	7.00	.001772	.013984
99094.5	6290.77	7.00	.000459	.064877
99094.5	6290.77	7.00	.000066	.076192
99092.6	7658.56	3.00	.000244	.021815
99092.6	7658.56	3.00	.000314	.021815
99093.3	7657.89	5.00	.000391	.024928
99093.3	7657.89	5.00	.000244	.024928
99093.3	7657.89	5.00	.000063	.024928
99094.5	7656.68	7.00	.000539	.013984
99094.5	7656.68	7.00	.000140	.013984

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
99094.5	7656.68	7.00	.000020	.013984
99092.6	8480.46	3.00	.000027	.021815
99092.6	8480.46	3.00	.000034	.021815
99093.3	8479.79	5.00	.000042	.024928
99093.3	8479.79	5.00	.000027	.024928
99093.3	8479.79	5.00	.000007	.024928
99094.5	8478.58	7.00	.000058	.013984
99094.5	8478.58	7.00	.000015	.013984
99094.5	8478.58	7.00	.000002	.013984
99680.4	3227.74	5.00	.017463	.041757
99680.4	3227.74	5.00	.003118	.045499
99680.4	3227.74	5.00	.000208	.035860
99680.4	3227.74	3.00	.015592	.042386
99680.4	3227.74	3.00	.005197	.032747
99680.4	5728.18	5.00	.001479	.075821
99680.4	5728.18	5.00	.000264	.087137
99680.4	5728.18	5.00	.000018	.057988
99680.4	5728.18	3.00	.001321	.084024
99680.4	5728.18	3.00	.000440	.054875
99680.4	7085.40	5.00	.000394	.024928
99680.4	7085.40	5.00	.000070	.024928
99680.4	7085.40	5.00	.000005	.024928
99680.4	7085.40	3.00	.000352	.021815
99680.4	7085.40	3.00	.000117	.021815
99680.4	7902.30	5.00	.000022	.024928
99680.4	7902.30	5.00	.000004	.024928
99680.4	7902.30	5.00	.000000	.024928
99680.4	7902.30	3.00	.000020	.021815
99680.4	7902.30	3.00	.000007	.021815
101135.0	24639.47	7.00	.000060	.013997
101135.0	24647.05	7.00	.000007	.024941
101147.2	24627.30	5.00	.000010	.025578
101147.2	24634.88	5.00	.000047	.036522
101147.2	24639.93	5.00	.000010	.033409
101155.1	24626.99	3.00	.000017	.035226
101155.1	24632.04	3.00	.000050	.032113
102661.6	13968.88	5.00	.390713	.030586
102908.1	961.26	7.00	.006283	.047212
102908.1	961.26	5.00	.001571	.050953
102908.1	961.26	5.00	.004712	.051036
102908.1	961.26	3.00	.000175	.041314
102908.1	961.26	3.00	.002618	.041398
102908.1	3003.16	7.00	.000106	.090010
102908.1	3003.16	5.00	.000026	.093751
102908.1	3003.16	5.00	.000079	.093952

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
102908.1	3003.16	3.00	.000003	.084112
102908.1	3003.16	3.00	.000044	.084313
103869.4	1539.18	5.00	.021271	.081276
103869.4	1539.18	5.00	.003798	.092591
103869.4	1539.18	5.00	.000253	.063442
103869.4	1539.18	3.00	.018992	.092674
103869.4	1539.18	3.00	.006331	.063525
103869.4	2896.40	5.00	.001942	.030383
103869.4	2896.40	5.00	.000347	.030383
103869.4	2896.40	5.00	.000023	.030383
103869.4	2896.40	3.00	.001734	.030466
103869.4	2896.40	3.00	.000578	.030466
103869.4	3713.30	5.00	.000460	.030383
103869.4	3713.30	5.00	.000082	.030383
103869.4	3713.30	5.00	.000005	.030383
103869.4	3713.30	3.00	.000411	.030466
103869.4	3713.30	3.00	.000137	.030466
105408.6	502.72	7.00	.009233	.124074
105408.6	502.72	5.00	.002308	.135389
105408.6	502.72	5.00	.006925	.135589
105408.6	502.72	3.00	.000256	.106240
105408.6	502.72	3.00	.003847	.106440
105911.3	854.50	5.00	.024789	.073181
105911.3	854.50	5.00	.004427	.073181
105911.3	854.50	5.00	.000295	.073181
105911.3	854.50	3.00	.022133	.073381
105911.3	854.50	3.00	.007378	.073381
105911.3	1671.41	5.00	.002501	.073181
105911.3	1671.41	5.00	.000447	.073181
105911.3	1671.41	5.00	.000030	.073181
105911.3	1671.41	3.00	.002233	.073381
105911.3	1671.41	3.00	.000744	.073381
105911.3	2205.30	5.00	.000280	.073181
105911.3	2205.30	5.00	.000050	.073181
105911.3	2205.30	5.00	.000003	.073181
105911.3	2205.30	3.00	.000250	.073381
105911.3	2205.30	3.00	.000083	.073381
113910.2	13371.65	5.00	.097926	.013345
113910.2	13377.41	5.00	.017494	.030586
113910.2	13380.73	5.00	.001167	.013833
113920.6	13366.98	3.00	.087403	.029290
113920.6	13370.30	3.00	.029142	.012537
113995.8	10330.51	7.00	.022593	.015290
113995.8	15740.79	7.00	.000902	.018580
115918.3	11749.55	3.00	.205971	.012537

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
116630.5	6168.20	5.00	.229399	.018992
116630.5	12503.49	5.00	.014675	.018992
116630.5	15296.49	5.00	.004347	.018992
116630.5	16782.49	5.00	.001947	.018992
123296.6	2477.91	5.00	.000600	.036587
123296.6	2485.49	5.00	.000107	.047531
123296.6	2490.54	5.00	.000007	.044418
123355.2	2426.89	3.00	.000525	.034213
123355.2	2431.94	3.00	.000175	.031100
124213.2	1561.33	9.00	.001747	.022259
124213.2	1561.33	7.00	.000194	.027523
124213.2	1568.91	7.00	.001561	.038467
124213.2	1561.33	5.00	.000008	.036587
124213.2	1568.91	5.00	.000273	.047531
124213.2	1573.96	5.00	.001480	.044418
125774.5	3892.04	7.00	.009371	.013984
125774.5	3892.04	7.00	.000810	.030813
125774.5	3892.04	7.00	.000023	.034555
125782.1	3884.45	5.00	.009052	.041757
125782.1	3884.45	5.00	.001132	.045499
125787.1	3879.41	3.00	.010171	.042386
125774.5	4195.09	7.00	.001448	.034555
125782.1	4187.51	5.00	.000361	.045499
125782.1	4196.95	5.00	.001087	.035860
125787.1	4182.46	3.00	.000040	.042386
125787.1	4191.90	3.00	.000603	.032747
125774.5	6416.20	7.00	.001203	.013984
125774.5	6416.20	7.00	.000104	.064877
125774.5	6416.20	7.00	.000003	.076192
125782.1	6408.61	5.00	.001163	.075821
125782.1	6408.61	5.00	.000145	.087137
125787.1	6403.56	3.00	.001308	.084024
125774.5	6535.49	7.00	.000221	.076192
125782.1	6527.91	5.00	.000055	.087137
125782.1	6527.91	5.00	.000166	.057988
125787.1	6522.86	3.00	.000006	.084024
125787.1	6522.86	3.00	.000092	.054875
125774.5	7843.49	7.00	.000071	.013984
125782.1	7835.91	5.00	.000018	.024928
125782.1	7835.91	5.00	.000053	.024928
125787.1	7830.86	3.00	.000002	.021815
125787.1	7830.86	3.00	.000030	.021815

Таблица П.10

База данных атомных линий

Ион: O+

Φ_1	Φ_2	Φ_3	Φ_4	Φ_5	Φ_6	Φ_7
210.7914	22.8954	- 0.0041646	0.2279	- 7.7825	5.298	- 0.982

NLIN = 802, A = 16

E	ω	g	f	C4
26808.4	162260.00	6.00	.010517	5.059685
26829.4	162059.00	4.00	.008753	5.091462
26829.4	162239.00	4.00	.001753	5.093534
26808.4	213707.90	6.00	.001461	18.717790
26829.4	213499.30	4.00	.001216	18.743430
26829.4	213686.90	4.00	.000243	18.751640
26808.4	231793.30	6.00	.000560	47.382060
26829.4	231579.20	4.00	.000466	41.309530
26829.4	231772.30	4.00	.000093	47.415910
26808.4	205987.90	6.00	.000086	.600827
26808.4	206150.90	6.00	.001727	.371639
26829.4	205966.90	4.00	.001812	.634677
26808.4	206621.70	6.00	.000019	.565324
26829.4	206600.70	4.00	.000003	.599174
26829.4	206714.70	4.00	.000016	.325199
26808.4	207594.10	6.00	.000016	.565324
26808.4	207646.00	6.00	.000221	.600827
26829.4	207573.10	4.00	.000213	.599174
26829.4	207625.00	4.00	.000024	.634677
40466.9	148421.50	4.00	.002030	5.091462
40466.9	148601.50	4.00	.010162	5.093534
40468.4	148420.00	2.00	.008119	5.063797
40468.4	148600.00	2.00	.004065	5.065870
40466.9	199861.80	4.00	.000276	18.743430
40466.9	200049.40	4.00	.001382	18.751640
40468.4	199860.30	2.00	.001104	18.715770
40468.4	200047.90	2.00	.000553	18.723980
40466.9	217941.70	4.00	.000103	41.309530
40466.9	218134.80	4.00	.000513	47.415910
40468.4	217940.20	2.00	.000410	41.281870
40468.4	218133.30	2.00	.000205	47.388250
40466.9	192963.20	4.00	.000450	.599174
40466.9	193077.20	4.00	.000090	.325199
40468.4	192961.70	2.00	.000180	.571510
40468.4	193075.70	2.00	.000360	.297534
40466.9	193935.60	4.00	.000135	.599174

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
40466.9	193987.60	4.00	.001211	.634677
40468.4	193934.10	2.00	.001345	.571510
185235.4	21495.44	2.00	.048909	6.761891
185235.4	21550.98	2.00	.049036	7.344004
185340.7	21390.11	4.00	.004867	6.763964
185340.7	21445.66	4.00	.031230	7.346076
185340.7	21537.22	4.00	.061746	6.637757
185499.2	21287.14	6.00	.001937	4.736184
185499.2	21378.70	6.00	.017512	4.027864
185499.2	21503.31	6.00	.078284	2.904894
185235.4	23110.81	2.00	.010633	6.761891
185235.4	23156.91	2.00	.053272	7.344004
185340.7	23005.48	4.00	.026462	6.763964
185340.7	23051.58	4.00	.008485	7.346076
185340.7	23143.55	4.00	.028750	6.637757
185499.2	22893.06	6.00	.018959	4.736184
185499.2	22985.03	6.00	.044416	4.027864
185235.4	60532.44	2.00	.000826	9.395374
185235.4	60580.94	2.00	.000827	12.237820
185340.7	60427.11	4.00	.000082	9.397447
185340.7	60475.61	4.00	.000528	12.239900
185340.7	60562.16	4.00	.001042	9.816219
185499.2	60317.09	6.00	.000033	9.630004
185499.2	60403.64	6.00	.000297	7.206326
185499.2	60529.75	6.00	.001322	4.474947
185235.4	75723.64	2.00	.000675	7.631292
185340.7	75618.31	4.00	.000431	7.633365
185340.7	75701.31	4.00	.000850	9.527895
185499.2	75459.80	6.00	.000027	5.023472
185499.2	75542.80	6.00	.000242	6.918002
185499.2	75680.80	6.00	.001079	2.769694
185235.4	76026.34	2.00	.000436	7.631292
185340.7	75921.02	4.00	.000070	7.633365
185340.7	76013.61	4.00	.000235	9.527895
185499.2	75762.50	6.00	.000156	5.023472
185499.2	75855.09	6.00	.000365	6.918002
188888.4	22633.61	2.00	.112150	7.344004
189068.4	22453.61	4.00	.011126	7.346076
189068.4	22644.28	4.00	.100982	6.637757
188888.4	25281.36	2.00	.050087	6.761891
188888.4	25341.11	2.00	.025103	7.344004
189068.4	25101.36	4.00	.012433	6.763964
189068.4	25161.11	4.00	.062311	7.346076
188888.4	59120.72	2.00	.000096	12.237820
189068.4	58940.72	4.00	.000010	12.239900

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
189068.4	59116.92	4.00	.000086	9.816219
188888.4	59536.97	2.00	.000000	9.395374
188888.4	59625.86	2.00	.000000	12.237820
189068.4	59356.97	4.00	.000000	9.397447
189068.4	59445.86	4.00	.000001	12.239900
188888.4	72809.13	2.00	.000688	7.631292
189068.4	72629.13	4.00	.000069	7.633365
189068.4	72801.03	4.00	.000619	9.527895
206730.8	31895.52	2.00	.021332	20.413860
206730.8	32000.75	2.00	.004280	20.422070
206786.3	31839.97	4.00	.010647	20.995970
206786.3	31945.20	4.00	.013673	21.004190
206786.3	32106.61	4.00	.001288	9.286980
206877.9	31853.64	6.00	.017895	20.295870
206877.9	32015.05	6.00	.007708	8.578661
207002.5	31890.44	8.00	.025594	7.455690
206730.8	50962.91	2.00	.003068	42.979960
206730.8	51067.11	2.00	.000615	49.086340
206786.3	50907.36	4.00	.001533	43.562070
206786.3	51011.56	4.00	.001966	49.668450
206786.3	51177.45	4.00	.000185	34.544120
206877.9	50920.00	6.00	.002575	48.960130
206877.9	51085.89	6.00	.001107	33.835800
207002.5	50961.28	8.00	.003682	32.712830
206730.8	24565.25	2.00	.012195	2.269604
206786.3	24509.70	4.00	.002433	2.851716
206786.3	24563.73	4.00	.009755	2.887219
206877.9	24418.14	6.00	.000115	2.143397
206877.9	24472.17	6.00	.002116	2.178900
206877.9	24550.08	6.00	.009949	1.949712
207002.5	24347.56	8.00	.000062	1.055930
207002.5	24425.47	8.00	.001237	.826742
207002.5	24527.75	8.00	.010871	.611524
206730.8	25805.27	2.00	.000026	2.269604
206730.8	25871.77	2.00	.000128	1.995628
206786.3	25676.48	4.00	.000008	2.887219
206786.3	25749.72	4.00	.000082	2.851716
206786.3	25816.22	4.00	.000064	2.577741
206877.9	25584.92	6.00	.000046	2.178900
206877.9	25658.16	6.00	.000107	2.143397
207002.5	25460.31	8.00	.000152	1.055930
206730.8	25980.91	2.00	.001161	1.995628
206730.8	26015.19	2.00	.001163	2.269604
206786.3	25925.36	4.00	.000579	2.577741
206786.3	25959.64	4.00	.000928	2.851716

E	ω	g	f	$C4$
206786.3	25961.17	4.00	.000812	2.887219
206877.9	25868.08	6.00	.000540	2.143397
206877.9	25869.61	6.00	.001333	2.178900
206877.9	25875.95	6.00	.000441	1.949712
207002.5	25745.00	8.00	.000329	1.055930
207002.5	25751.34	8.00	.001973	.826742
206877.9	47603.59	6.00	.000032	2.654526
207002.5	47478.98	8.00	.000004	1.531556
207002.5	47588.19	8.00	.000035	1.049290
206786.3	48108.86	4.00	.000008	4.319298
206877.9	48017.30	6.00	.000014	3.610978
207002.5	47892.69	8.00	.000003	2.488008
206730.8	48410.11	2.00	.000000	2.685421
206730.8	48431.80	2.00	.000002	2.343305
206786.3	48318.25	4.00	.000000	4.319298
206786.3	48354.56	4.00	.000001	3.267533
206786.3	48376.25	4.00	.000001	2.925417
206877.9	48226.69	6.00	.000001	3.610978
206877.9	48263.00	6.00	.000002	2.559214
207002.5	48102.08	8.00	.000003	2.488008
206730.8	58489.52	2.00	.000002	3.065149
206730.8	58489.52	2.00	.000002	3.065149
206786.3	58433.97	4.00	.000001	3.647261
206786.3	58433.97	4.00	.000002	3.647261
206786.3	58433.97	4.00	.000002	3.647261
206877.9	58342.41	6.00	.000001	2.938942
206877.9	58342.41	6.00	.000003	2.938942
206877.9	58342.41	6.00	.000001	2.364127
207002.5	58217.80	8.00	.000001	1.815972
207002.5	58217.80	8.00	.000004	1.241157
206730.8	58737.39	2.00	.000000	3.065149
206730.8	58737.39	2.00	.000000	3.065149
206786.3	58645.16	4.00	.000000	3.647261
206786.3	58681.84	4.00	.000000	3.647261
206786.3	58681.84	4.00	.000000	3.647261
206877.9	58553.59	6.00	.000000	2.938942
206877.9	58590.28	6.00	.000000	2.938942
207002.5	58428.98	8.00	.000000	1.815972
208346.2	30280.14	2.00	.004757	20.413860
208346.2	30385.38	2.00	.023870	20.422070
208392.3	30234.05	4.00	.011875	20.995970
208392.3	30339.28	4.00	.003813	21.004190
208392.3	30500.69	4.00	.012939	9.286980
208484.2	30247.31	6.00	.008554	20.295870
208484.2	30408.72	6.00	.020066	8.578661

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
208346.2	49347.53	2.00	.000655	42.979960
208346.2	49451.73	2.00	.003281	49.086340
208392.3	49301.44	4.00	.001635	43.562070
208392.3	49405.64	4.00	.000524	49.668450
208392.3	49571.53	4.00	.001776	34.544120
208484.2	49313.67	6.00	.001178	48.960130
208484.2	49479.56	6.00	.002757	33.835800
208346.2	24189.89	2.00	.003120	2.269604
208346.2	24256.39	2.00	.000626	1.995628
208392.3	24070.56	4.00	.001677	2.887219
208392.3	24143.80	4.00	.000498	2.851716
208392.3	24210.30	4.00	.001561	2.577741
208484.2	23978.59	6.00	.002598	2.178900
208484.2	24051.83	6.00	.001117	2.143397
208346.2	24365.53	2.00	.005665	1.995628
208346.2	24399.81	2.00	.005673	2.269604
208392.3	24319.44	4.00	.000565	2.577741
208392.3	24353.72	4.00	.003624	2.851716
208392.3	24355.25	4.00	.007135	2.887219
208484.2	24261.75	6.00	.000226	2.143397
208484.2	24263.28	6.00	.002031	2.178900
208484.2	24269.63	6.00	.009029	1.949712
208392.3	46502.94	4.00	.000033	4.319298
208484.2	46410.97	6.00	.000010	3.610978
208346.2	46794.73	2.00	.000031	2.685421
208346.2	46816.42	2.00	.000006	2.343305
208392.3	46712.33	4.00	.000017	4.319298
208392.3	46748.64	4.00	.000005	3.267533
208392.3	46770.33	4.00	.000016	2.925417
208484.2	46620.36	6.00	.000026	3.610978
208484.2	46656.67	6.00	.000011	2.559214
208346.2	56874.14	2.00	.000026	3.065149
208346.2	56874.14	2.00	.000026	3.065149
208392.3	56828.05	4.00	.000003	3.647261
208392.3	56828.05	4.00	.000017	3.647261
208392.3	56828.05	4.00	.000033	3.647261
208484.2	56736.08	6.00	.000001	2.938942
208484.2	56736.08	6.00	.000009	2.938942
208484.2	56736.08	6.00	.000042	2.364127
208346.2	57122.02	2.00	.000004	3.065149
208346.2	57122.02	2.00	.000001	3.065149
208392.3	57039.23	4.00	.000002	3.647261
208392.3	57075.92	4.00	.000001	3.647261
208392.3	57075.92	4.00	.000002	3.647261
208484.2	56947.27	6.00	.000004	2.938942

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
208484.2	56983.95	6.00	.000002	2.938942
211522.0	28806.77	4.00	.024205	20.995970
211522.0	28994.30	4.00	.004873	21.004190
211712.7	28803.63	6.00	.029043	20.295870
211522.0	46886.61	4.00	.003391	43.562070
211522.0	47079.72	4.00	.000681	49.668450
211712.7	46889.05	6.00	.004070	48.960130
211522.0	21274.28	4.00	.011978	2.887219
211712.7	21083.61	6.00	.000565	2.178900
211712.7	21246.61	6.00	.011392	1.949712
211522.0	21908.11	4.00	.000025	2.851716
211522.0	22022.11	4.00	.000124	2.577741
211712.7	21717.44	6.00	.000147	2.143397
211522.0	22880.50	4.00	.002102	2.851716
211522.0	22932.47	4.00	.000234	2.887219
211712.7	22689.83	6.00	.000154	2.143397
211712.7	22741.80	6.00	.002167	2.178900
211522.0	43650.52	4.00	.000000	3.267533
211522.0	43759.42	4.00	.000000	2.925417
211712.7	43459.84	6.00	.000000	2.559214
211522.0	43779.31	4.00	.000041	4.319298
211712.7	43588.64	6.00	.000002	3.610978
211712.7	43752.55	6.00	.000039	2.654526
211522.0	44321.11	4.00	.000034	3.267533
211522.0	44375.22	4.00	.000004	4.319298
211712.7	44130.44	6.00	.000003	2.559214
211712.7	44184.55	6.00	.000035	3.610978
211712.7	53865.34	6.00	.000049	2.364127
214169.7	26159.02	2.00	.023206	20.413860
214169.7	26346.55	2.00	.011686	20.422070
214229.5	26099.27	4.00	.005788	20.995970
214229.5	26286.80	4.00	.029149	21.004190
214169.7	44238.86	2.00	.002912	42.979960
214169.7	44431.97	2.00	.001462	49.086340
214229.5	44179.11	4.00	.000727	43.562070
214229.5	44372.22	4.00	.003650	49.668450
214169.7	19260.36	2.00	.001150	2.269604
214169.7	19374.36	2.00	.002314	1.995628
214229.5	19200.61	4.00	.002867	2.851716
214229.5	19314.61	4.00	.000577	2.577741
214169.7	20232.75	2.00	.011024	2.269604
214229.5	20173.00	4.00	.001099	2.851716
214229.5	20224.97	4.00	.009918	2.887219
214169.7	41002.77	2.00	.000002	2.685421
214169.7	41111.67	2.00	.000004	2.343305

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
214229.5	40943.02	4.00	.000006	3.267533
214229.5	41051.92	4.00	.000001	2.925417
214169.7	41673.36	2.00	.000037	2.685421
214229.5	41613.61	4.00	.000004	3.267533
214229.5	41667.72	4.00	.000033	4.319298
231296.0	14471.75	4.00	.001815	4.903086
231296.0	14520.25	4.00	.000729	7.745536
231296.0	14606.80	4.00	.000052	5.321858
231350.1	14466.22	6.00	.001936	7.781040
231350.1	14552.77	6.00	.000636	5.357362
231350.1	14678.88	6.00	.000025	2.625983
231428.0	14474.86	8.00	.002223	5.128173
231428.0	14600.97	8.00	.000374	2.396794
231530.3	14498.69	10.00	.002598	2.181576
231296.0	29662.95	4.00	.000055	3.139005
231296.0	29745.95	4.00	.000004	5.033535
231350.1	29608.92	6.00	.000146	3.174508
231350.1	29691.92	6.00	.000048	5.069038
231350.1	29829.92	6.00	.000002	.920730
231428.0	29614.02	8.00	.000168	4.839849
231428.0	29752.02	8.00	.000028	.691541
231530.3	29649.73	10.00	.000196	.476323
231296.0	24517.05	4.00	.000000	.564348
231296.0	24616.95	4.00	.000003	.564323
231296.0	24615.95	4.00	.000007	.540551
231350.1	24341.33	6.00	.000000	.580804
231350.1	24463.02	6.00	.000002	.599851
231350.1	24562.92	6.00	.000008	.599826
231428.0	24263.42	8.00	.000001	.351616
231428.0	24385.11	8.00	.000009	.370663
231530.3	24161.14	10.00	.000010	.136398
231296.0	24459.75	4.00	.004106	.564348
231350.1	24405.72	6.00	.000439	.599851
231350.1	24409.33	6.00	.003659	.580804
231428.0	24327.81	8.00	.000012	.370663
231428.0	24331.42	8.00	.000432	.351616
231428.0	24399.61	8.00	.003650	.350828
231530.3	24229.14	10.00	.000008	.136398
231530.3	24297.33	10.00	.000264	.135610
231530.3	24447.23	10.00	.003830	.128757
231296.0	24787.45	4.00	.000277	.564323
231296.0	24791.55	4.00	.000069	.564348
231350.1	24733.42	6.00	.000046	.599826
231350.1	24737.52	6.00	.000237	.599851
231350.1	24773.02	6.00	.000062	.580804

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
231428.0	24659.61	8.00	.000046	.370663
231428.0	24695.11	8.00	.000262	.351616
231428.0	24708.22	8.00	.000036	.350828
231530.3	24592.83	10.00	.000029	.136398
231530.3	24605.94	10.00	.000315	.135610
231296.0	34408.95	4.00	.000000	.537660
231296.0	34465.95	4.00	.000000	.537660
231296.0	34562.95	4.00	.000001	.537660
231350.1	34288.92	6.00	.000000	.573163
231350.1	34354.92	6.00	.000000	.573163
231350.1	34411.92	6.00	.000001	.573163
231428.0	34211.02	8.00	.000000	.343975
231428.0	34277.02	8.00	.000001	.343975
231530.3	34108.73	10.00	.000002	.128757
231296.0	34368.95	4.00	.000732	.537660
231350.1	34314.92	6.00	.000078	.573163
231350.1	34340.92	6.00	.000653	.573163
231428.0	34237.02	8.00	.000002	.343975
231428.0	34263.02	8.00	.000077	.343975
231428.0	34333.02	8.00	.000652	.343975
231530.3	34160.73	10.00	.000001	.128757
231530.3	34230.73	10.00	.000047	.128757
231530.3	34394.73	10.00	.000684	.128757
231296.0	34631.95	4.00	.000056	.537660
231296.0	34664.95	4.00	.000014	.537660
231350.1	34577.92	6.00	.000009	.573163
231350.1	34610.92	6.00	.000048	.573163
231350.1	34634.92	6.00	.000012	.573163
231428.0	34533.02	8.00	.000009	.343975
231428.0	34557.02	8.00	.000053	.343975
231428.0	34571.02	8.00	.000007	.343975
231530.3	34454.73	10.00	.000006	.128757
231530.3	34468.73	10.00	.000064	.128757
232462.8	13353.47	6.00	.000002	7.781040
232462.8	13440.02	6.00	.000014	5.357362
232462.8	13566.13	6.00	.000063	2.625983
232536.1	13231.73	4.00	.000004	4.903086
232536.1	13280.23	4.00	.000025	7.745536
232536.1	13366.78	4.00	.000049	5.321858
232602.6	13165.23	2.00	.000038	4.629111
232602.6	13213.73	2.00	.000039	7.471561
232462.8	28496.17	6.00	.000000	3.174508
232462.8	28579.17	6.00	.000001	5.069038
232462.8	28717.17	6.00	.000004	.920730
232536.1	28422.94	4.00	.000002	3.139005

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
232536.1	28505.94	4.00	.000003	5.033535
232602.6	28356.44	2.00	.000003	2.865029
232462.8	28798.88	6.00	.000025	3.174508
232462.8	28891.47	6.00	.000059	5.069038
232536.1	28725.64	4.00	.000011	3.139005
232536.1	28818.23	4.00	.000038	5.033535
232602.6	28659.14	2.00	.000070	2.865029
232462.8	23228.58	6.00	.003742	.580804
232462.8	23350.27	6.00	.000846	.599851
232462.8	23450.17	6.00	.000094	.599826
232536.1	23277.03	4.00	.002953	.564348
232536.1	23376.94	4.00	.001506	.564323
232536.1	23375.94	4.00	.000235	.540551
232602.6	23310.44	2.00	.002347	.290347
232602.6	23309.44	2.00	.002347	.266575
232462.8	33176.17	6.00	.000586	.573163
232462.8	33242.17	6.00	.000132	.573163
232462.8	33299.17	6.00	.000015	.573163
232536.1	33168.94	4.00	.000462	.537660
232536.1	33225.94	4.00	.000235	.537660
232536.1	33322.94	4.00	.000037	.537660
232602.6	33159.44	2.00	.000366	.263684
232602.6	33256.44	2.00	.000367	.263684
232711.7	13056.09	2.00	.000356	4.629111
232711.7	13104.59	2.00	.000357	7.471561
232746.0	13021.81	4.00	.000177	4.903086
232746.0	13070.31	4.00	.000285	7.745536
232746.0	13156.86	4.00	.000251	5.321858
232747.5	13068.78	6.00	.000166	7.781040
232747.5	13155.33	6.00	.000413	5.357362
232747.5	13281.44	6.00	.000138	2.625983
232753.9	13148.98	8.00	.000102	5.128173
232753.9	13275.09	8.00	.000620	2.396794
232711.7	28247.30	2.00	.000023	2.865029
232746.0	28213.02	4.00	.000019	3.139005
232746.0	28296.02	4.00	.000016	5.033535
232747.5	28211.48	6.00	.000011	3.174508
232747.5	28294.48	6.00	.000027	5.069038
232747.5	28432.48	6.00	.000009	.920730
232753.9	28288.14	8.00	.000007	4.839849
232753.9	28426.14	8.00	.000040	.691541
232711.7	28550.00	2.00	.000025	2.865029
232746.0	28515.72	4.00	.000080	3.139005
232746.0	28608.31	4.00	.000008	5.033535
232747.5	28514.19	6.00	.000106	3.174508

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
232747.5	28606.78	6.00	.000045	5.069038
232753.9	28600.44	8.00	.000151	4.839849
232711.7	23201.30	2.00	.000265	.290347
232711.7	23200.30	2.00	.000265	.266575
232746.0	23067.11	4.00	.000184	.564348
232746.0	23167.02	4.00	.000211	.564323
232746.0	23166.02	4.00	.000132	.540551
232747.5	22943.89	6.00	.000100	.580804
232747.5	23065.58	6.00	.000303	.599851
232747.5	23165.48	6.00	.000123	.599826
232753.9	22937.55	8.00	.000448	.351616
232753.9	23059.23	8.00	.000075	.370663
232711.7	23371.80	2.00	.004088	.290347
232746.0	23337.52	4.00	.000816	.564323
232746.0	23341.61	4.00	.003266	.564348
232747.5	23335.98	6.00	.000039	.599826
232747.5	23340.08	6.00	.000711	.599851
232747.5	23375.58	6.00	.003338	.580804
232753.9	23333.73	8.00	.000021	.370663
232753.9	23369.23	8.00	.000417	.351616
232753.9	23382.34	8.00	.003652	.350828
232711.7	33050.30	2.00	.000040	.263684
232711.7	33147.30	2.00	.000041	.263684
232746.0	32959.02	4.00	.000028	.537660
232746.0	33016.02	4.00	.000032	.537660
232746.0	33113.02	4.00	.000020	.537660
232747.5	32891.48	6.00	.000015	.573163
232747.5	32957.48	6.00	.000046	.573163
232747.5	33014.48	6.00	.000019	.573163
232753.9	32885.14	8.00	.000069	.343975
232753.9	32951.14	8.00	.000012	.343975
232711.7	33216.30	2.00	.000742	.263684
232746.0	33182.02	4.00	.000148	.537660
232746.0	33215.02	4.00	.000593	.537660
232747.5	33180.48	6.00	.000007	.573163
232747.5	33213.48	6.00	.000129	.573163
232747.5	33237.48	6.00	.000606	.573163
232753.9	33207.14	8.00	.000004	.343975
232753.9	33231.14	8.00	.000076	.343975
232753.9	33245.14	8.00	.000663	.343975
232796.3	15212.83	6.00	.002220	7.781040
232796.3	15389.03	6.00	.000160	5.357362
232959.3	15226.03	8.00	.002381	5.128173
232796.3	28901.23	6.00	.000197	3.174508
232796.3	29073.14	6.00	.000014	5.069038

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
232959.3	28910.14	8.00	.000211	4.839849
232796.3	22893.33	6.00	.000001	.599851
232796.3	23015.94	6.00	.000010	.599826
232959.3	22730.33	8.00	.000011	.370663
232796.3	23033.14	6.00	.004327	.580804
232959.3	22870.14	8.00	.000119	.351616
232959.3	23024.33	8.00	.004205	.350828
232796.3	23329.53	6.00	.000350	.599851
232796.3	23347.03	6.00	.000018	.580804
232959.3	23166.53	8.00	.000013	.370663
232959.3	23184.03	8.00	.000352	.351616
232796.3	32966.73	6.00	.000685	.573163
232959.3	32803.73	8.00	.000019	.343975
232796.3	33191.73	6.00	.000063	.573163
232796.3	33202.73	6.00	.000003	.573163
232959.3	33028.73	8.00	.000002	.343975
232959.3	33039.73	8.00	.000064	.343975
233430.1	14579.00	4.00	.000007	7.745536
233430.1	14755.20	4.00	.000064	5.321858
233544.1	14465.00	2.00	.000069	7.471561
233430.1	14995.25	4.00	.000168	4.903086
233430.1	15084.14	4.00	.000843	7.745536
233544.1	14881.25	2.00	.000665	4.629111
233544.1	14970.14	2.00	.000334	7.471561
233430.1	28267.41	4.00	.000001	3.139005
233430.1	28439.31	4.00	.000005	5.033535
233544.1	28153.41	2.00	.000006	2.865029
233430.1	22259.50	4.00	.004389	.564348
233430.1	22382.11	4.00	.000490	.564323
233544.1	22268.11	2.00	.004878	.290347
234402.5	13606.61	4.00	.000619	7.745536
234402.5	13782.81	4.00	.000070	5.321858
234454.5	13554.64	6.00	.000046	7.781040
234454.5	13730.84	6.00	.000648	5.357362
234402.5	14022.86	4.00	.001660	4.903086
234402.5	14111.75	4.00	.000334	7.745536
234454.5	14059.78	6.00	.001998	7.781040
234402.5	27295.02	4.00	.000048	3.139005
234402.5	27466.92	4.00	.000005	5.033535
234454.5	27243.05	6.00	.000004	3.174508
234454.5	27414.95	6.00	.000050	5.069038
234402.5	21287.11	4.00	.000056	.564348
234402.5	21409.72	4.00	.000507	.564323
234454.5	21235.14	6.00	.000522	.599851
234454.5	21357.75	6.00	.000037	.599826

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
234402.5	21723.31	4.00	.004369	.564348
234454.5	21671.34	6.00	.000208	.599851
234454.5	21688.84	6.00	.004154	.580804
234402.5	31585.52	4.00	.000698	.537660
234454.5	31533.55	6.00	.000033	.573163
234454.5	31544.55	6.00	.000664	.573163
238626.3	7141.48	2.00	.075421	23.047340
238626.3	7189.98	2.00	.075933	25.889790
238731.5	7036.25	4.00	.007431	23.055560
238731.5	7084.75	4.00	.047886	25.898010
238731.5	7171.30	4.00	.095427	23.474330
238893.0	6923.34	6.00	.002925	14.180800
238893.0	7009.89	6.00	.026651	11.757120
238893.0	7136.00	6.00	.120580	9.025743
238626.3	22332.69	2.00	.000701	21.283260
238731.5	22227.45	4.00	.000446	21.291480
238731.5	22310.45	4.00	.000882	23.186000
238893.0	22066.05	6.00	.000028	9.574268
238893.0	22149.05	6.00	.000250	11.468800
238893.0	22287.05	6.00	.001119	7.320490
238626.3	22635.39	2.00	.000247	21.283260
238731.5	22530.16	4.00	.000039	21.291480
238731.5	22622.75	4.00	.000134	23.186000
238893.0	22368.75	6.00	.000088	9.574268
238893.0	22461.34	6.00	.000206	11.468800
240328.8	7680.34	2.00	.171542	25.889790
240516.3	7492.81	4.00	.016735	25.898010
240516.3	7669.02	4.00	.154160	23.474330
240328.8	8096.59	2.00	.071567	23.047340
240328.8	8185.48	2.00	.036177	25.889790
240516.3	7909.06	4.00	.017477	23.055560
240516.3	7997.95	4.00	.088369	25.898010
240328.8	21368.75	2.00	.000748	21.283260
240516.3	21181.22	4.00	.000074	21.291480
240516.3	21353.13	4.00	.000672	23.186000
245767.8	11925.91	2.00	.040890	45.613440
245767.8	12030.11	2.00	.008249	51.719820
245816.3	11877.41	4.00	.020362	48.455890
245816.3	11981.61	4.00	.026292	54.562270
245816.3	12147.50	4.00	.002499	39.437940
245902.8	11895.06	6.00	.034258	52.138600
245902.8	12060.95	6.00	.014887	37.014260
246029.0	11934.84	8.00	.049104	34.282880
245902.8	8578.66	6.00	.014427	5.832988
246029.0	8452.55	8.00	.001777	3.101609

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
246029.0	8561.75	8.00	.015749	2.619343
245816.3	9078.91	4.00	.001152	9.213118
245902.8	8992.36	6.00	.001879	6.789440
246029.0	8866.25	8.00	.000459	4.058061
245767.8	9373.11	2.00	.000037	5.318903
245767.8	9394.80	2.00	.000186	4.976788
245816.3	9288.30	4.00	.000011	9.213118
245816.3	9324.61	4.00	.000118	8.161353
245816.3	9346.30	4.00	.000093	7.819238
245902.8	9201.75	6.00	.000066	6.789440
245902.8	9238.06	6.00	.000154	5.737676
246029.0	9075.64	8.00	.000216	4.058061
245767.8	19452.52	2.00	.000007	5.698631
245767.8	19452.52	2.00	.000007	5.698631
245816.3	19404.02	4.00	.000004	8.541081
245816.3	19404.02	4.00	.000006	8.541081
245816.3	19404.02	4.00	.000005	8.541081
245902.8	19317.47	6.00	.000003	6.117403
245902.8	19317.47	6.00	.000009	6.117403
245902.8	19317.47	6.00	.000003	5.542588
246029.0	19191.36	8.00	.000002	3.386024
246029.0	19191.36	8.00	.000013	2.811209
245767.8	19700.39	2.00	.000000	5.698631
245767.8	19700.39	2.00	.000002	5.698631
245816.3	19615.20	4.00	.000000	8.541081
245816.3	19651.89	4.00	.000001	8.541081
245816.3	19651.89	4.00	.000001	8.541081
245902.8	19528.66	6.00	.000001	6.117403
245902.8	19565.34	6.00	.000002	6.117403
246029.0	19402.55	8.00	.000003	3.386024
248009.1	10399.50	4.00	.049480	48.455890
248009.1	10592.61	4.00	.010080	54.562270
248185.3	10416.41	6.00	.059473	52.138600
248009.1	7163.41	4.00	.000034	8.161353
248009.1	7272.31	4.00	.000172	7.819238
248185.3	6987.20	6.00	.000198	5.737676
248009.1	7292.20	4.00	.017229	9.213118
248185.3	7116.00	6.00	.000801	6.789440
248185.3	7279.91	6.00	.016381	5.832988
248009.1	7834.00	4.00	.002916	8.161353
248009.1	7888.11	4.00	.000326	9.213118
248185.3	7657.80	6.00	.000211	5.737676
248185.3	7711.91	6.00	.002977	6.789440
248185.3	17392.70	6.00	.000000	5.542588
248425.3	9983.25	2.00	.041740	45.613440

E	ω	g	f	$C4$
248425.3	10176.36	2.00	.021274	51.719820
248514.2	9894.36	4.00	.010342	48.455890
248514.2	10087.47	4.00	.052719	54.562270
248425.3	6747.16	2.00	.001638	5.318903
248425.3	6856.06	2.00	.003329	4.976788
248514.2	6658.27	4.00	.004041	8.161353
248514.2	6767.17	4.00	.000821	7.819238
248425.3	7417.75	2.00	.015815	5.318903
248514.2	7328.86	4.00	.001563	8.161353
248514.2	7382.97	4.00	.014167	9.213118
254481.5	6560.50	8.00	.004700	5.544663
254481.5	6698.50	8.00	.000800	1.396356
254590.7	6589.30	10.00	.005508	.914090
254481.5	1209.91	8.00	.000000	1.056430
254481.5	1331.59	8.00	.000001	1.075477
254590.7	1100.70	10.00	.000001	.574164
254481.5	1274.30	8.00	.000002	1.075477
254481.5	1277.91	8.00	.000072	1.056430
254481.5	1346.09	8.00	.000643	1.055643
254590.7	1168.70	10.00	.000001	.574164
254590.7	1236.89	10.00	.000043	.573377
254590.7	1386.80	10.00	.000694	.566523
254481.5	1606.09	8.00	.000010	1.075477
254481.5	1641.59	8.00	.000060	1.056430
254481.5	1654.70	8.00	.000008	1.055643
254590.7	1532.39	10.00	.000006	.574164
254590.7	1545.50	10.00	.000068	.573377
254481.5	11157.50	8.00	.000001	1.048789
254481.5	11223.50	8.00	.000007	1.048789
254590.7	11048.30	10.00	.000008	.566523
254481.5	11183.50	8.00	.000009	1.048789
254481.5	11209.50	8.00	.000331	1.048789
254481.5	11279.50	8.00	.002804	1.048789
254590.7	11100.30	10.00	.000006	.566523
254590.7	11170.30	10.00	.000202	.566523
254590.7	11334.30	10.00	.002951	.566523
254481.5	11479.50	8.00	.000032	1.048789
254481.5	11503.50	8.00	.000184	1.048789
254481.5	11517.50	8.00	.000025	1.048789
254590.7	11394.30	10.00	.000020	.566523
254590.7	11408.30	10.00	.000220	.566523
254895.2	6063.80	6.00	.000330	4.606586
254895.2	6146.80	6.00	.000825	6.501116
254895.2	6284.80	6.00	.000279	2.352808
254895.2	6366.50	6.00	.002890	4.606586

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
254895.2	6459.09	6.00	.001257	6.501116
254895.2	796.20	6.00	.000010	2.012883
254895.2	917.89	6.00	.000033	2.031929
254895.2	1017.80	6.00	.000015	2.031904
254895.2	1188.30	6.00	.000006	2.031904
254895.2	1192.39	6.00	.000111	2.031929
254895.2	1227.89	6.00	.000535	2.012883
254895.2	10743.80	6.00	.000081	2.005241
254895.2	10809.80	6.00	.000248	2.005241
254895.2	10866.80	6.00	.000101	2.005241
254895.2	11032.80	6.00	.000028	2.005241
254895.2	11065.80	6.00	.000513	2.005241
254895.2	11089.80	6.00	.002410	2.005241
255104.6	5854.41	6.00	.000003	4.606586
255104.6	5937.41	6.00	.000030	6.501116
255104.6	6075.41	6.00	.000135	2.352808
255140.9	5818.09	4.00	.000052	3.554821
255140.9	5901.09	4.00	.000103	5.449351
255162.6	5796.41	2.00	.000080	3.212706
255104.6	6157.11	6.00	.000715	4.606586
255104.6	6249.70	6.00	.001695	6.501116
255140.9	6120.80	4.00	.000316	3.554821
255140.9	6213.39	4.00	.001083	5.449351
255162.6	6099.11	2.00	.001969	3.212706
255104.6	586.81	6.00	.000263	2.012883
255104.6	708.50	6.00	.000072	2.031929
255104.6	808.41	6.00	.000009	2.031904
255140.9	672.19	4.00	.000238	.980165
255140.9	772.09	4.00	.000139	.980139
255140.9	771.09	4.00	.000022	.956367
255162.6	750.41	2.00	.000211	.638024
255162.6	749.41	2.00	.000210	.614252
255104.6	10534.41	6.00	.003242	2.005241
255104.6	10600.41	6.00	.000734	2.005241
255104.6	10657.41	6.00	.000082	2.005241
255140.9	10564.09	4.00	.002561	.953477
255140.9	10621.09	4.00	.001308	.953477
255140.9	10718.09	4.00	.000206	.953477
255162.6	10599.41	2.00	.002039	.611361
255162.6	10696.41	2.00	.002058	.611361
255172.5	6525.00	4.00	.000015	3.554821
255172.5	6696.91	4.00	.000136	5.449351
255281.4	6416.09	2.00	.000144	3.212706
255172.5	517.09	4.00	.000258	.980165
255172.5	639.70	4.00	.000035	.980139

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
255281.4	530.80	2.00	.000294	.638024
255301.3	6396.20	6.00	.005141	4.606586
255301.3	6568.11	6.00	.000377	6.501116
255465.2	6404.20	8.00	.005516	5.544663
255301.3	388.30	6.00	.000000	2.031929
255301.3	510.91	6.00	.000001	2.031904
255465.2	224.39	8.00	.000000	1.075477
255301.3	528.11	6.00	.000274	2.012883
255465.2	364.20	8.00	.000005	1.056430
255465.2	518.39	8.00	.000262	1.055643
255301.3	824.50	6.00	.000037	2.031929
255301.3	842.00	6.00	.000002	2.012883
255465.2	660.59	8.00	.000001	1.075477
255465.2	678.09	8.00	.000030	1.056430
255301.3	10461.70	6.00	.003881	2.005241
255465.2	10297.80	8.00	.000106	1.048789
255301.3	10686.70	6.00	.000283	2.005241
255301.3	10697.70	6.00	.000014	2.005241
255465.2	10522.80	8.00	.000010	1.048789
255465.2	10533.80	8.00	.000283	1.048789
255689.6	153.50	6.00	.000001	.980165
255689.6	207.61	6.00	.000011	2.031929
255812.2	30.89	4.00	.000002	.980139
255812.2	85.00	4.00	.000001	2.031904
255689.6	9888.41	6.00	.000000	.785078
255691.4	9528.91	8.00	.000002	1.340846
255691.4	9528.91	8.00	.000015	.766031
255813.1	9407.22	6.00	.000004	1.359893
255813.1	9407.22	6.00	.000010	1.359893
255813.1	9407.22	6.00	.000003	.785078
255913.0	9307.31	4.00	.000004	1.359867
255913.0	9307.31	4.00	.000007	1.359867
255913.0	9307.31	4.00	.000006	1.359867
255912.0	9308.31	2.00	.000008	1.336095
255912.0	9308.31	2.00	.000008	1.336095
255691.4	9740.09	8.00	.000068	1.340846
255813.1	9618.41	6.00	.000020	1.359893
255813.1	9655.09	6.00	.000047	1.359893
255913.0	9518.50	4.00	.000003	1.359867
255913.0	9555.19	4.00	.000036	1.359867
255913.0	9555.19	4.00	.000028	1.359867
255912.0	9556.19	2.00	.000011	1.336095
255912.0	9556.19	2.00	.000056	1.336095
255829.4	9748.59	8.00	.000003	.766031
255983.6	9594.41	10.00	.000074	.765243

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
255843.1	5854.41	4.00	.001325	3.554821
255843.1	6026.31	4.00	.000152	5.449351
255897.2	5800.30	6.00	.000097	4.606586
255897.2	5972.20	6.00	.001402	6.501116
255843.1	282.70	4.00	.000144	.980165
255897.2	228.59	6.00	.000006	2.031929
255897.2	246.09	6.00	.000119	2.012883
255843.1	10144.91	4.00	.003696	.953477
255897.2	10090.80	6.00	.000175	2.005241
255897.2	10101.80	6.00	.003505	2.005241
256083.5	9136.81	4.00	.000084	1.359867
256083.5	9136.81	4.00	.000034	1.359867
256083.5	9136.81	4.00	.000002	1.359867
256087.6	9132.72	6.00	.000090	1.359893
256087.6	9132.72	6.00	.000029	1.359893
256087.6	9132.72	6.00	.000001	.785078
256123.1	9097.22	8.00	.000103	1.340846
256123.1	9097.22	8.00	.000017	.766031
256136.2	9084.11	10.00	.000120	.765243
256125.8	9452.20	6.00	.000000	.785078
256143.3	9434.70	8.00	.000010	.766031
257693.7	3265.30	2.00	.100427	43.849360
257797.9	3161.09	4.00	.062222	49.955740
257797.9	3244.09	4.00	.125717	51.850270
257963.8	2995.20	6.00	.003685	34.831410
257963.8	3078.20	6.00	.034082	36.725940
257963.8	3216.20	6.00	.158268	32.577630
257693.7	3568.00	2.00	.108430	43.849360
257797.9	3463.80	4.00	.016842	49.955740
257797.9	3556.39	4.00	.058362	51.850270
257963.8	3297.91	6.00	.036080	34.831410
257963.8	3390.50	6.00	.086550	36.725940
258408.6	3288.91	2.00	.211307	43.849360
258601.7	3095.80	4.00	.019890	49.955740
258601.7	3267.70	4.00	.188950	51.850270
260959.0	4261.31	4.00	.001058	3.934549
260959.0	4261.31	4.00	.001692	3.934549
260959.0	4261.31	4.00	.001481	3.934549
261042.0	4178.31	6.00	.000968	5.829080
261042.0	4178.31	6.00	.002390	5.829080
261042.0	4178.31	6.00	.000790	5.254264
261180.0	4040.31	8.00	.000573	1.680771
261180.0	4040.31	8.00	.003438	1.105957
260959.0	4472.50	4.00	.000014	3.934549
260959.0	4509.19	4.00	.000154	3.934549

<i>E</i>	ω	<i>g</i>	<i>f</i>	<i>C4</i>
260959.0	4509.19	4.00	.000120	3.934549
261042.0	4389.50	6.00	.000084	5.829080
261042.0	4426.19	6.00	.000198	5.829080
261180.0	4251.50	8.00	.000272	1.680771
261261.7	3958.61	4.00	.001025	3.934549
261261.7	3958.61	4.00	.006560	3.934549
261261.7	3958.61	4.00	.012916	3.934549
261354.3	3866.02	6.00	.000400	5.829080
261354.3	3866.02	6.00	.003604	5.829080
261354.3	3866.02	6.00	.016018	5.254264
261261.7	4169.80	4.00	.003138	3.934549
261261.7	4206.48	4.00	.000938	3.934549
261261.7	4206.48	4.00	.002931	3.934549
261354.3	4077.20	6.00	.004773	5.829080
261354.3	4113.89	6.00	.002064	5.829080
261869.4	3708.59	6.00	.021359	5.254264
265220.3	541.69	2.00	.000060	1.333205
265220.3	638.69	2.00	.000071	1.333205
265220.3	484.69	4.00	.000038	1.333205
265220.3	541.69	4.00	.000048	1.333205
265220.3	638.69	4.00	.000035	1.333205
265220.3	418.69	6.00	.000018	1.333205
265220.3	484.69	6.00	.000062	1.333205
265220.3	541.69	6.00	.000028	1.333205
265220.3	418.69	8.00	.000079	.758390
265220.3	484.69	8.00	.000015	.758390
265220.3	707.69	2.00	.001323	1.333205
265220.3	707.69	4.00	.000265	1.333205
265220.3	740.69	4.00	.001108	1.333205
265220.3	707.69	6.00	.000013	1.333205
265220.3	740.69	6.00	.000241	1.333205
265220.3	764.69	6.00	.001167	1.333205
265220.3	740.69	8.00	.000007	.758390
265220.3	764.69	8.00	.000146	.758390
265220.3	778.69	8.00	.001300	.758390
265431.5	207.50	6.00	.000326	1.333205
265431.5	273.50	6.00	.000097	1.333205
265431.5	330.50	6.00	.000013	1.333205
265468.2	236.81	4.00	.000293	1.333205
265468.2	293.81	4.00	.000184	1.333205
265468.2	390.81	4.00	.000038	1.333205
265468.2	293.81	2.00	.000288	1.333205
265468.2	390.81	2.00	.000383	1.333205
265578.0	185.00	8.00	.000009	.758390
265578.0	410.00	8.00	.000002	.758390
265578.0	421.00	8.00	.000067	.758390

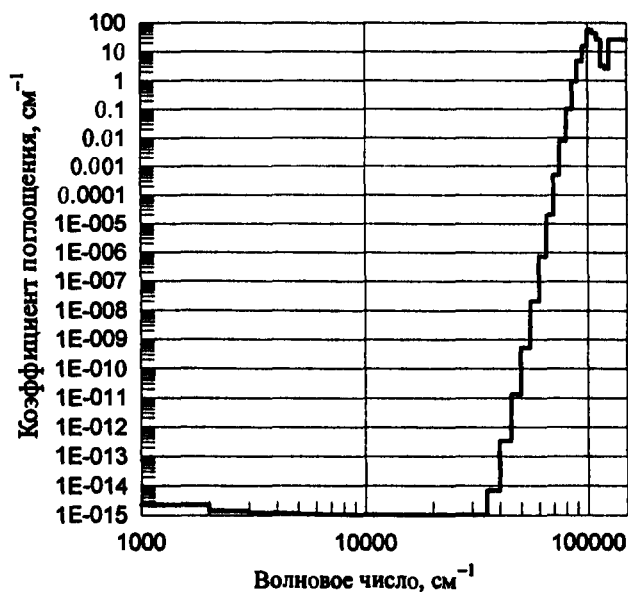
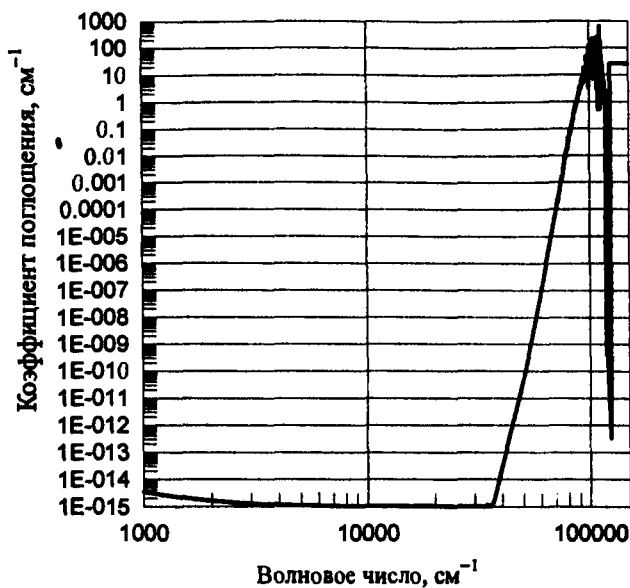


Рис. П.1.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 2000 \text{ К}$ и $p = 1 \text{ атм}$

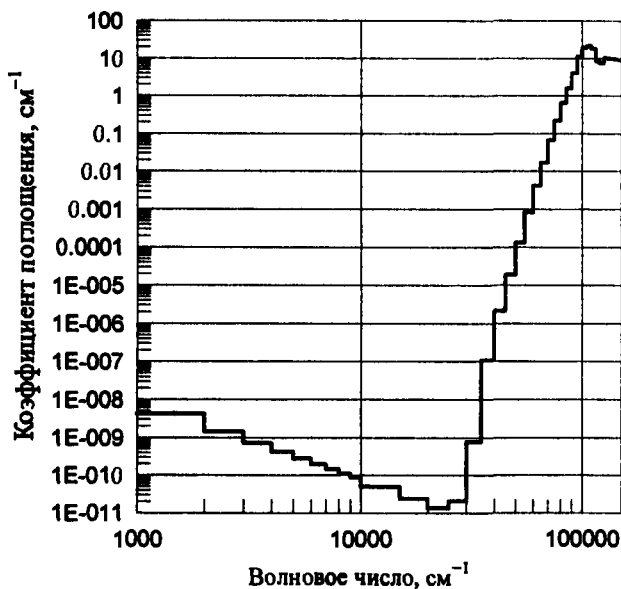
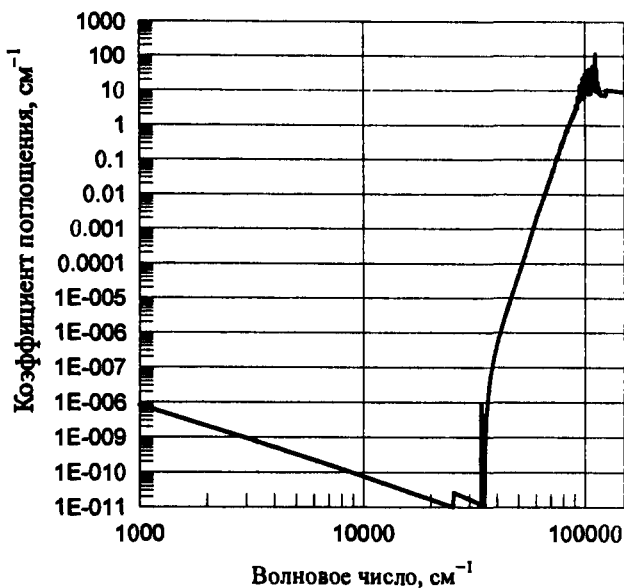


Рис. П.1.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (без учета атомных линий) при $T = 4000\text{ K}$ и $p = 1\text{ атм}$

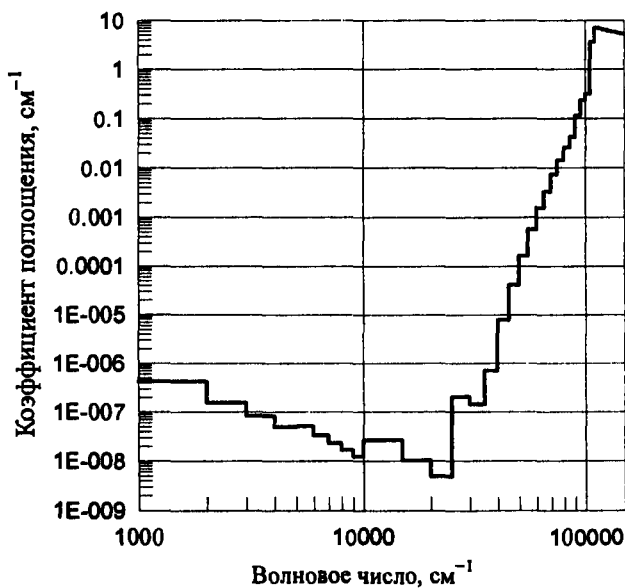
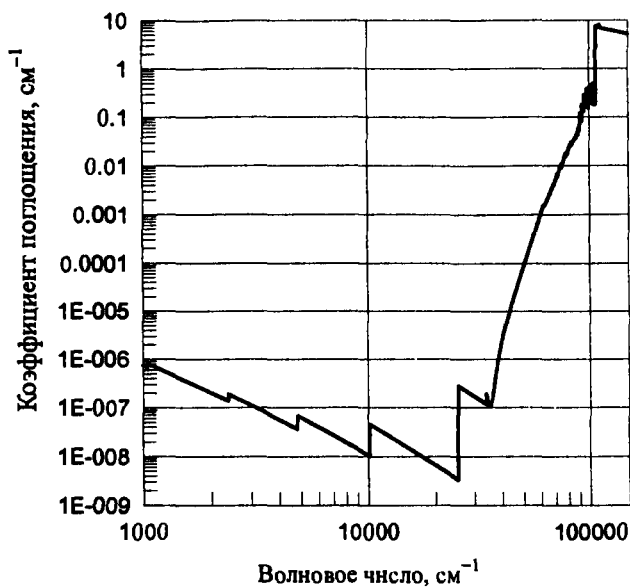


Рис. П.1.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 6000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

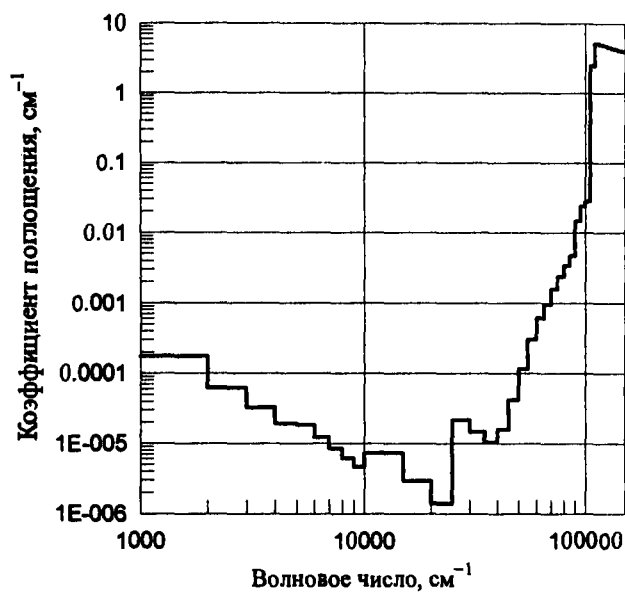
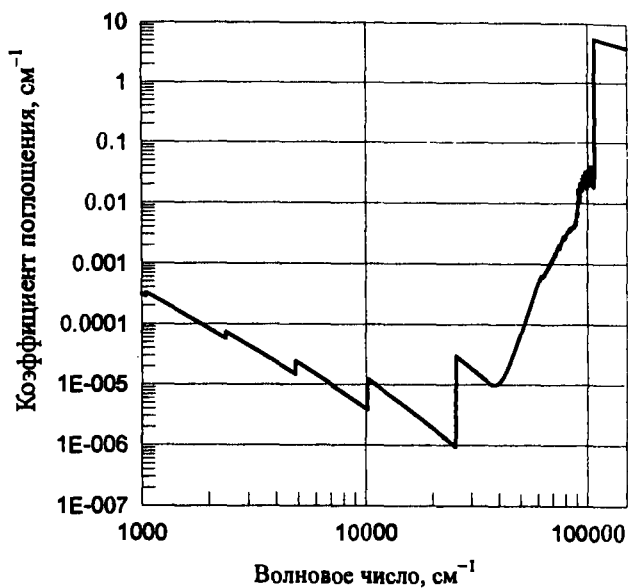


Рис. П.1.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (без учета атомных линий) при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

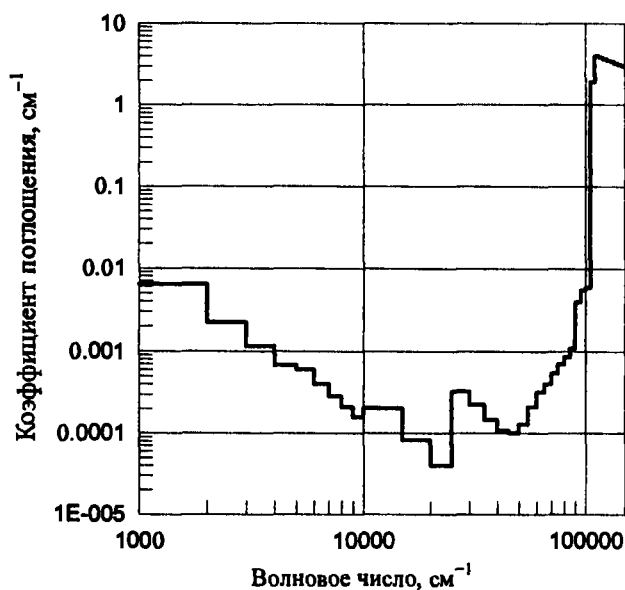
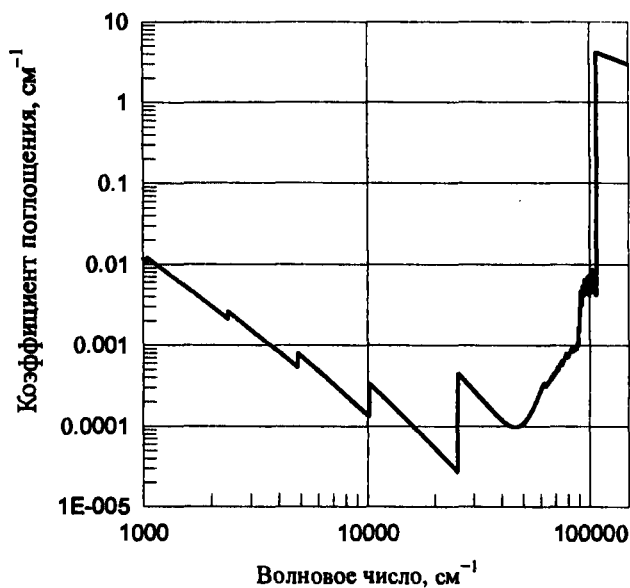


Рис. П.1.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (без учета атомных линий) при $T = 10000 \text{ К}$ и $p = 1 \text{ атм}$

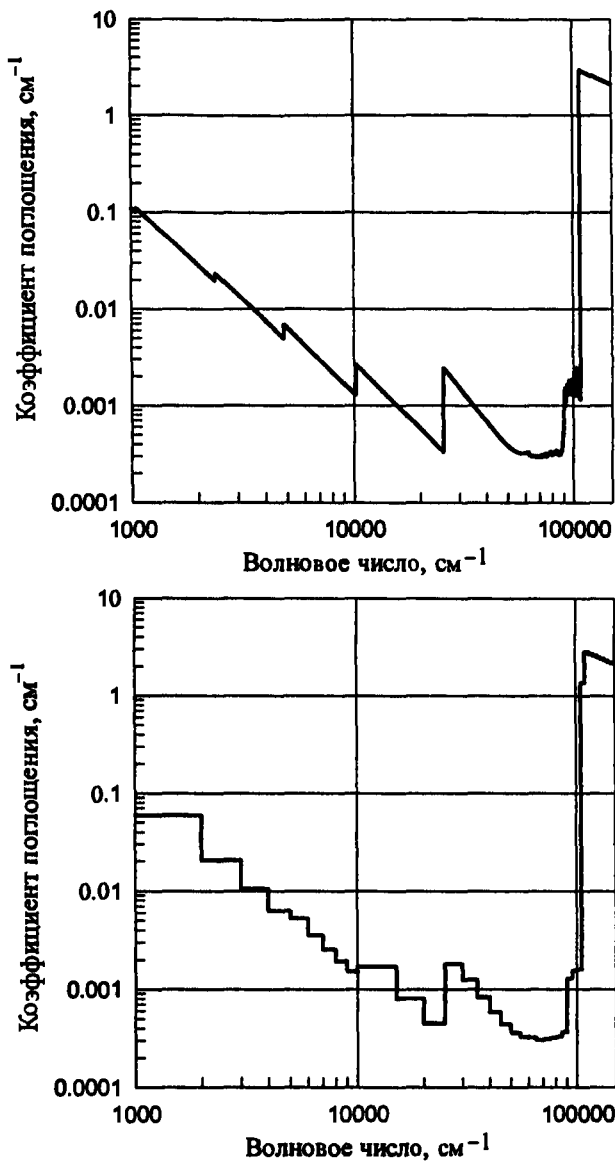


Рис. П.1.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (без учета атомных линий) при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

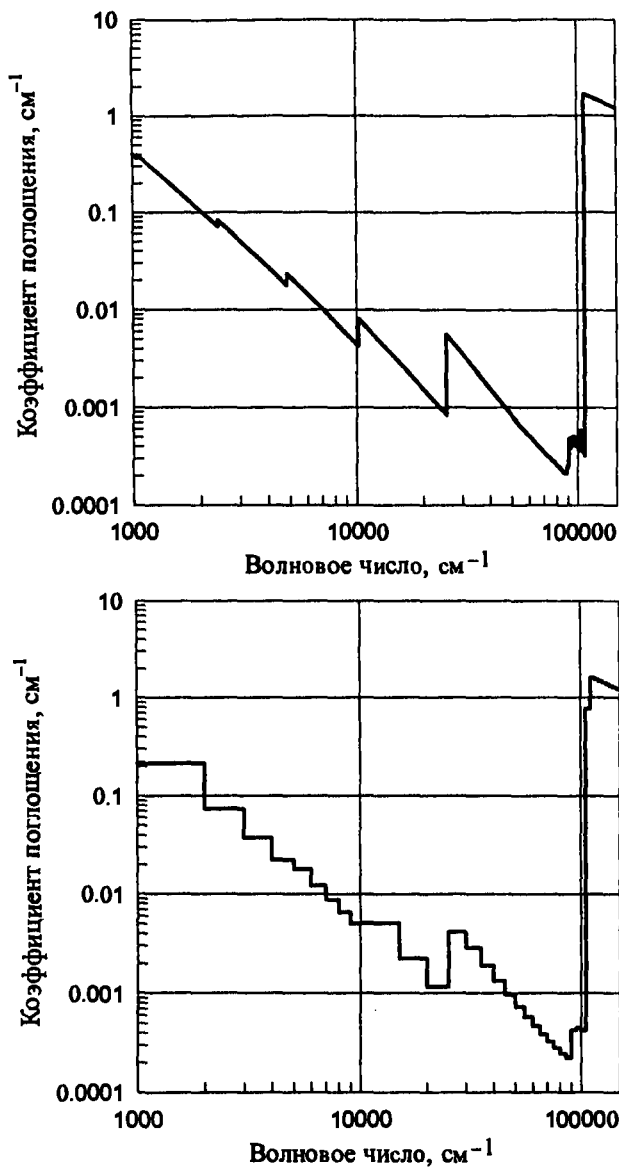


Рис. П.1.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (без учета атомных линий) при $T = 14000$ К и $p = 1$ атм

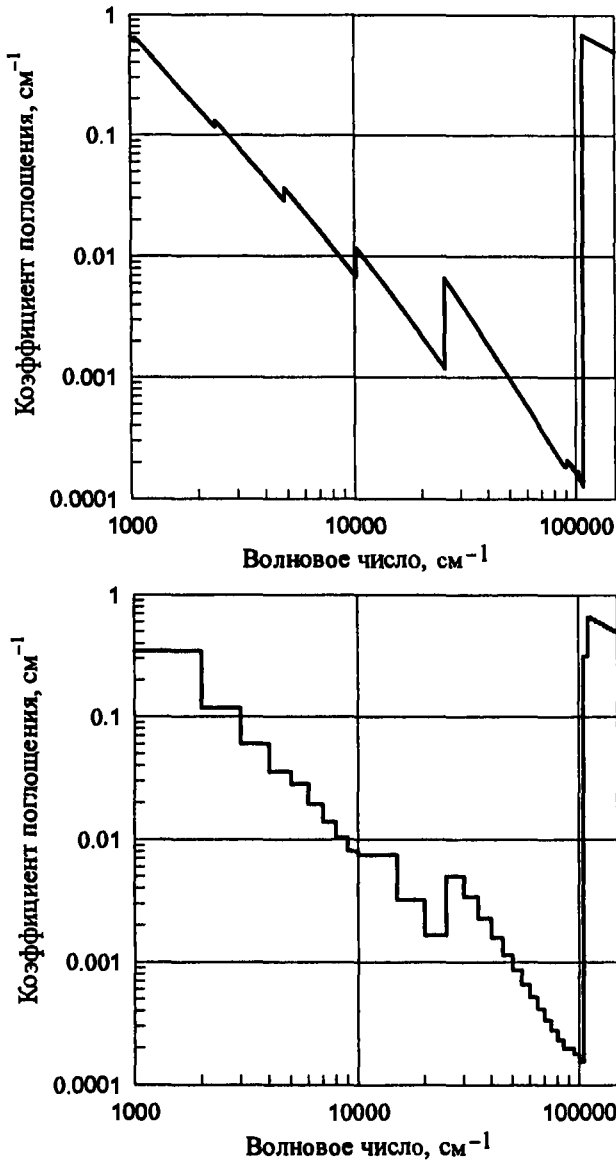


Рис. П.1.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (без учета атомных линий) при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

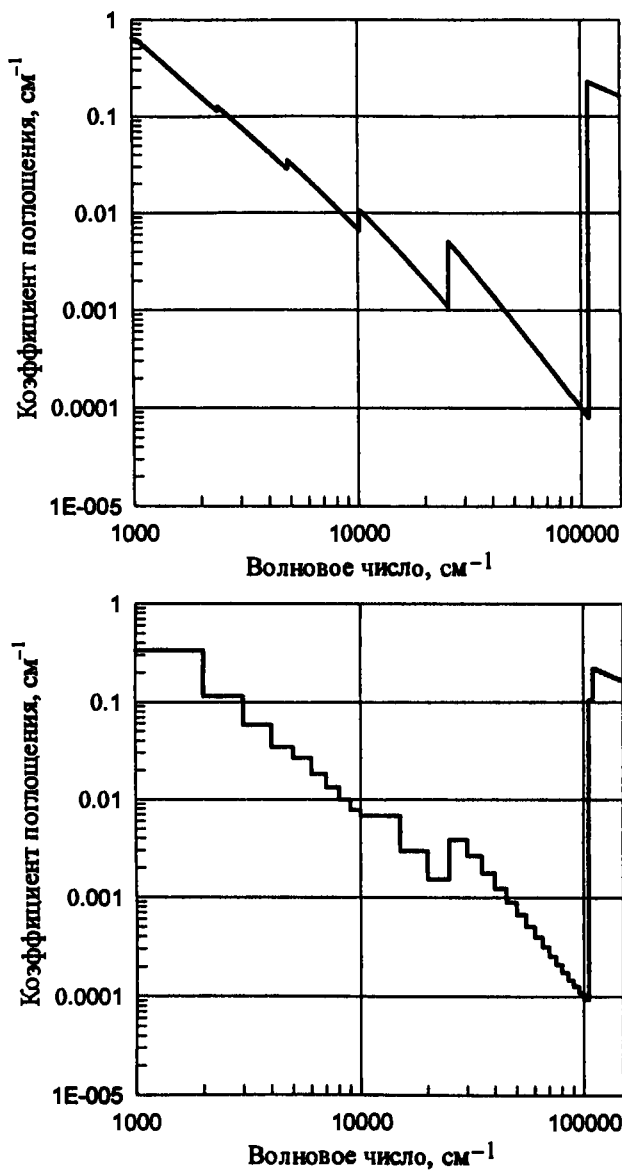


Рис. П.1.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (без учета атомных линий) при $T = 18000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

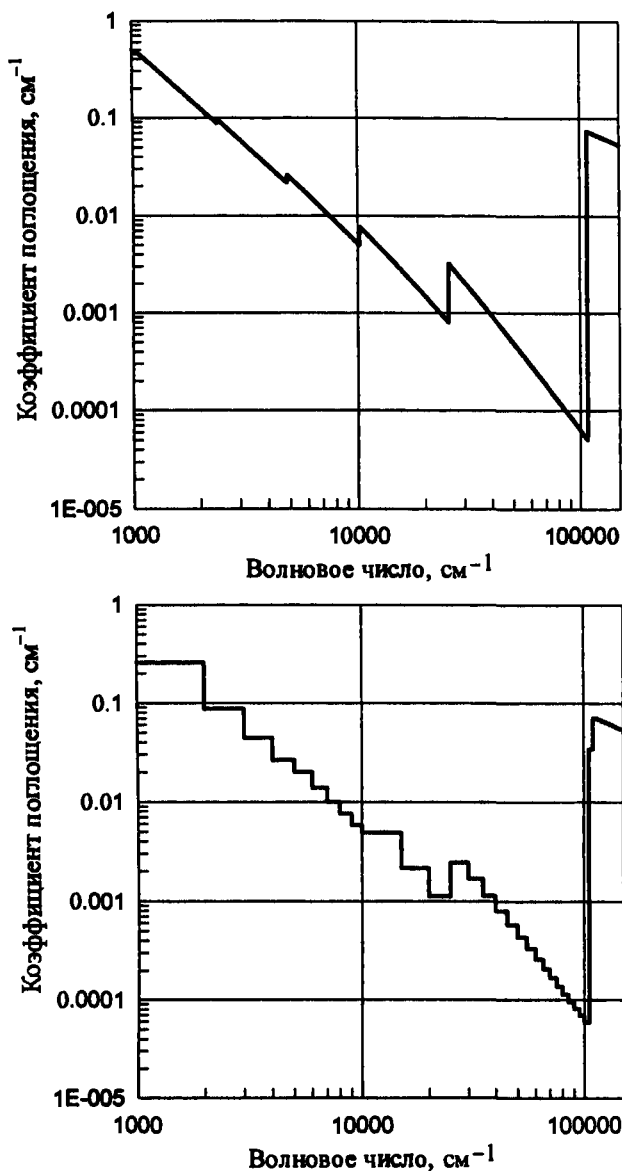


Рис. П.1.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (без учета атомных линий) при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

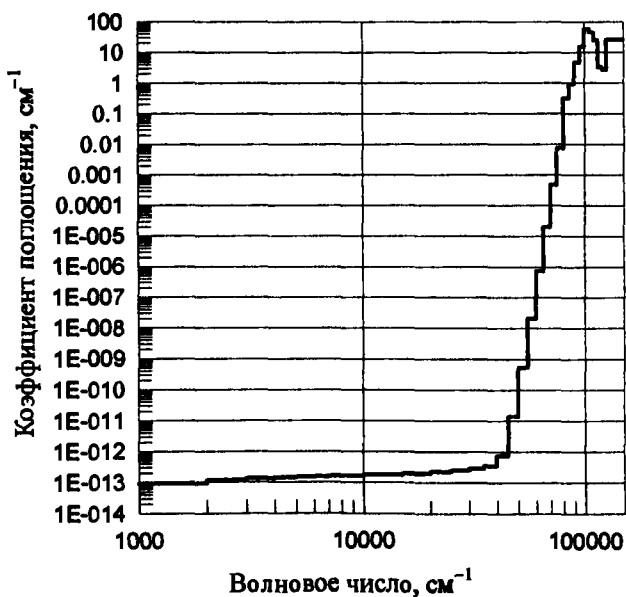
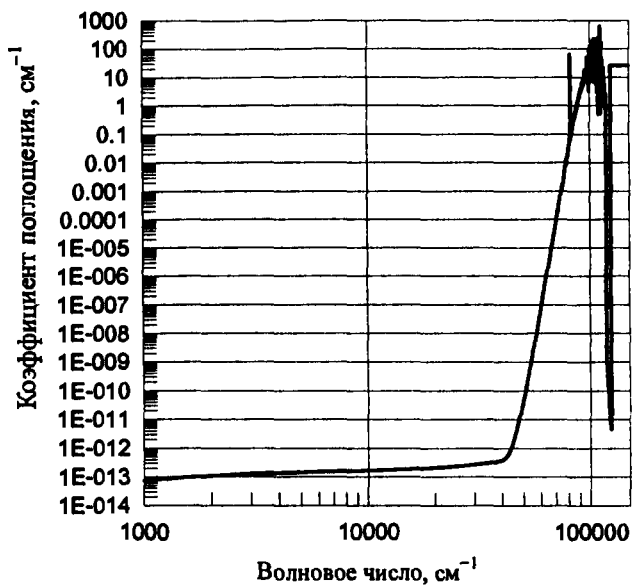


Рис. П.2.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T=2000$ К и $p=1$ атм

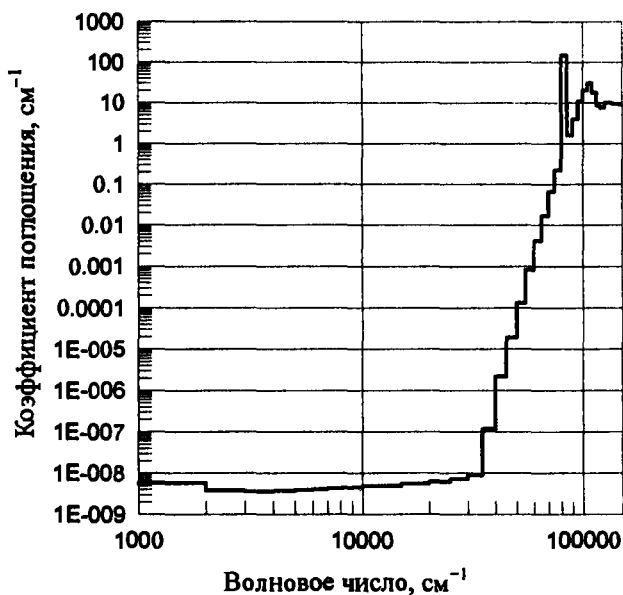
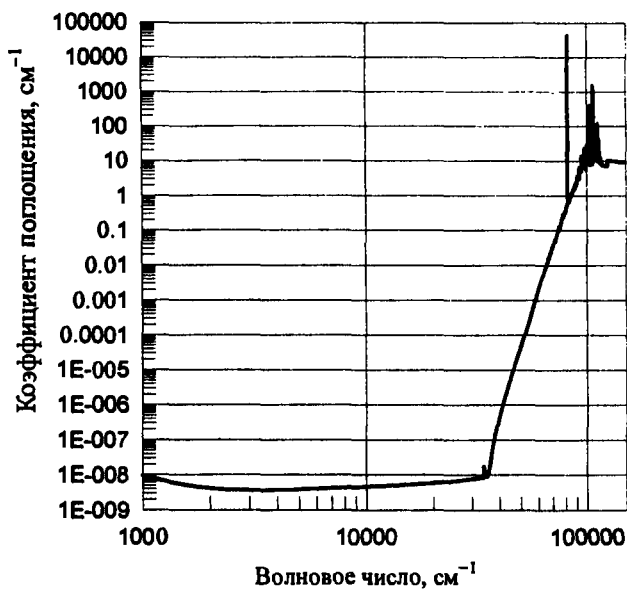


Рис. П.2.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

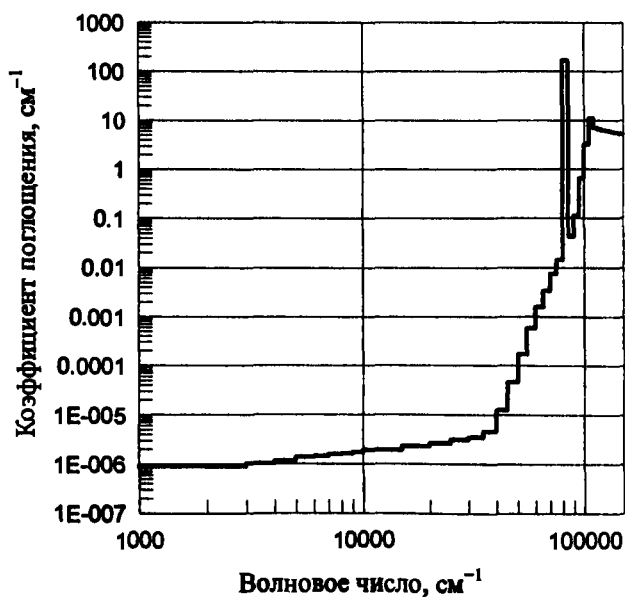
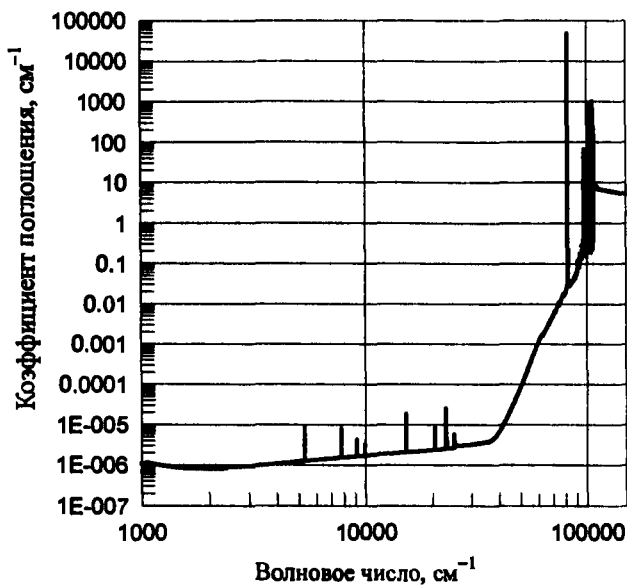


Рис. П.2.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T = 6000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

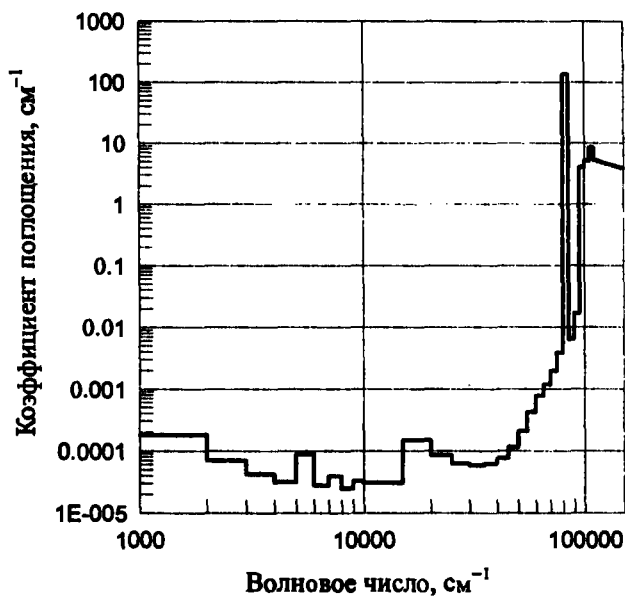
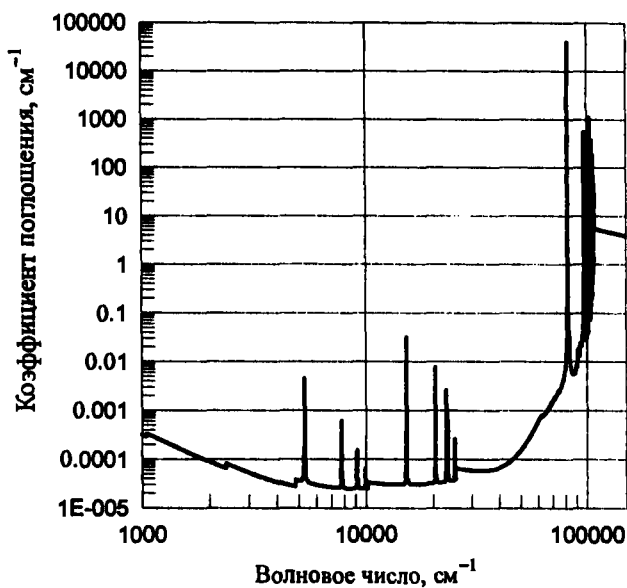


Рис. П.2.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

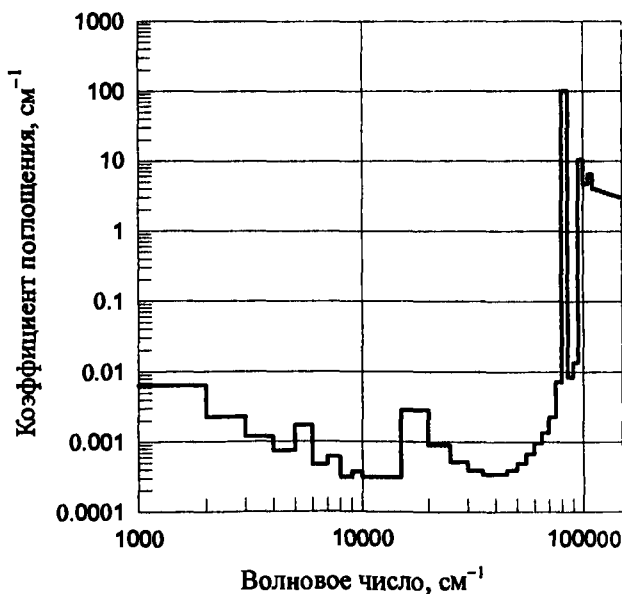
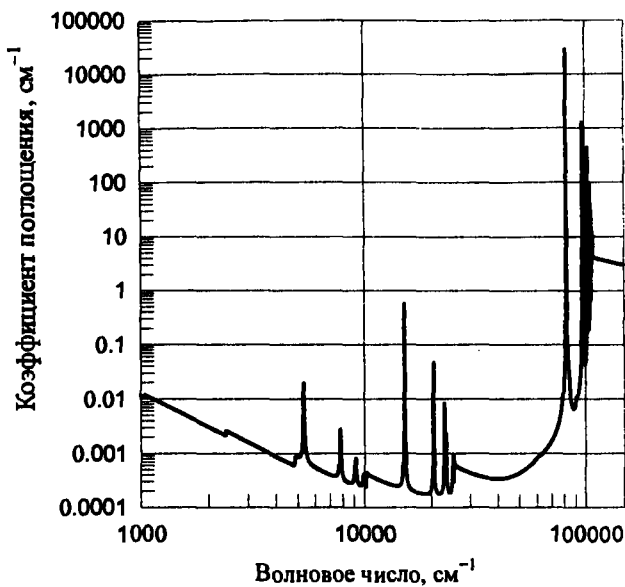


Рис. П.2.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

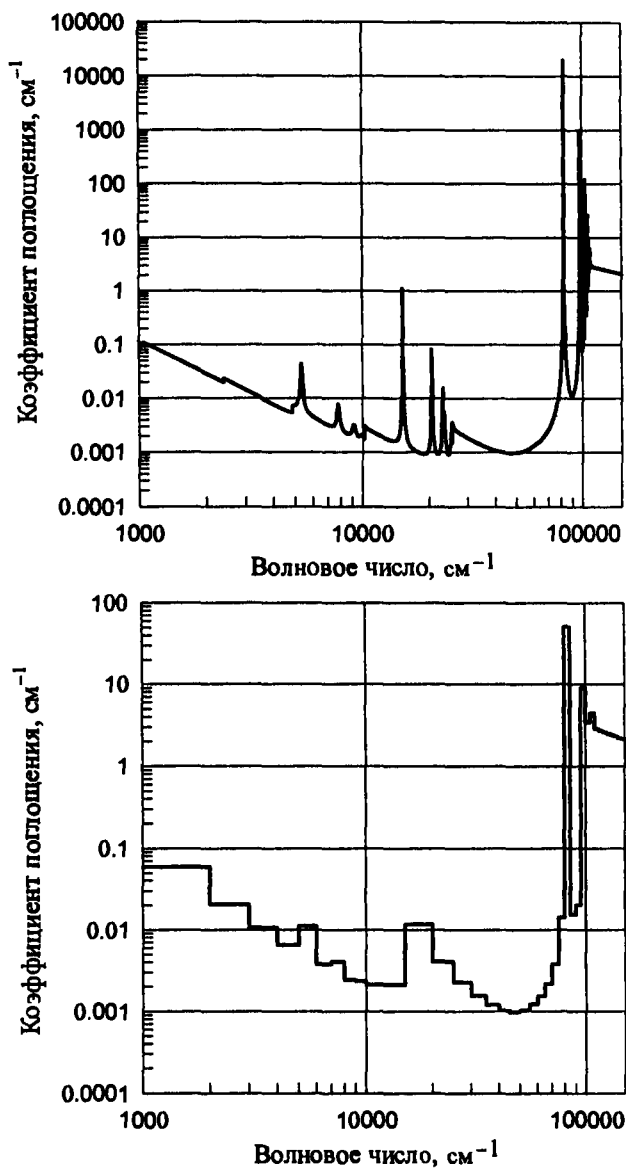


Рис. П.2.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

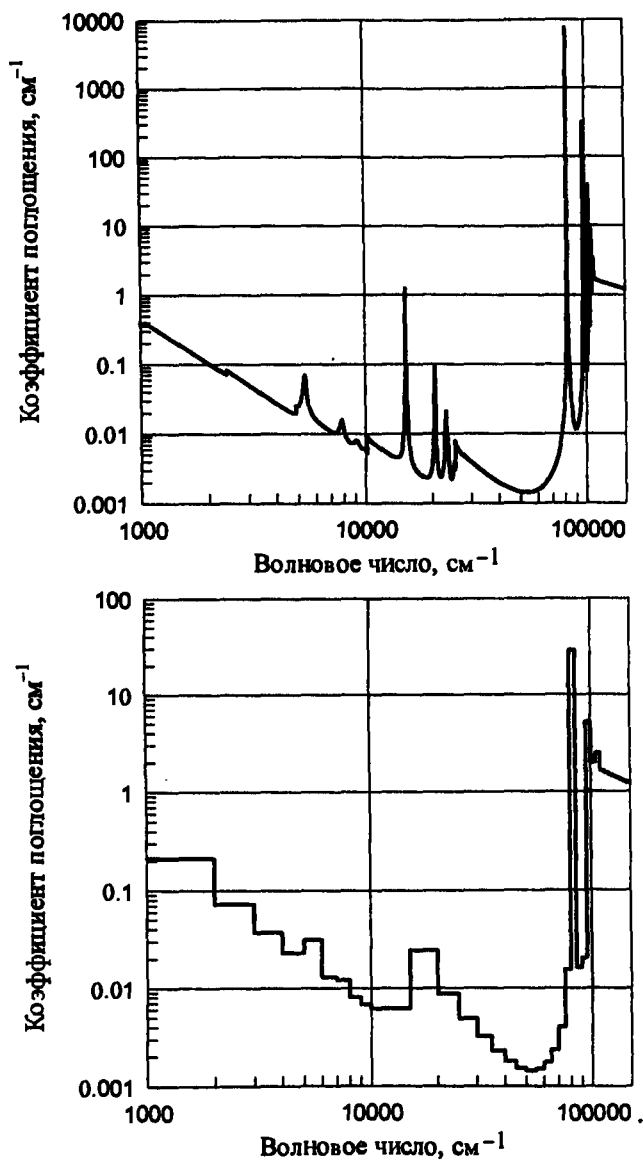


Рис. П.2.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T = 14000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

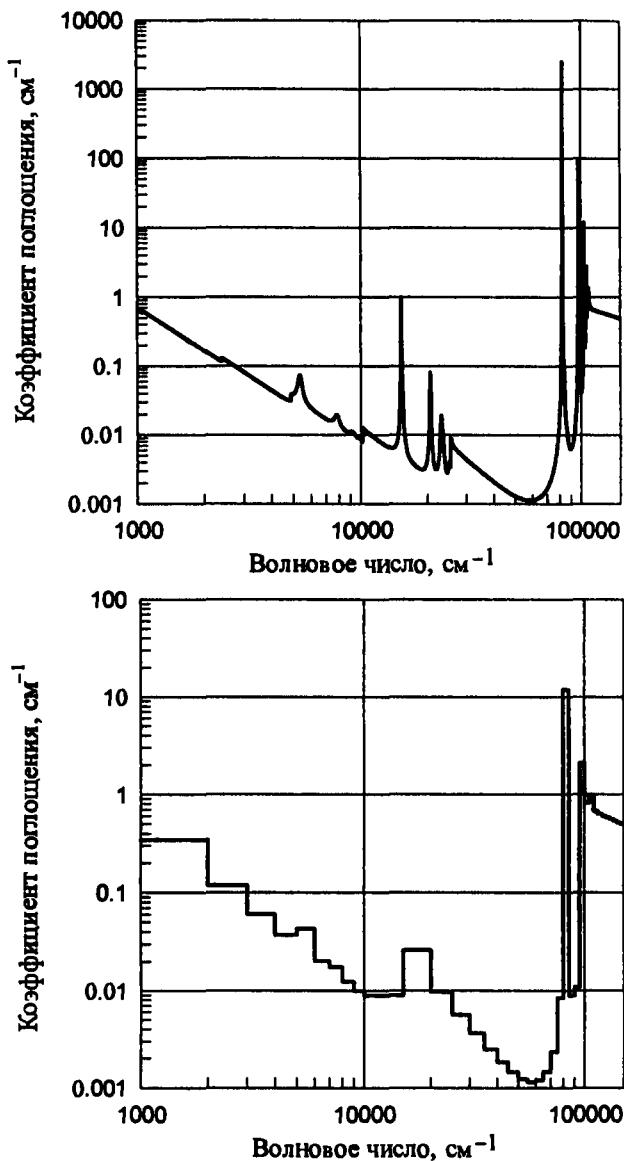


Рис. П.2.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

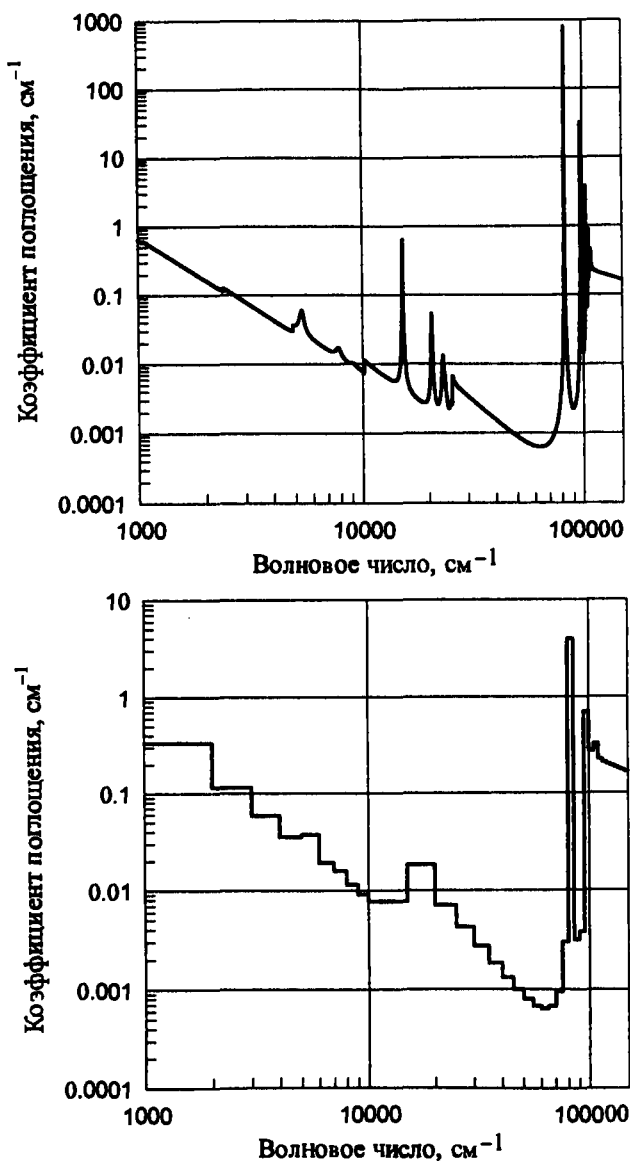


Рис. П.2.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T = 18000$ К и $p = 1$ атм

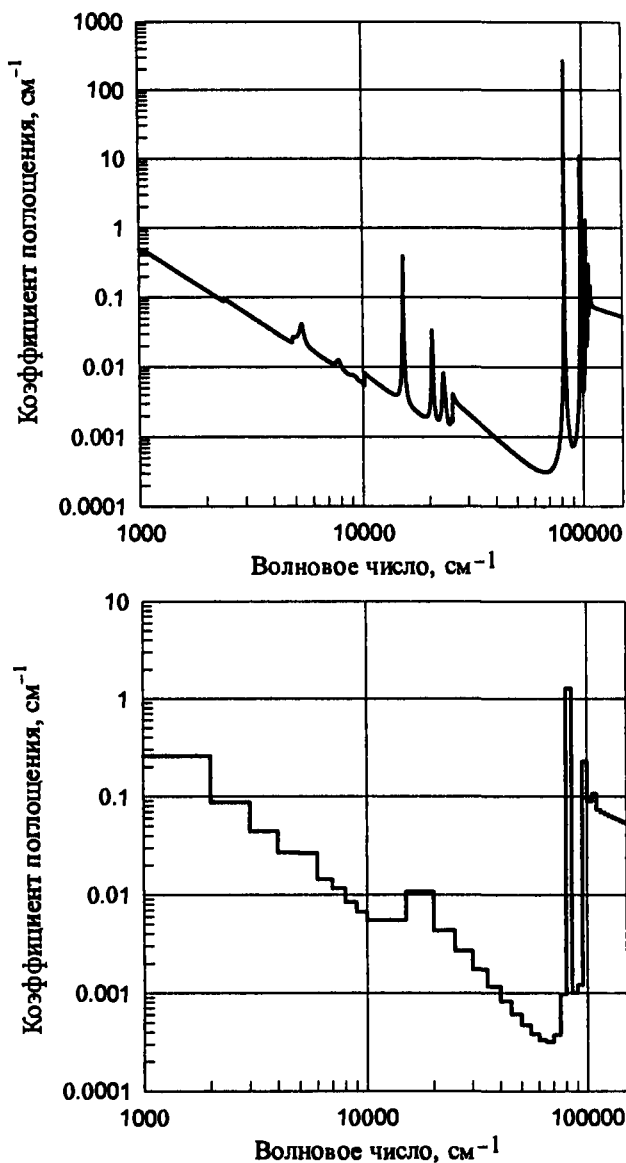


Рис. П.2.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения H_2 (с учетом атомных линий) при $T=20000$ К и $p=1$ атм

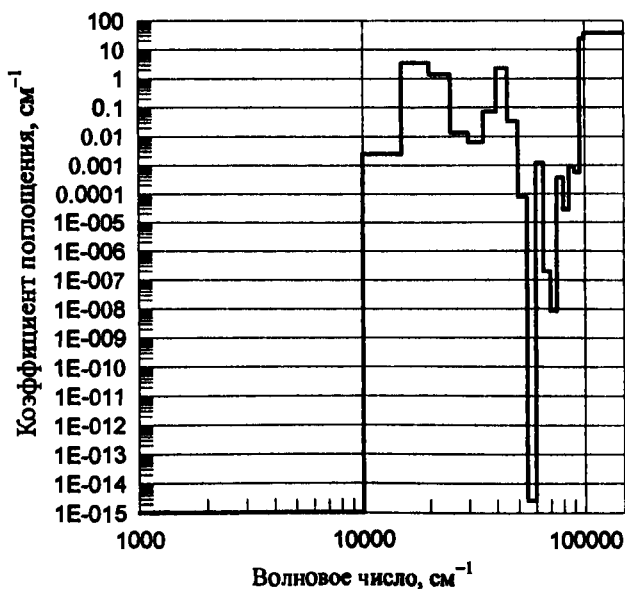
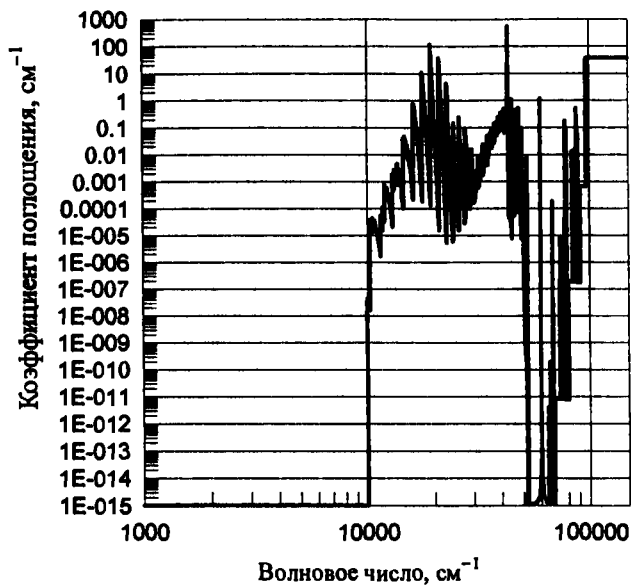


Рис. П.3.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C₂ при $T = 2000$ К и $p = 1.0$ атм

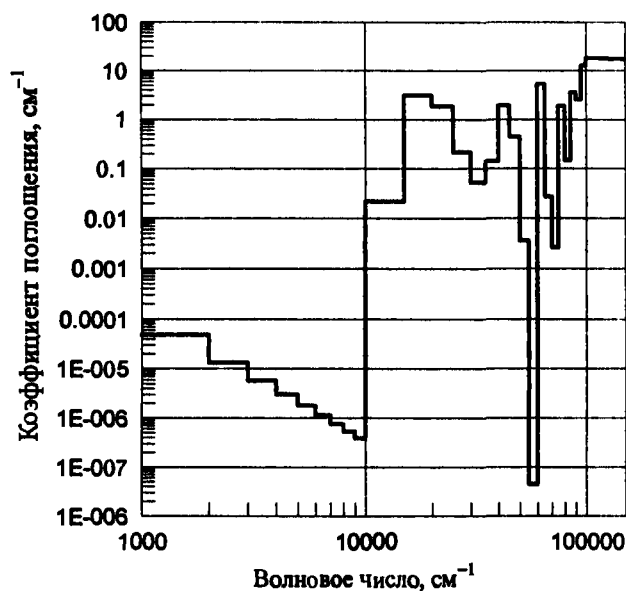
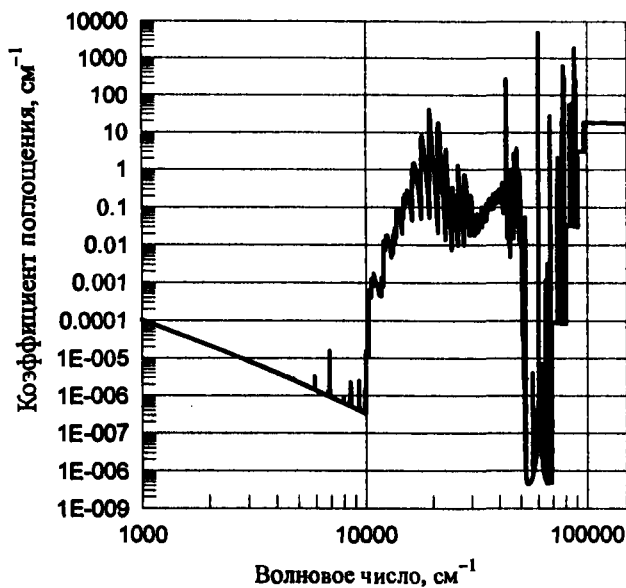


Рис. П.3.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 4000$ К и $p = 1.0$ атм

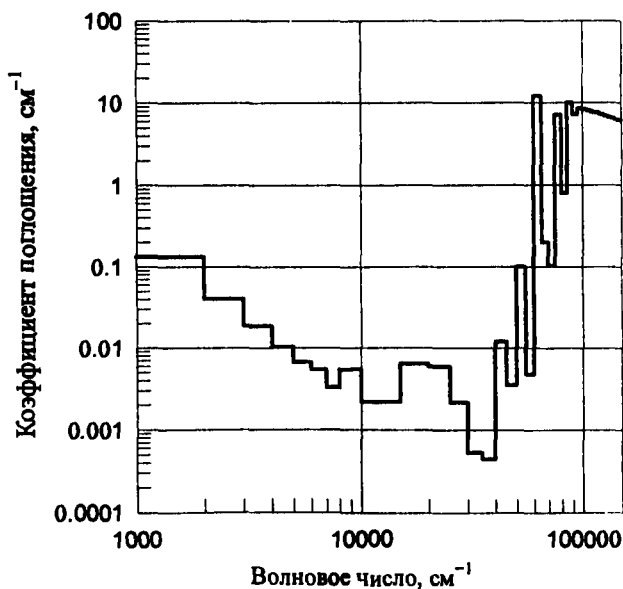
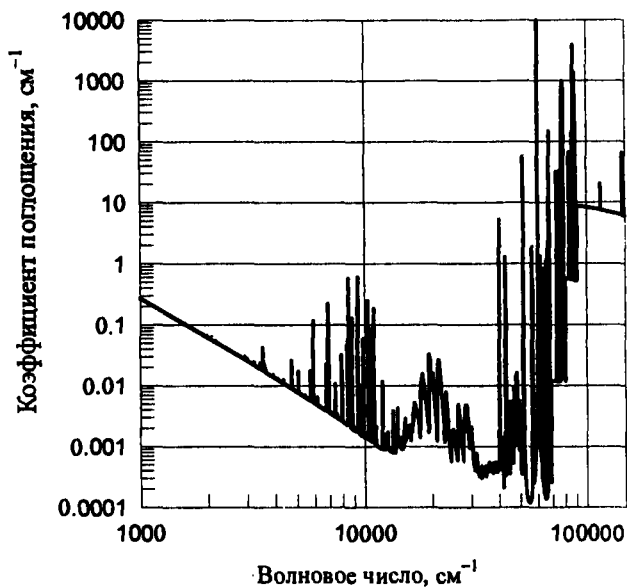


Рис. П.3.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 6000$ К и $p = 1.0$ атм

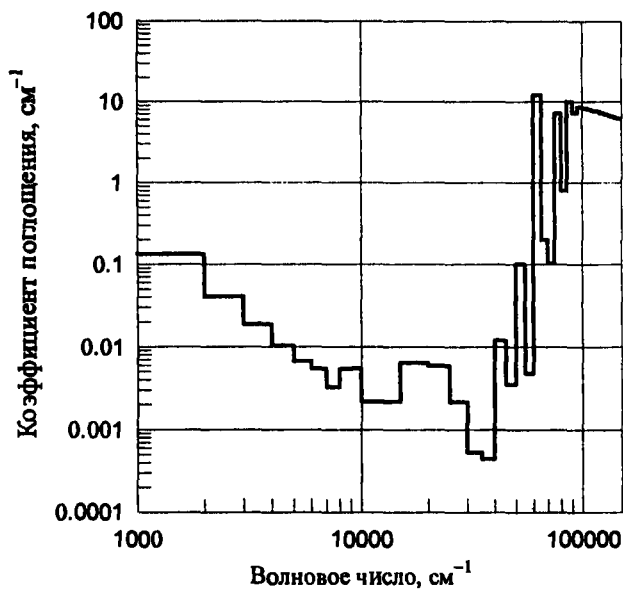
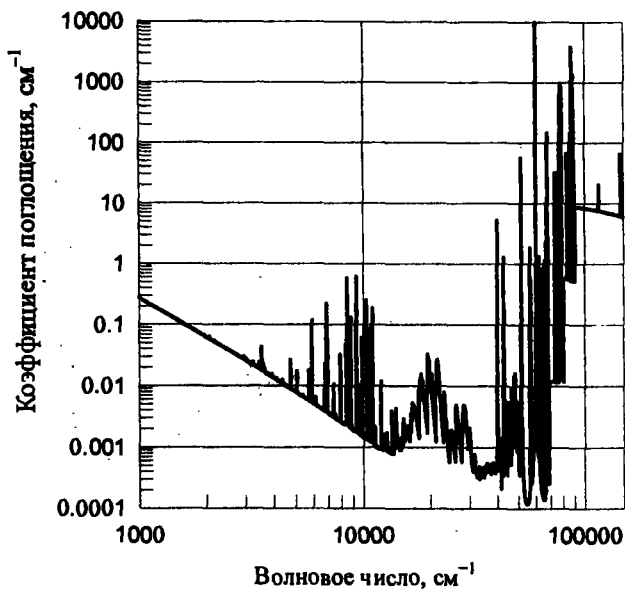


Рис. П.3.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 8000$ К и $p = 1.0$ атм

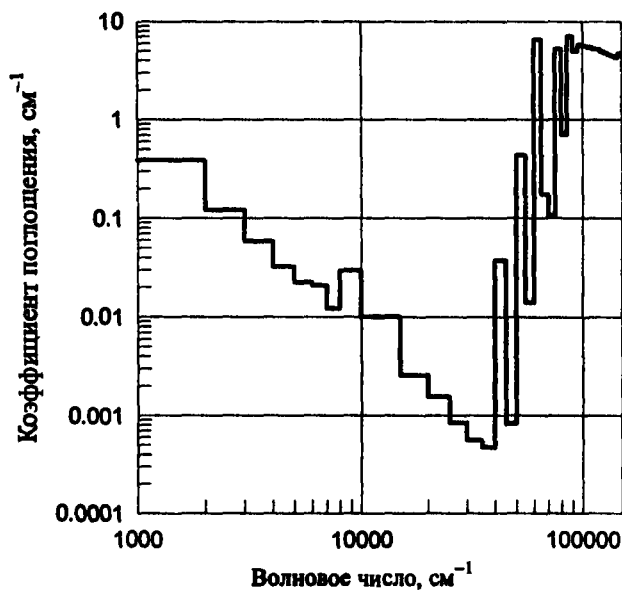
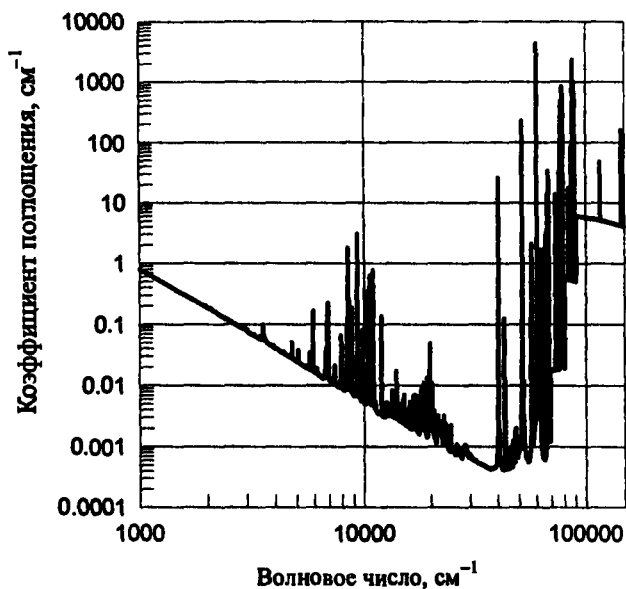


Рис. П.3.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 10000$ К и $p = 1.0$ атм

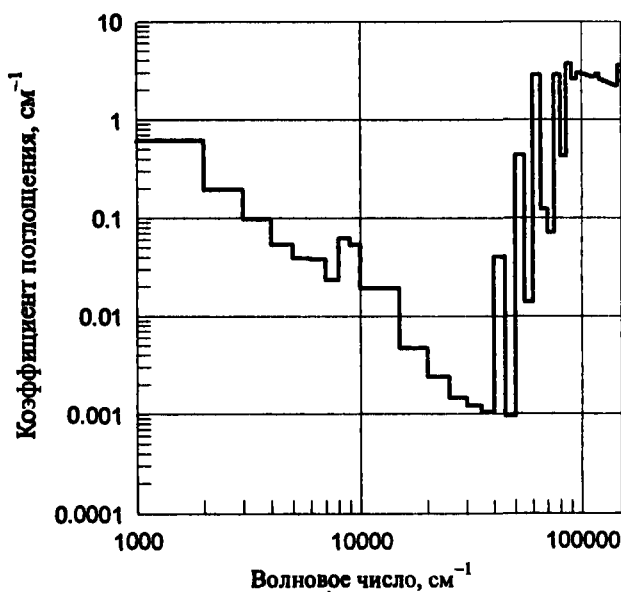
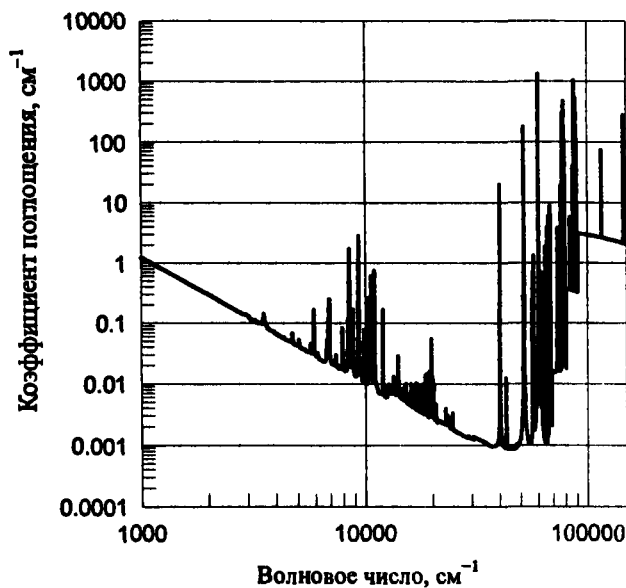


Рис. П.3.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 12000$ К и $p = 1.0$ атм

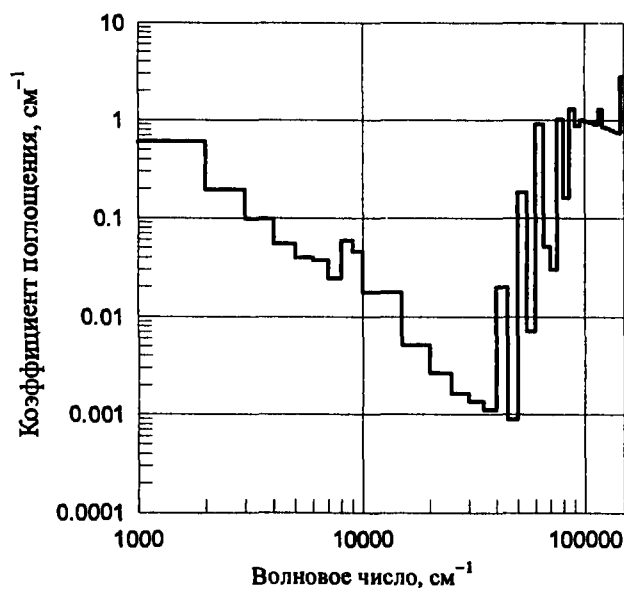
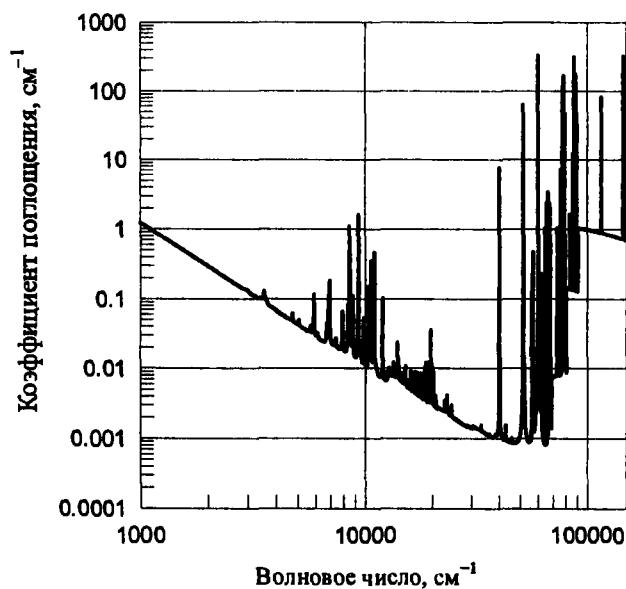


Рис. П.3.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 14000$ К и $p = 1.0$ атм

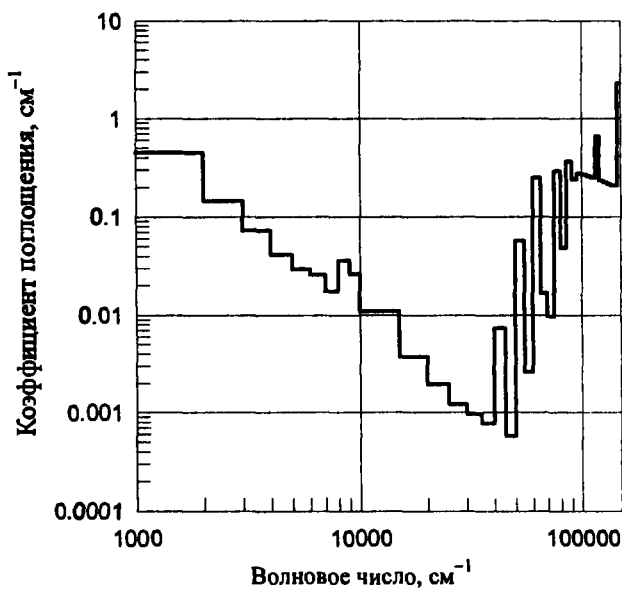
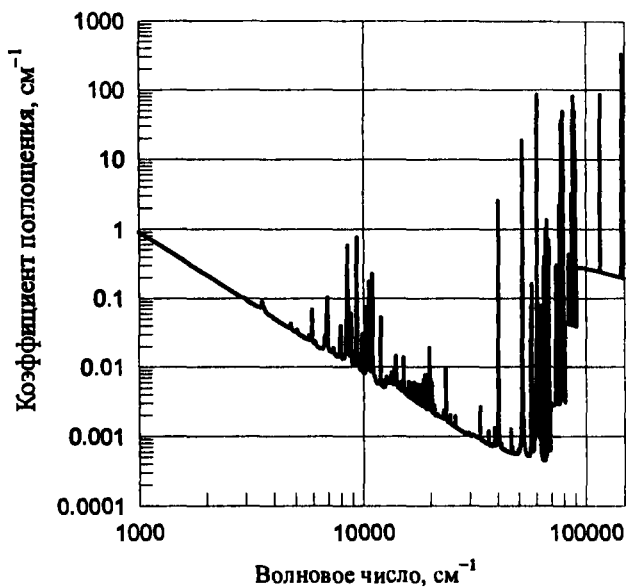


Рис. П.3.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 16000$ К и $p = 1.0$ атм

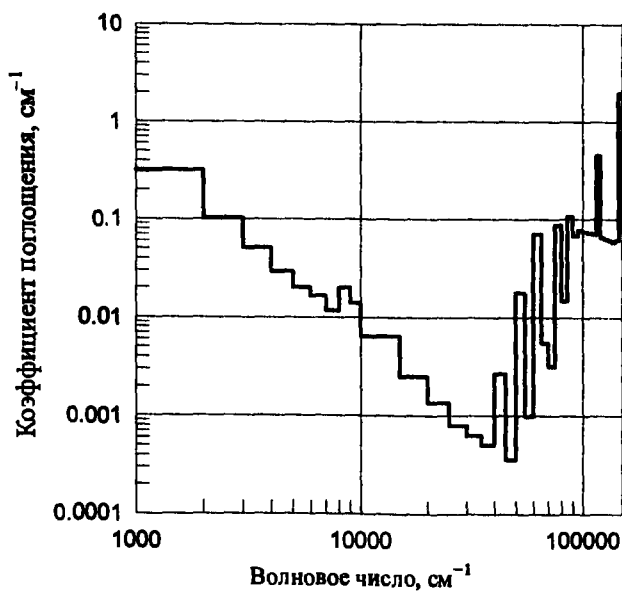
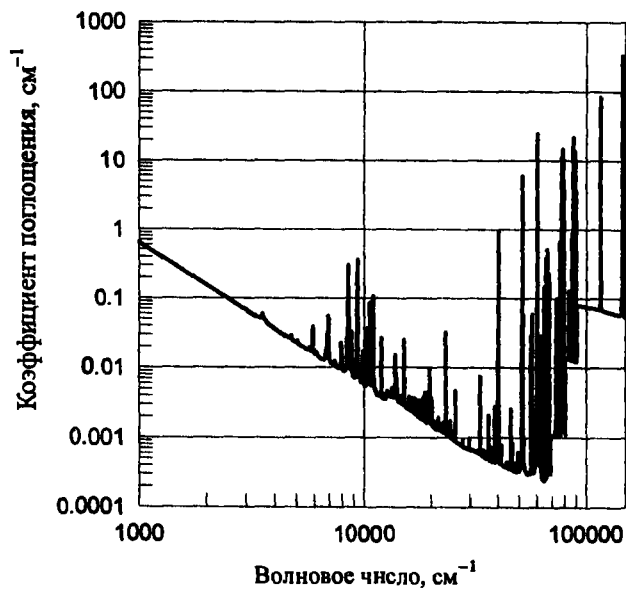


Рис. П.3.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 18000$ К и $p = 1.0$ атм

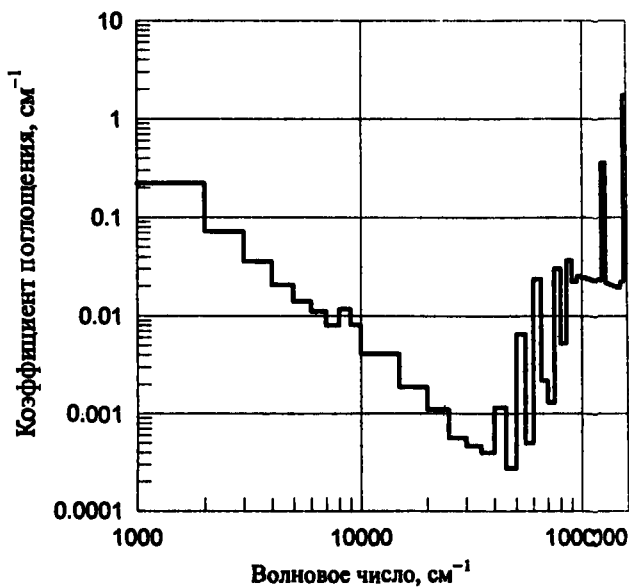
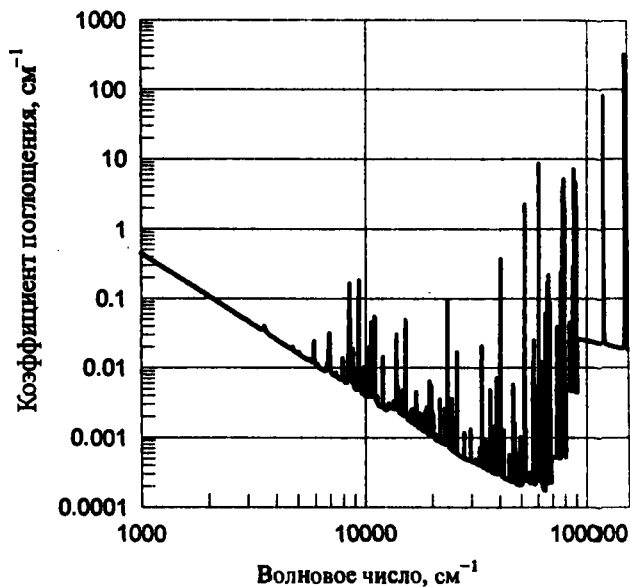


Рис. П.3.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 20000$ К и $p = 1.0$ атм

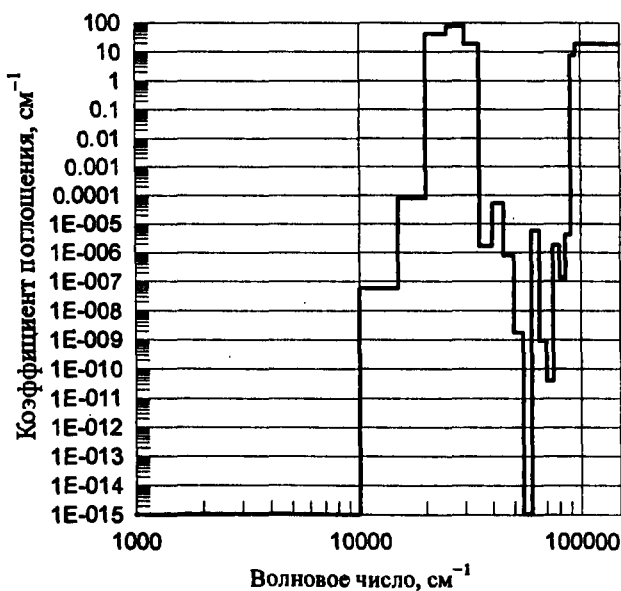
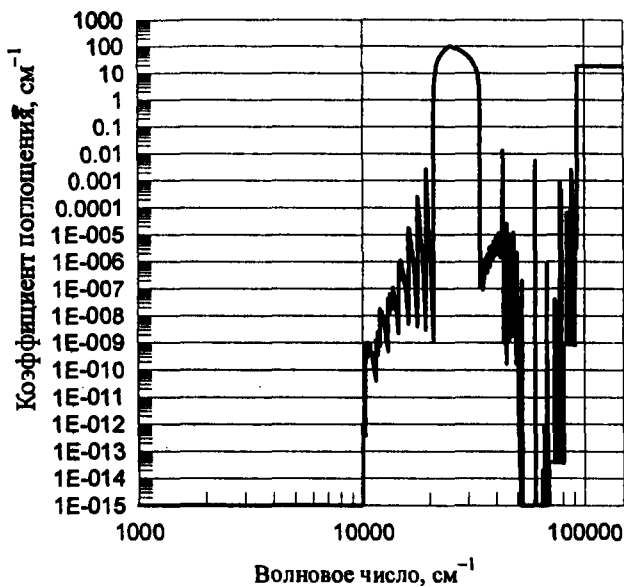


Рис. П.4.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 2000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

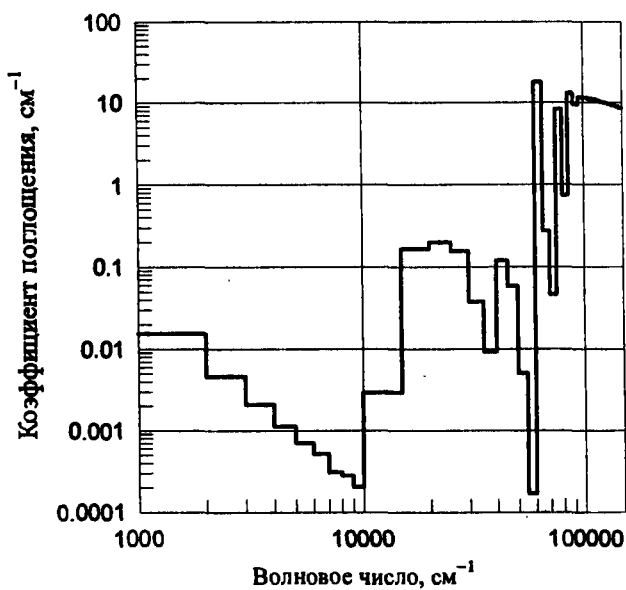
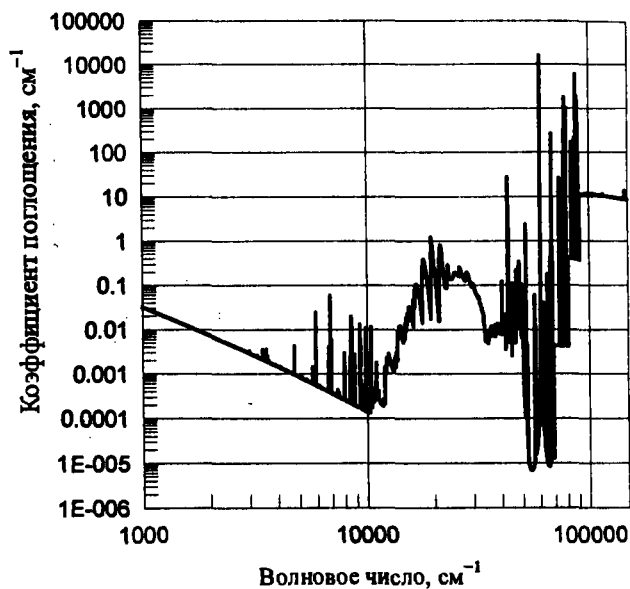


Рис. П.4.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

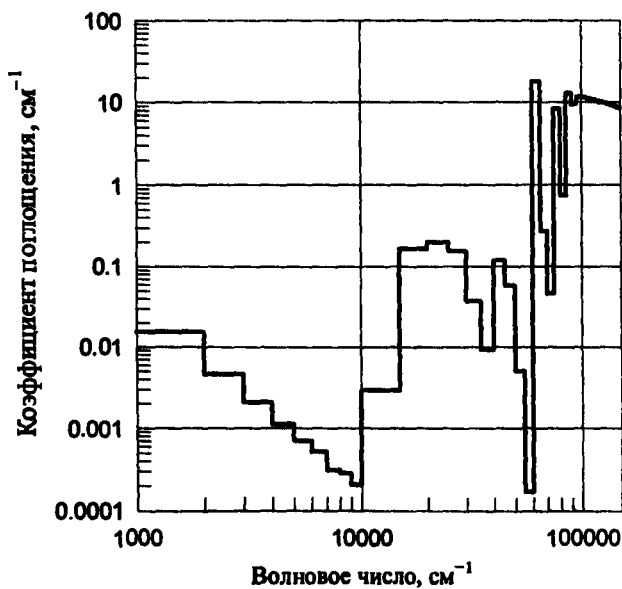
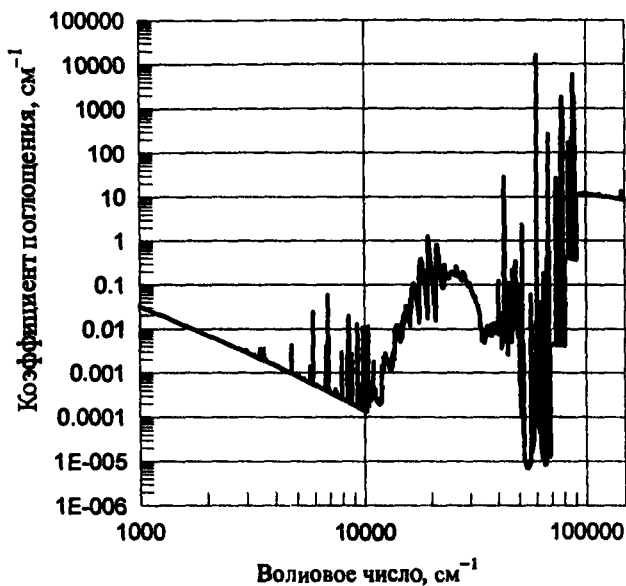


Рис. П.4.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_2 при $T = 6000$ К и $p = 1$ атм

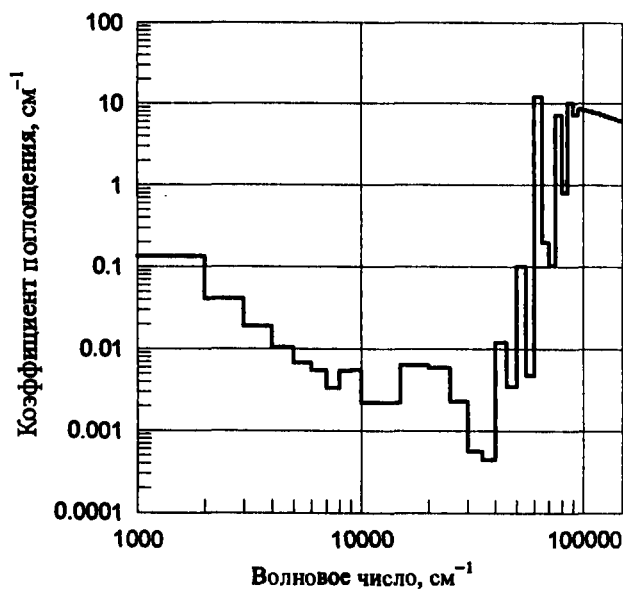
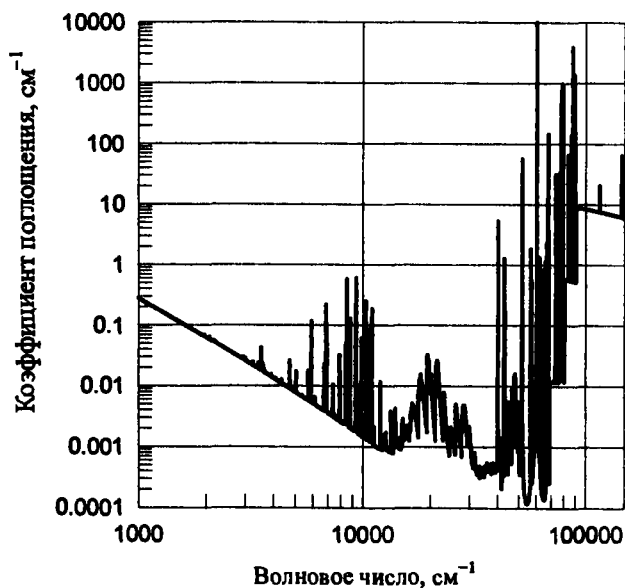


Рис. П.4.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

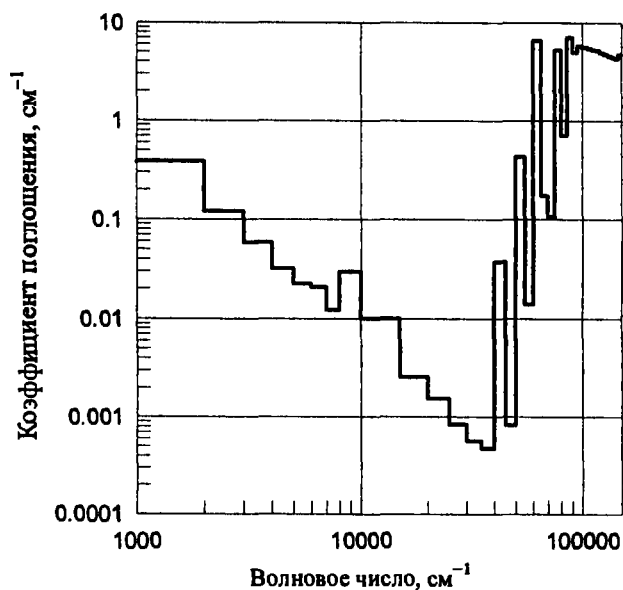
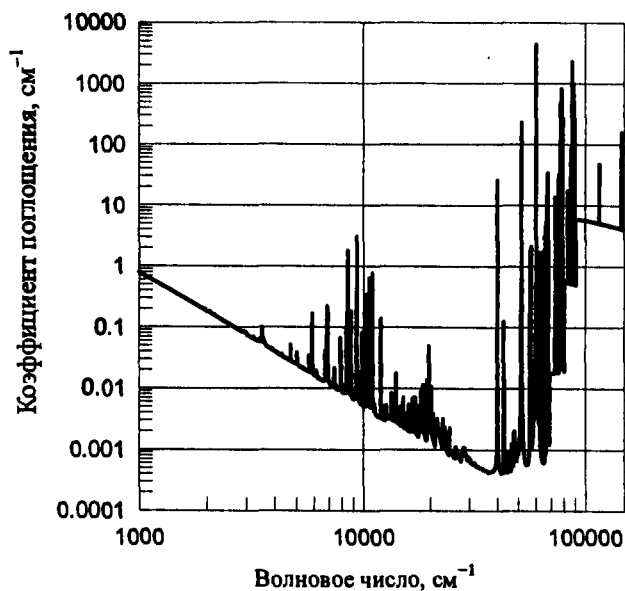


Рис. П.4.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

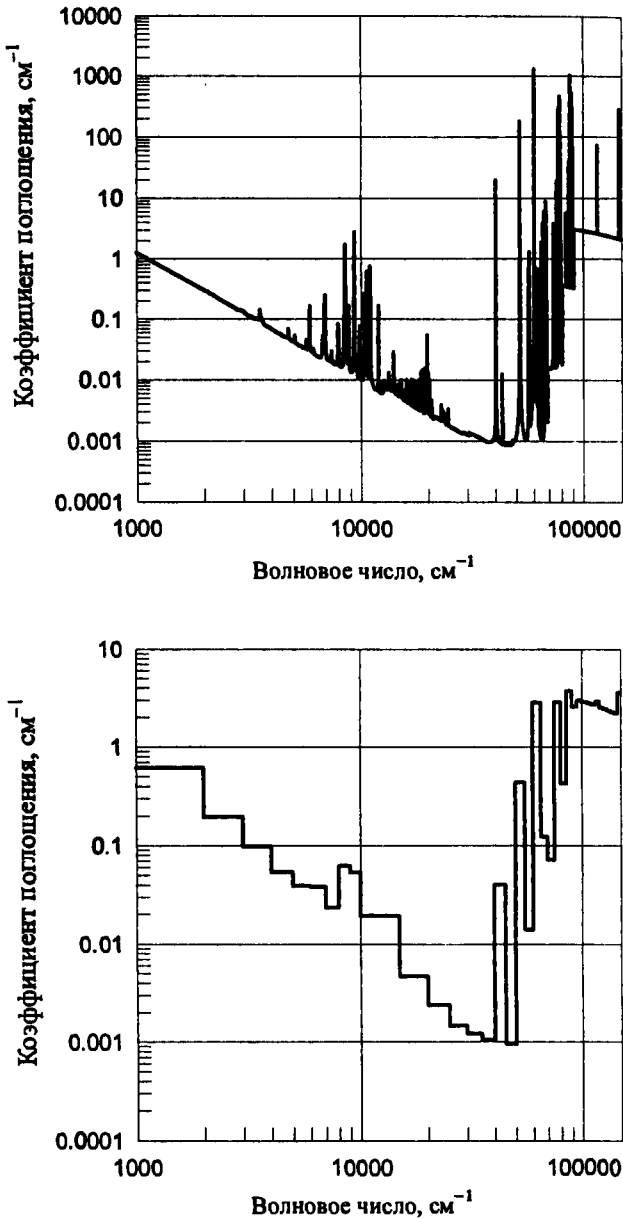


Рис. П.4.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

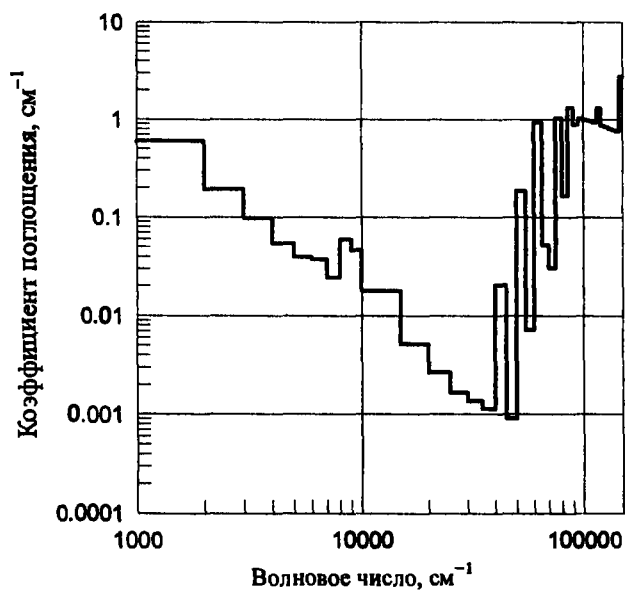
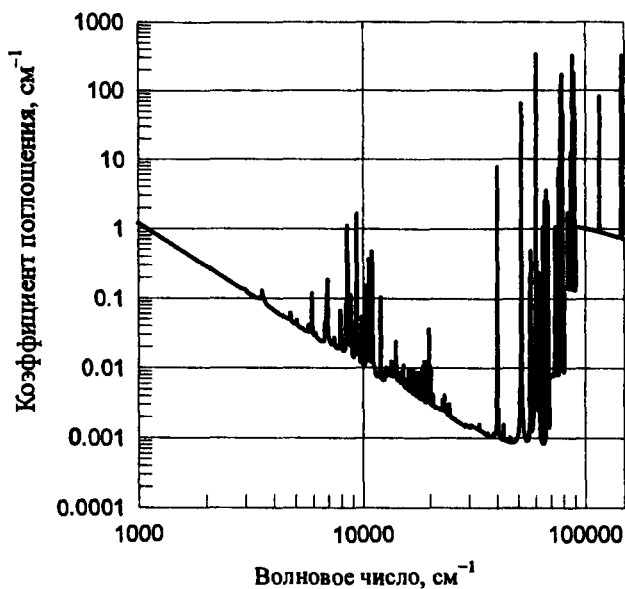


Рис. П.4.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 14000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

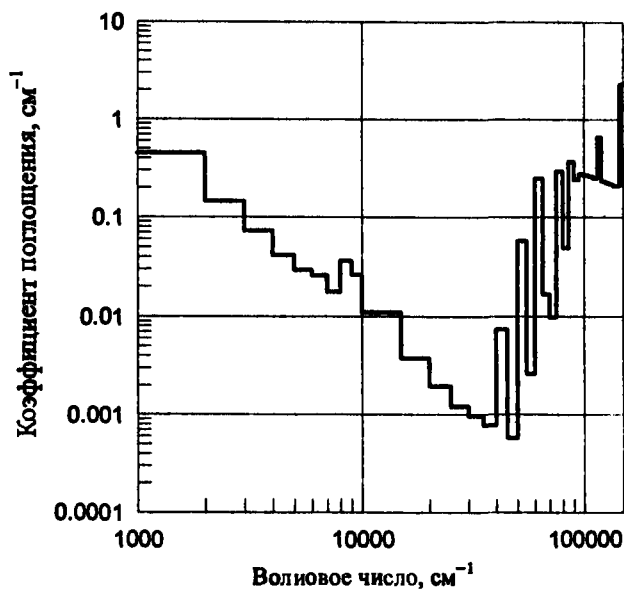
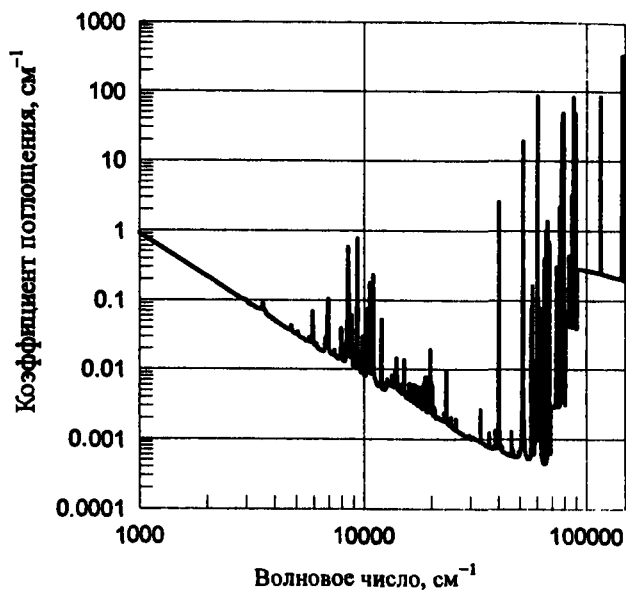


Рис. П.4.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

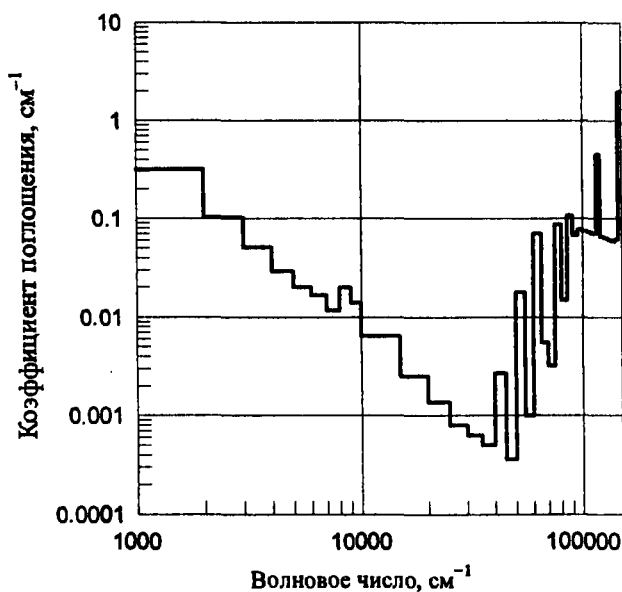
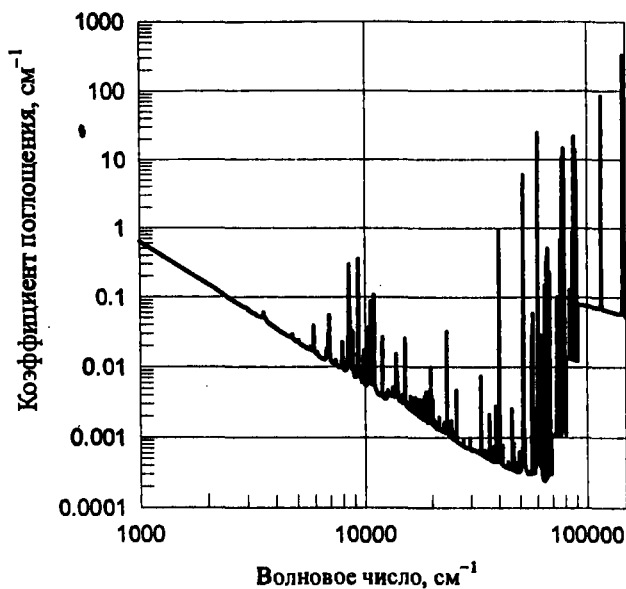


Рис. П.4.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 18000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

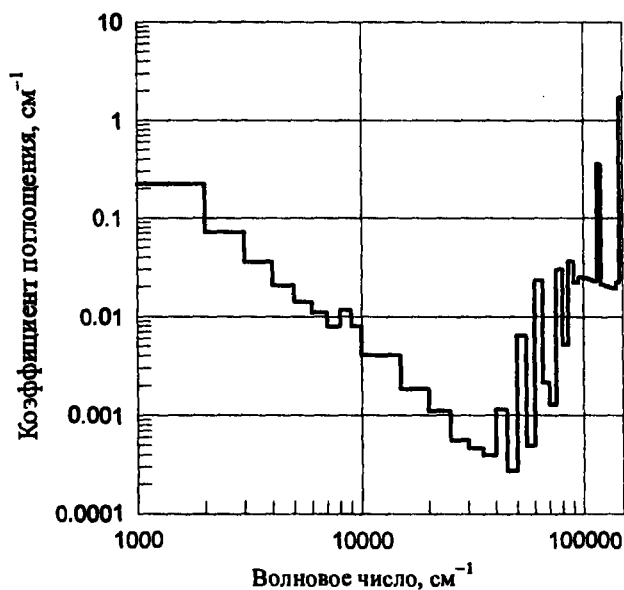
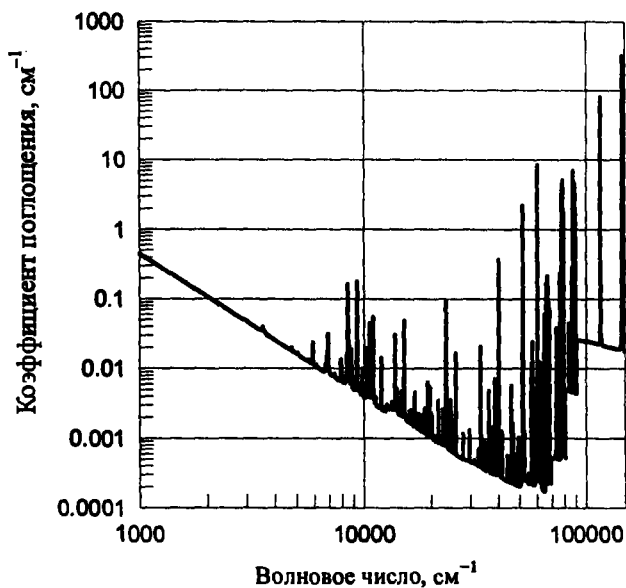


Рис. П.4.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения C_3 при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

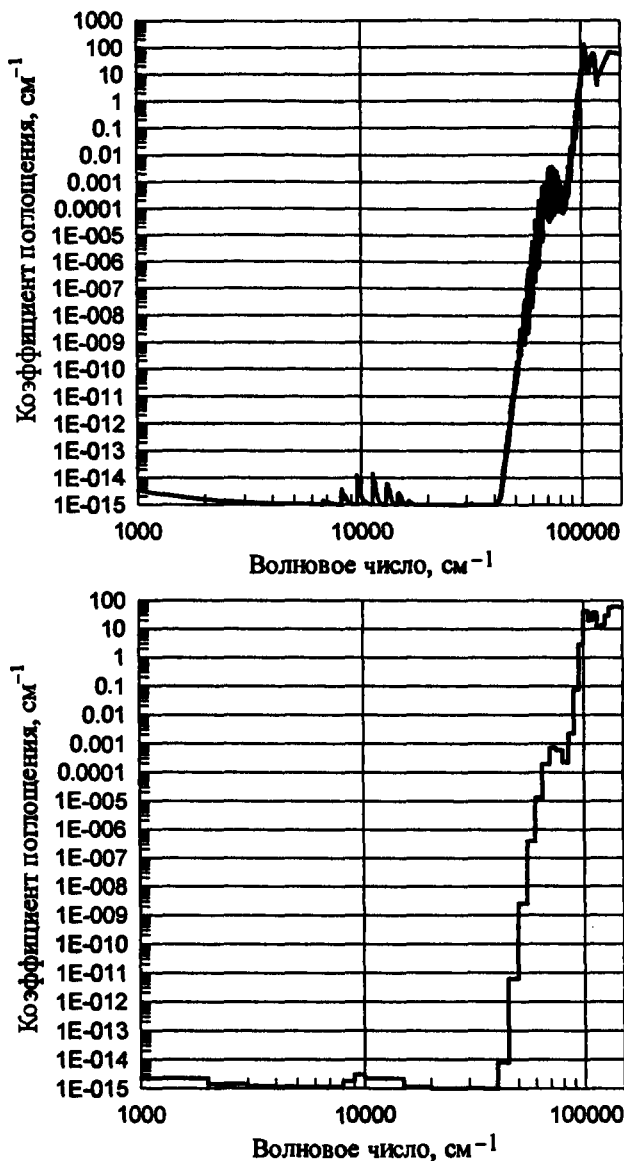


Рис. П.5.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 2000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

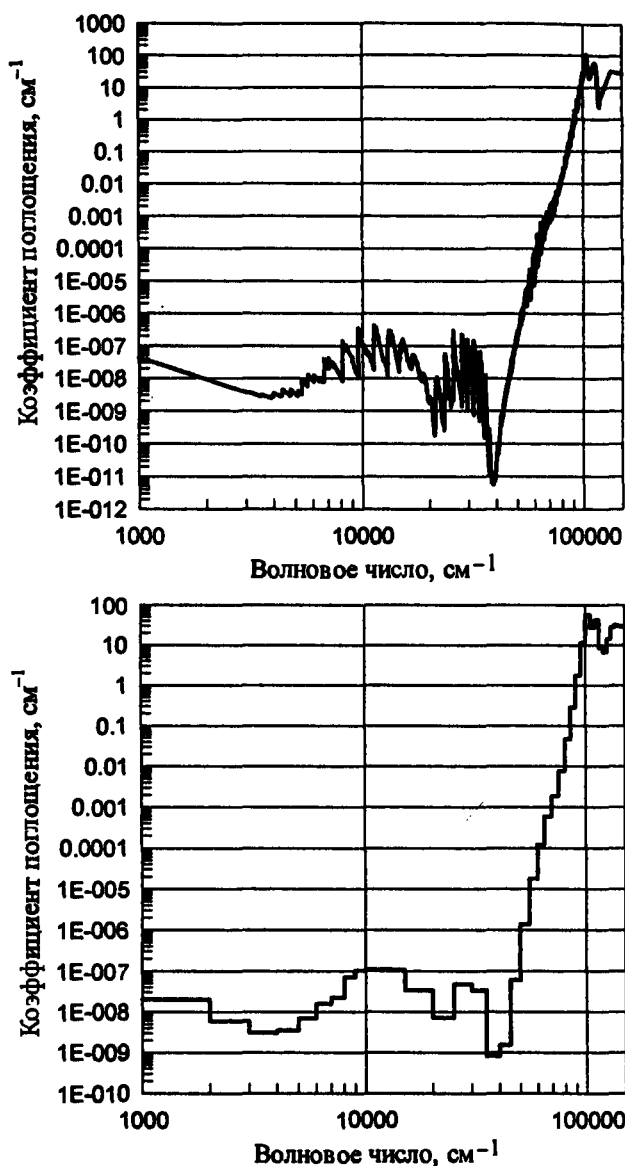


Рис. П.5.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

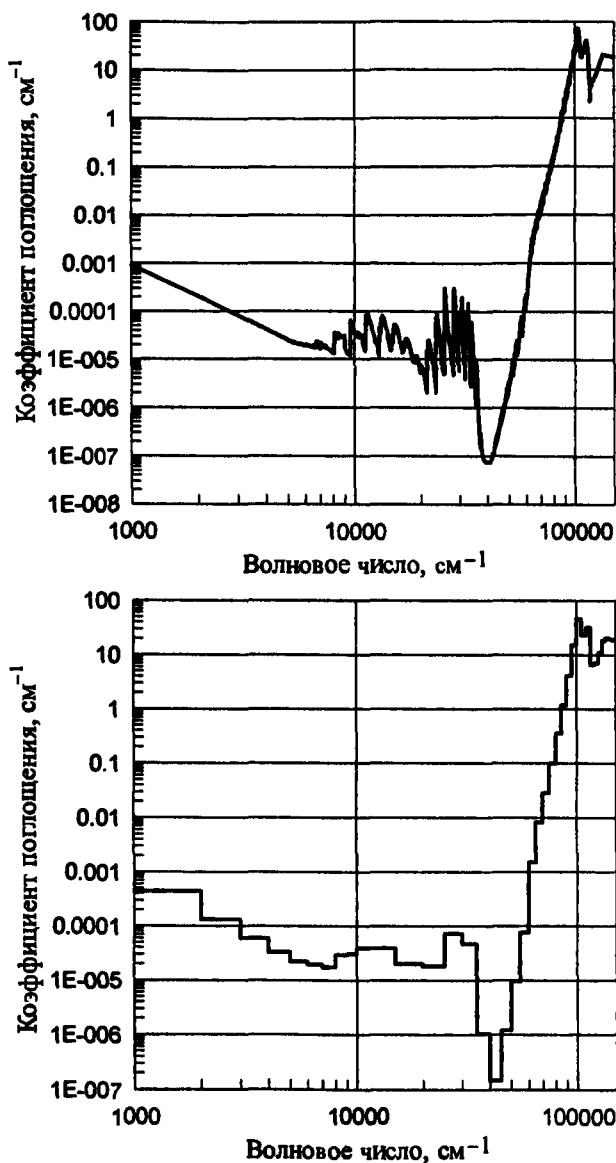


Рис. П.5.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 6000$ К и $p = 1$ атм

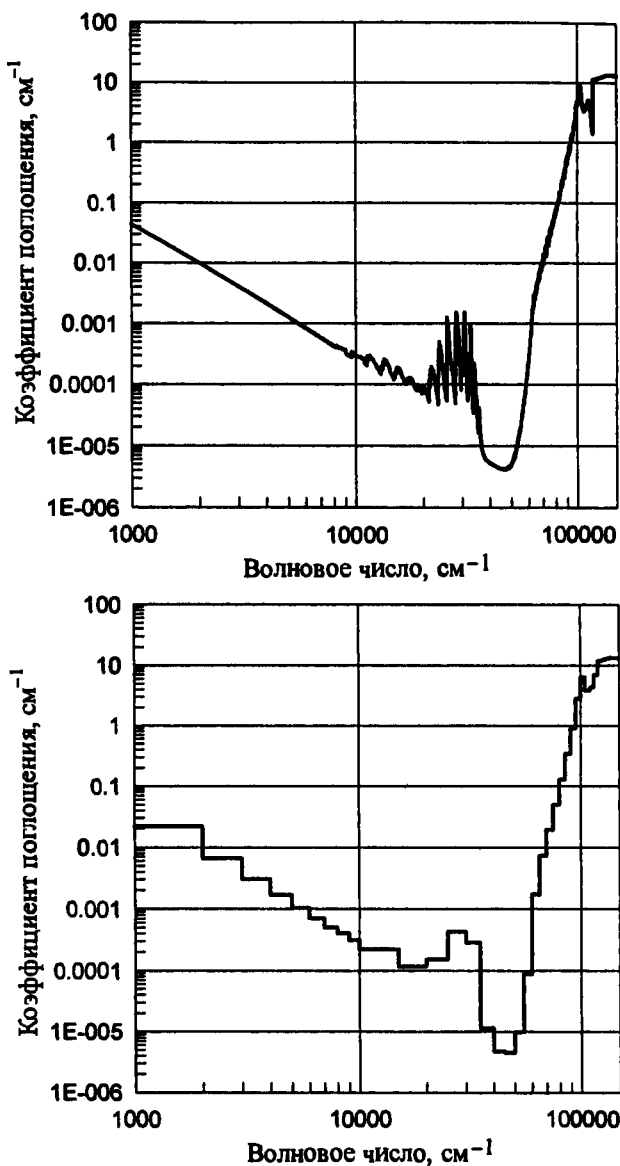


Рис. П.5.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

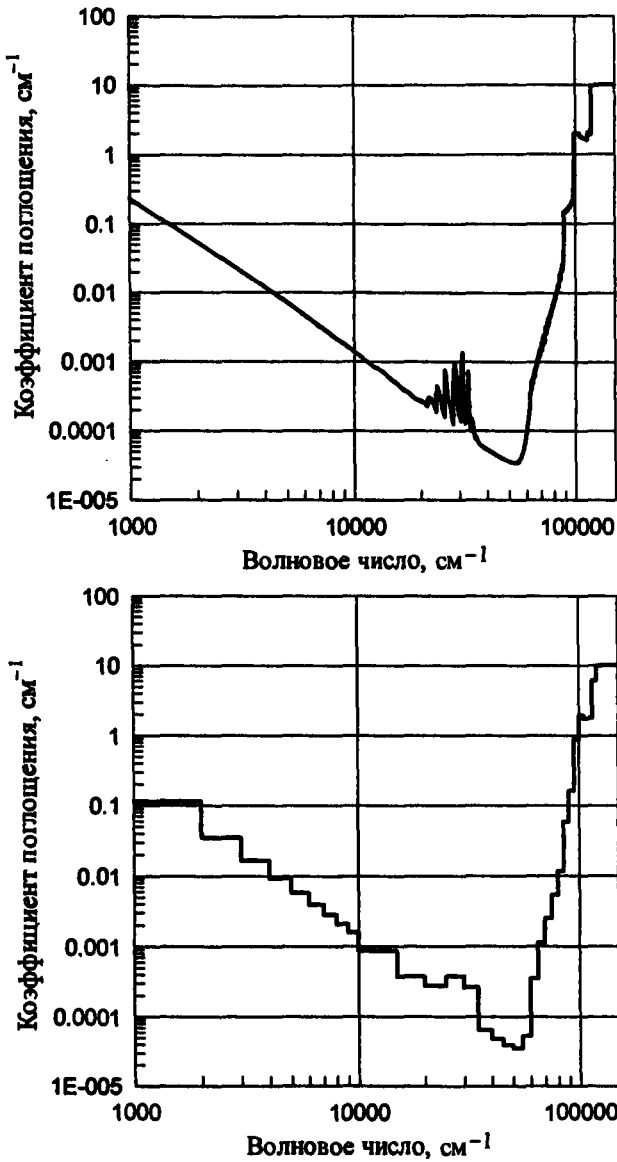


Рис. П.5.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

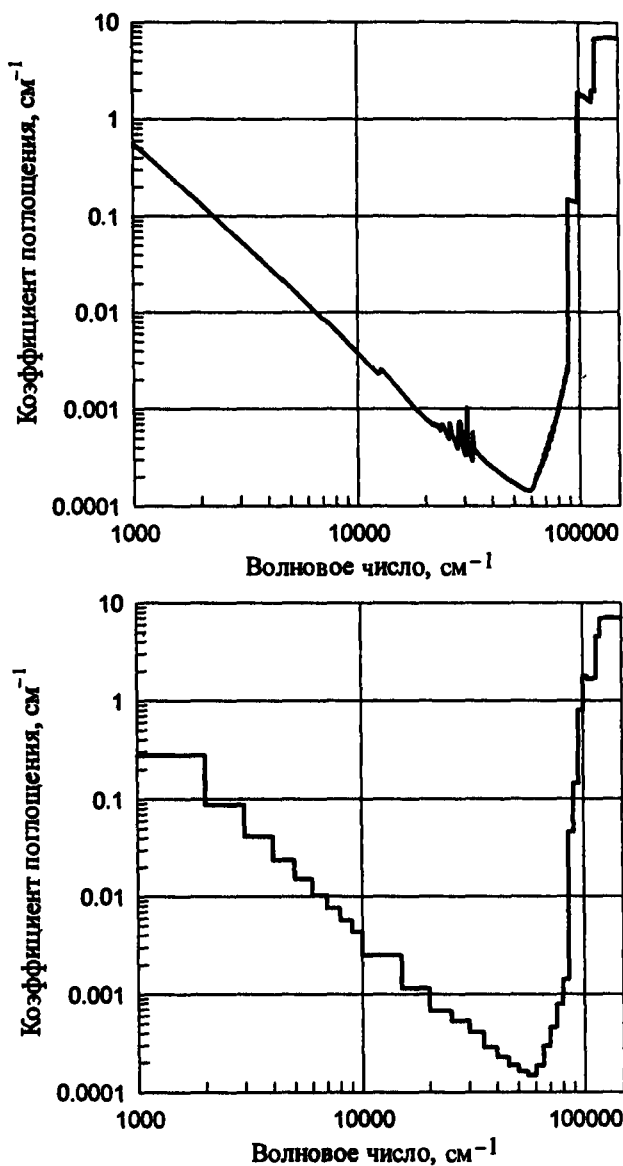


Рис. П.5.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

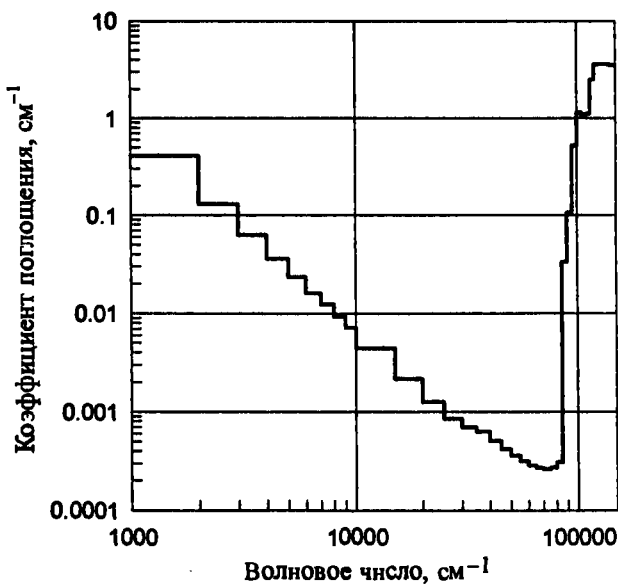
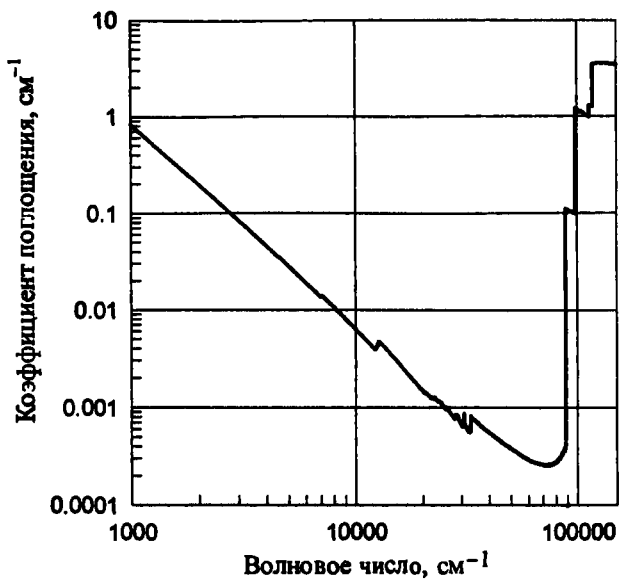


Рис. П.5.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 14000 \text{ К}$ и $p = 1 \text{ атм}$

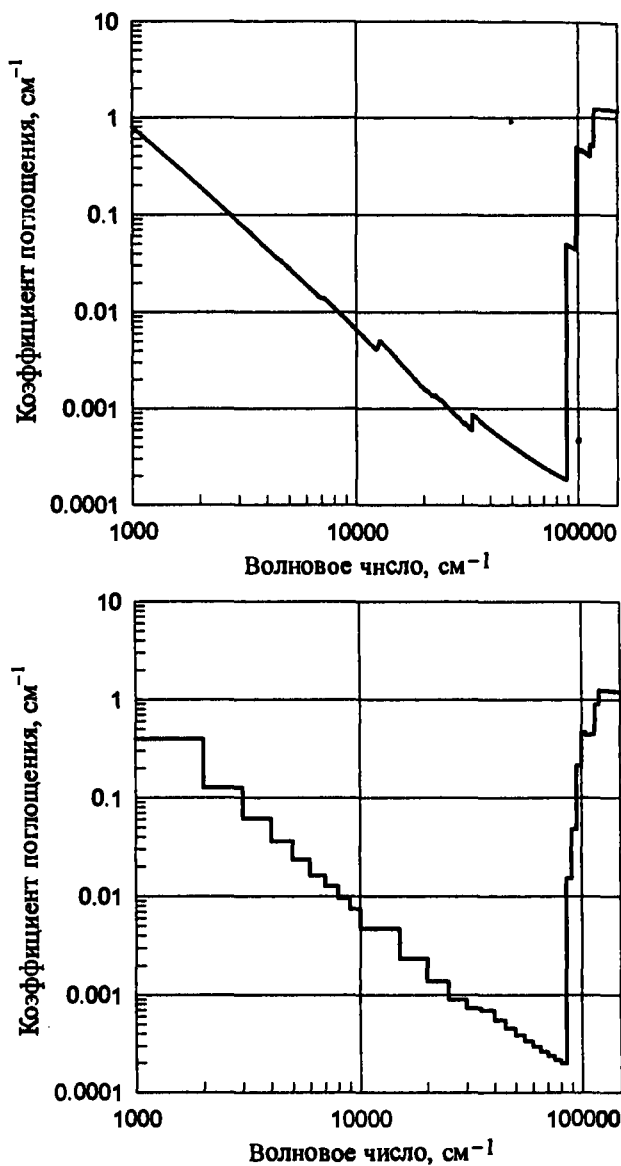


Рис. П.5.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

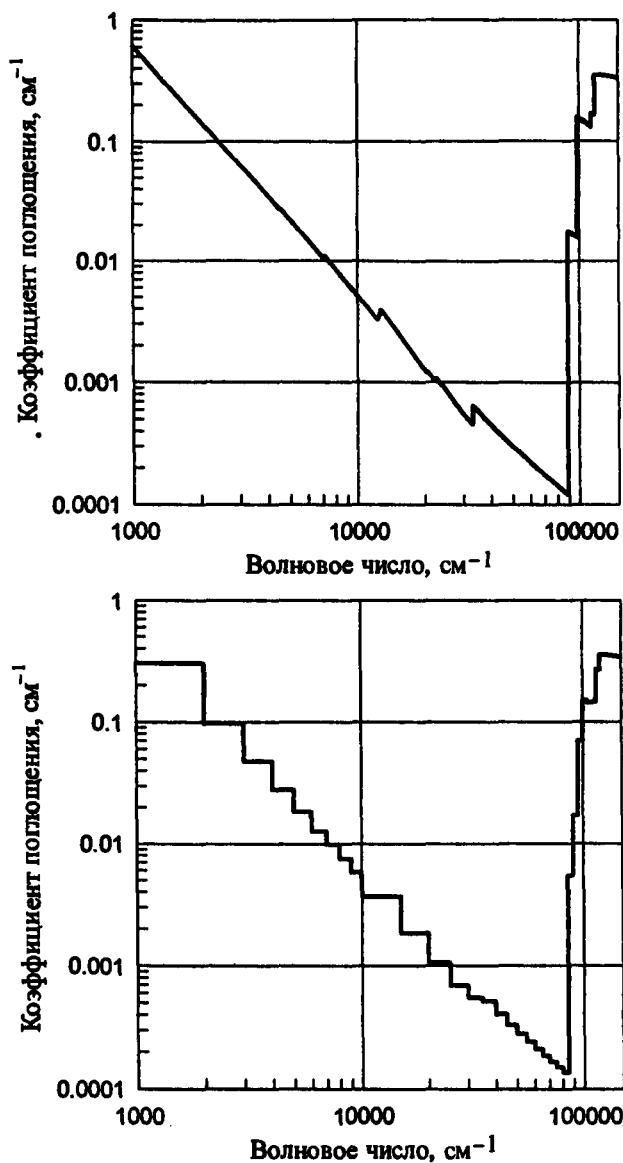


Рис. П.5.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 18000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

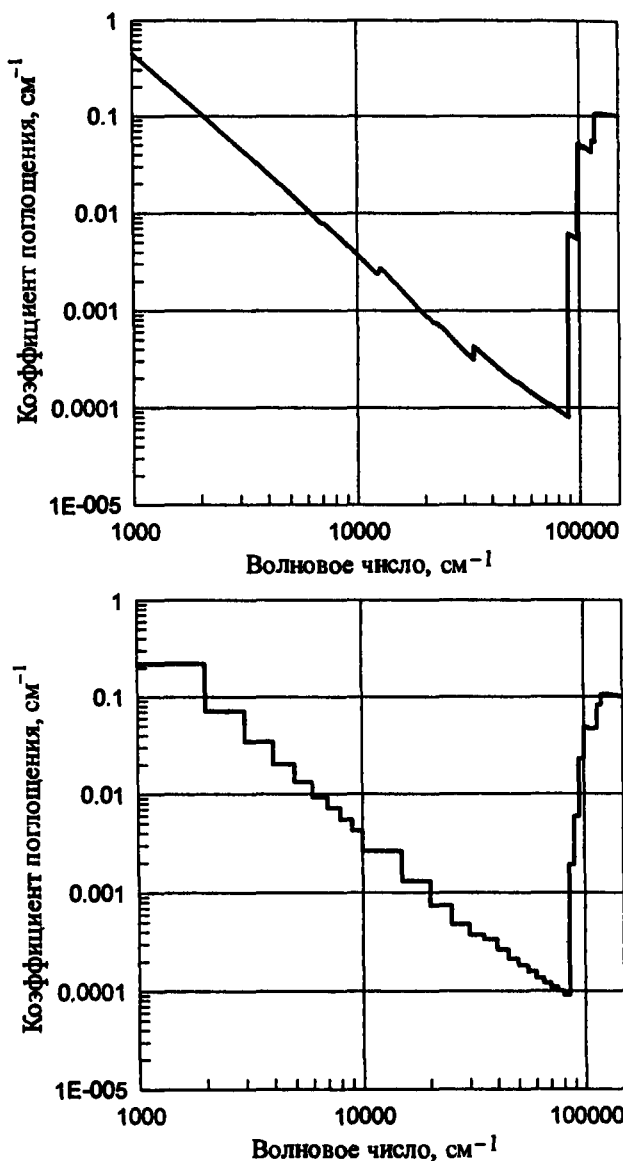


Рис. П.5.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (без учета атомных линий) при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

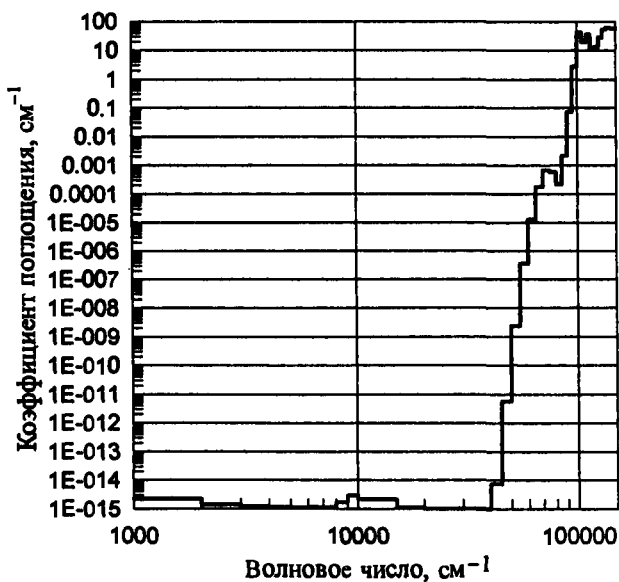
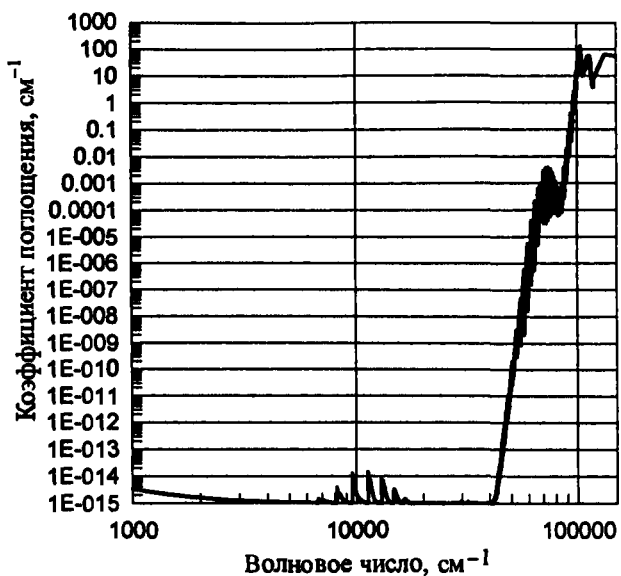


Рис. П.6.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 2000 \text{ К}$ и $p = 1 \text{ атм}$

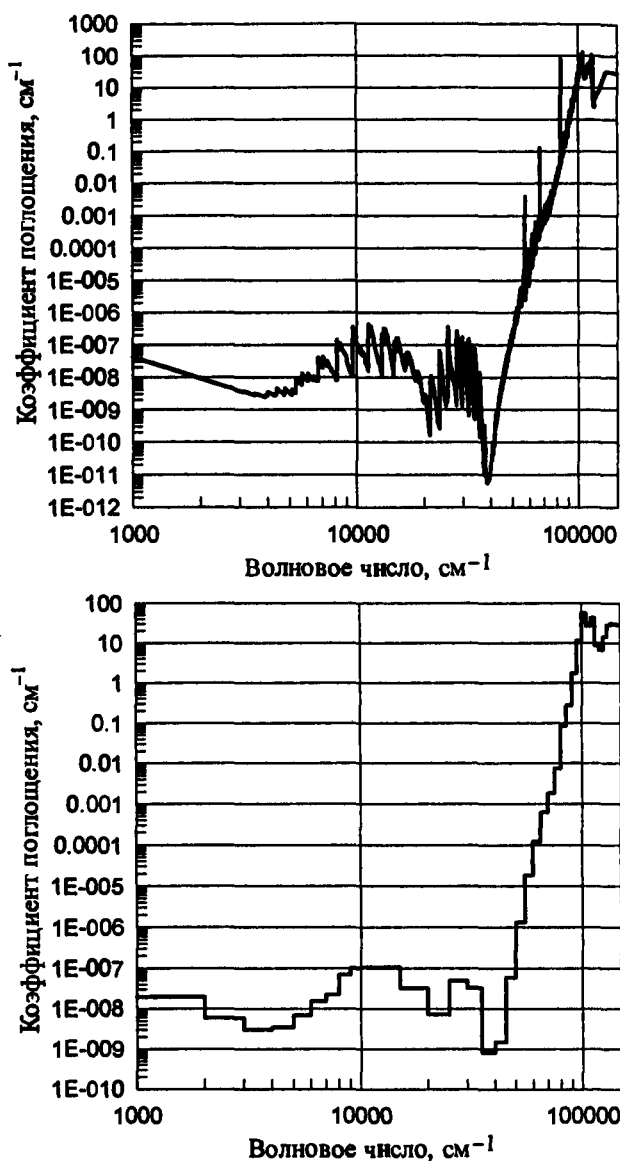


Рис. П.6.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

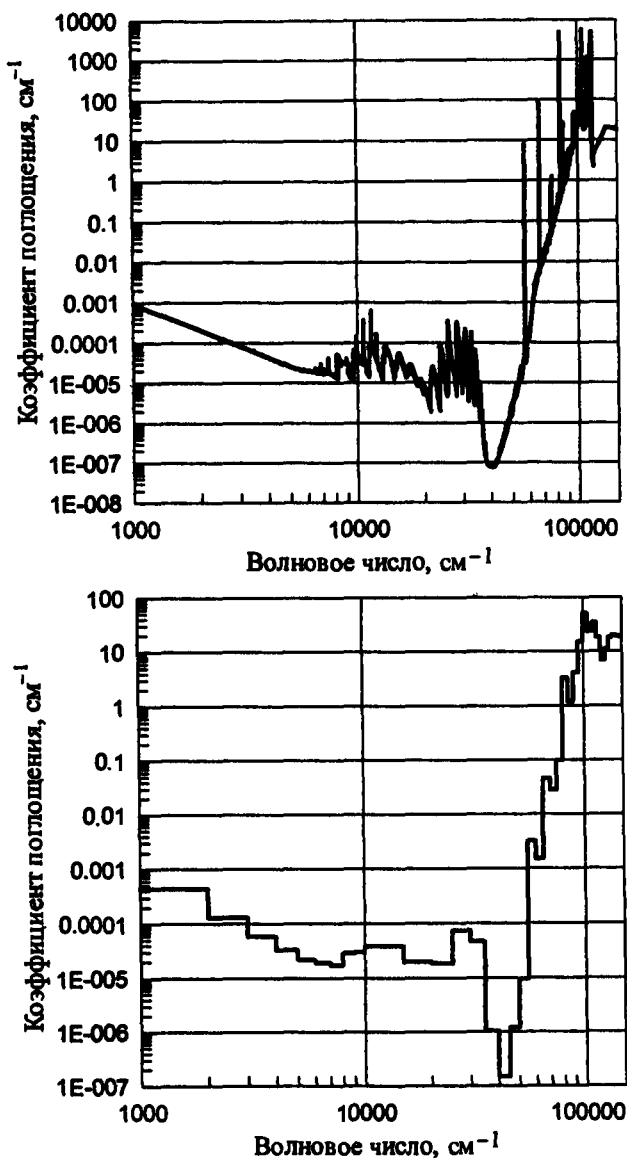


Рис. П.6.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 6000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

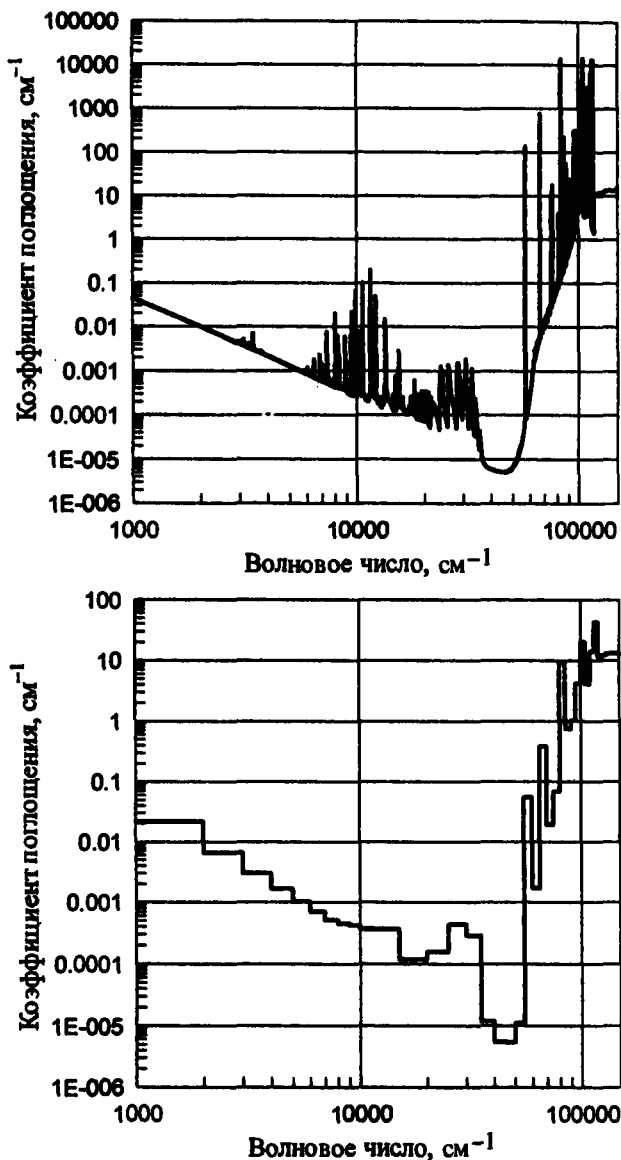


Рис. П.6.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

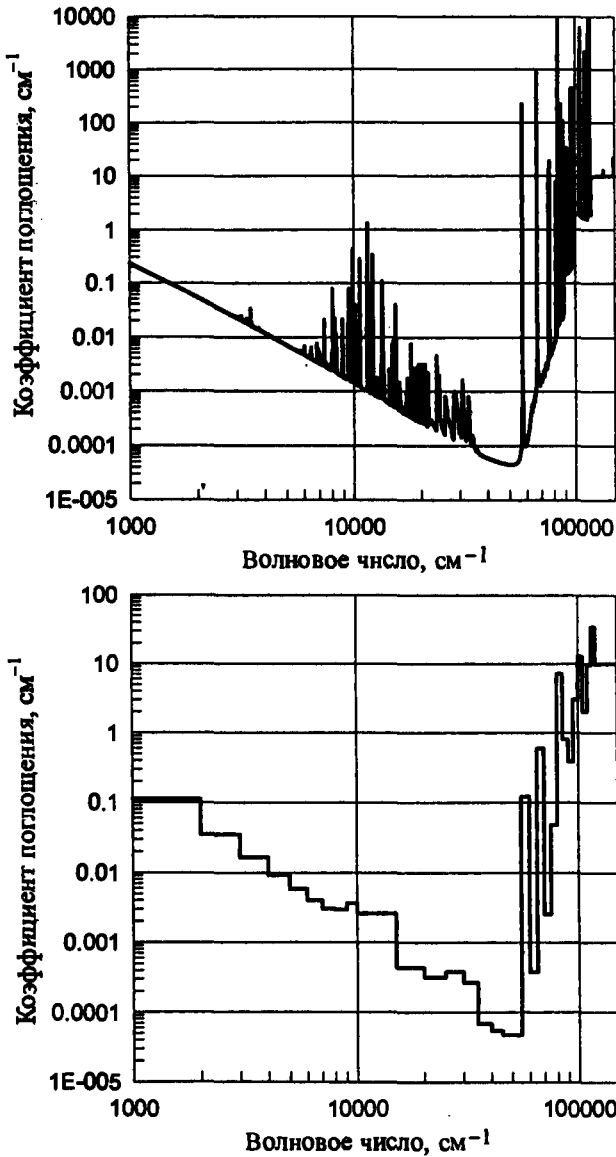


Рис. П.6.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

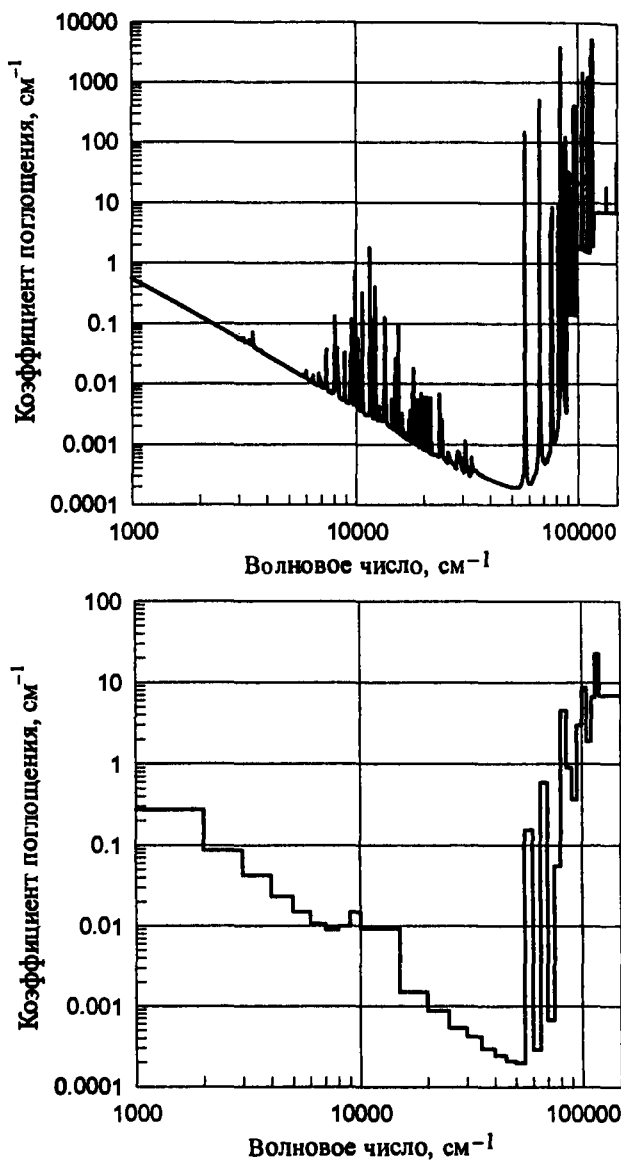


Рис. П.6.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

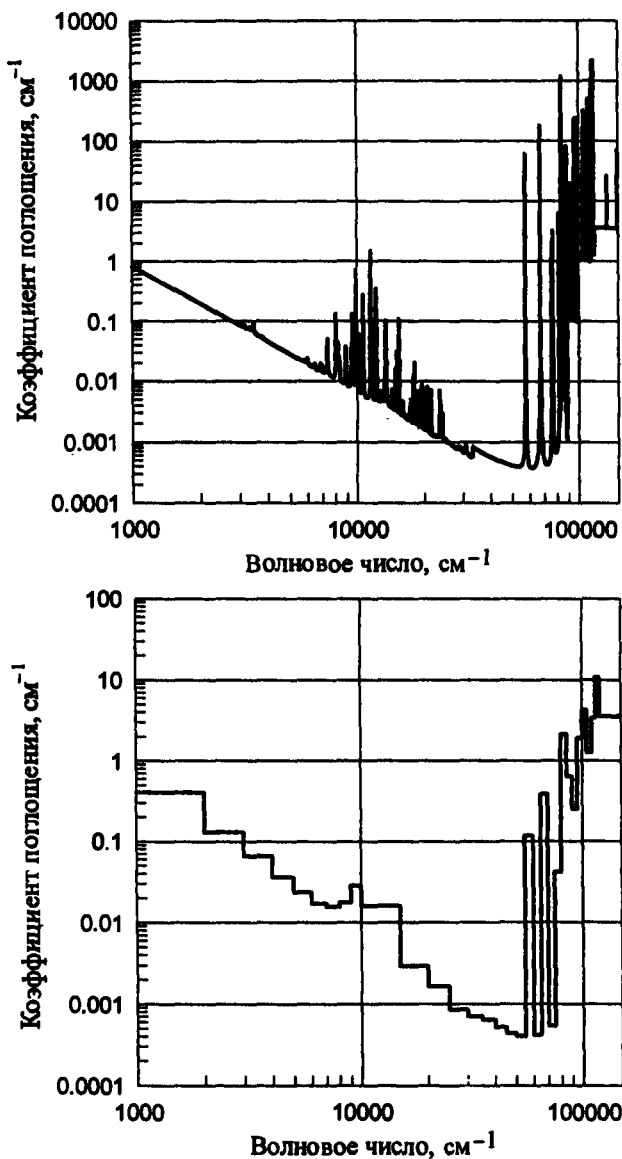


Рис. П.6.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 14000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

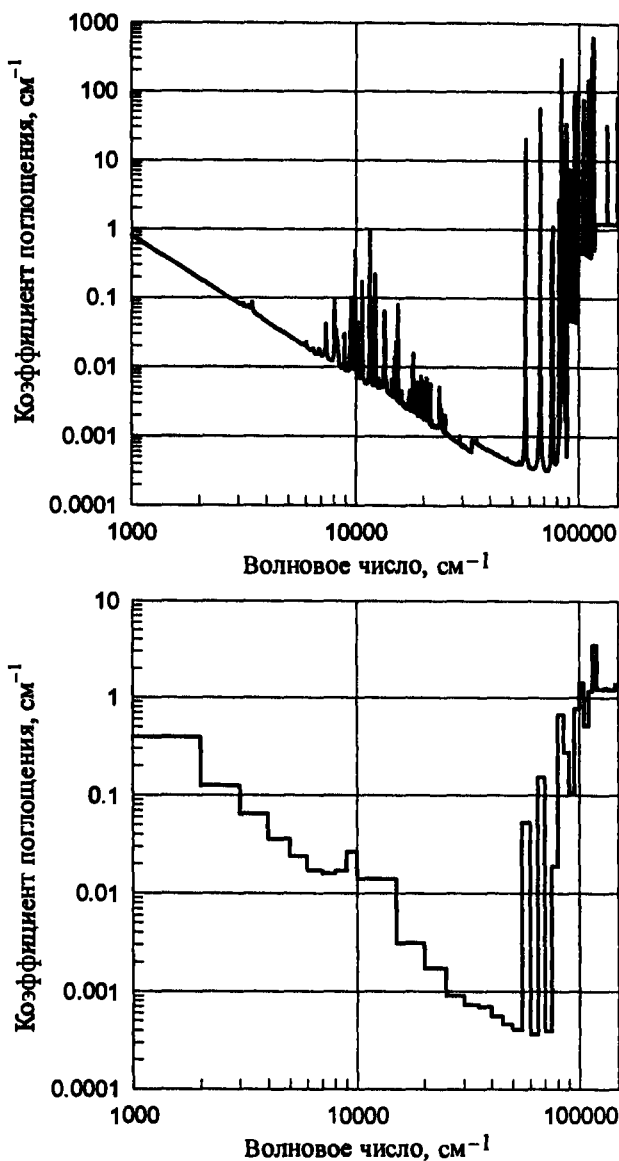


Рис. П.6.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

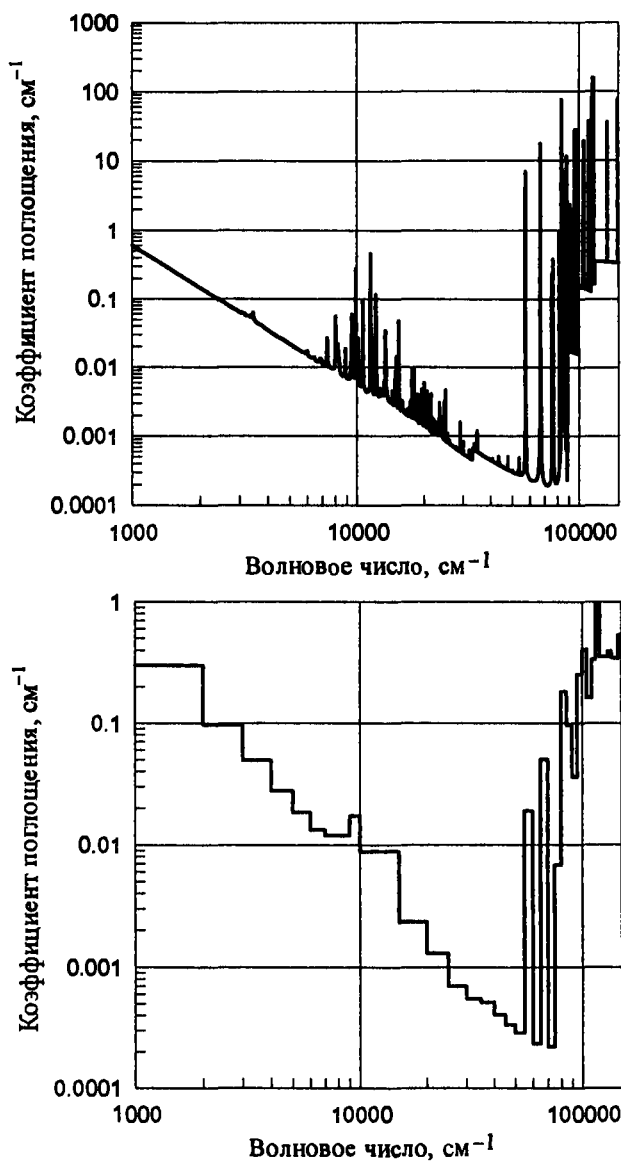


Рис. П.6.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 18000$ К и $p = 1$ атм

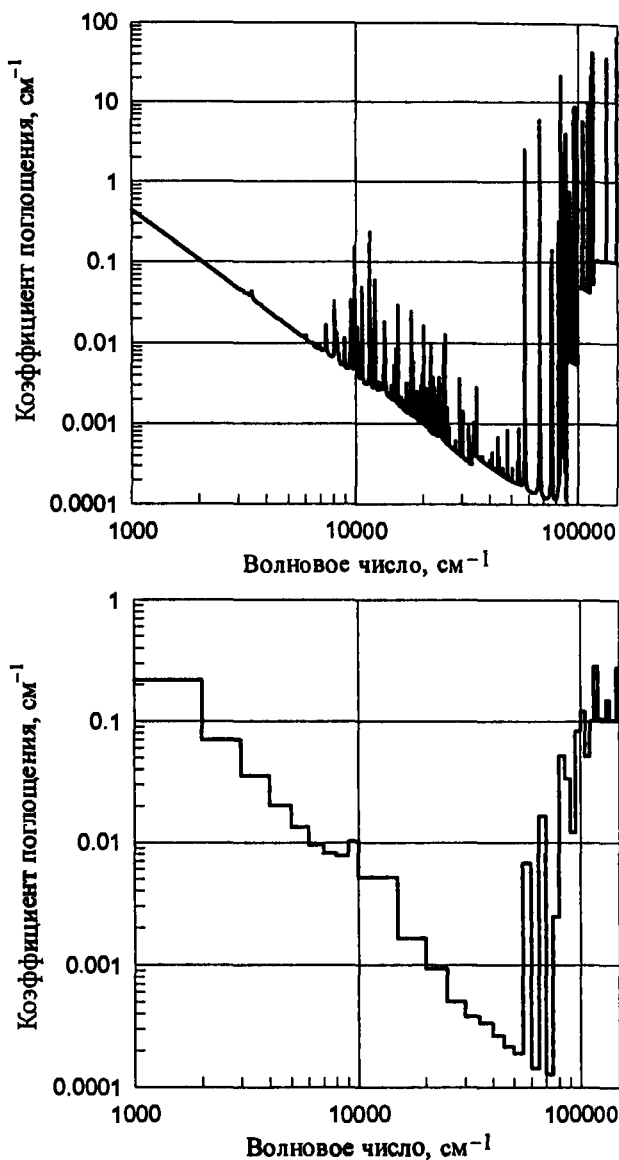


Рис. П.6.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения N_2 (с учетом атомных линий) при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

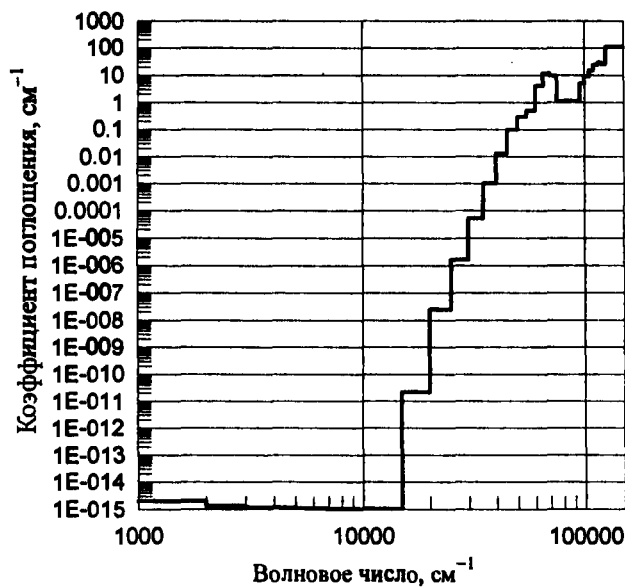
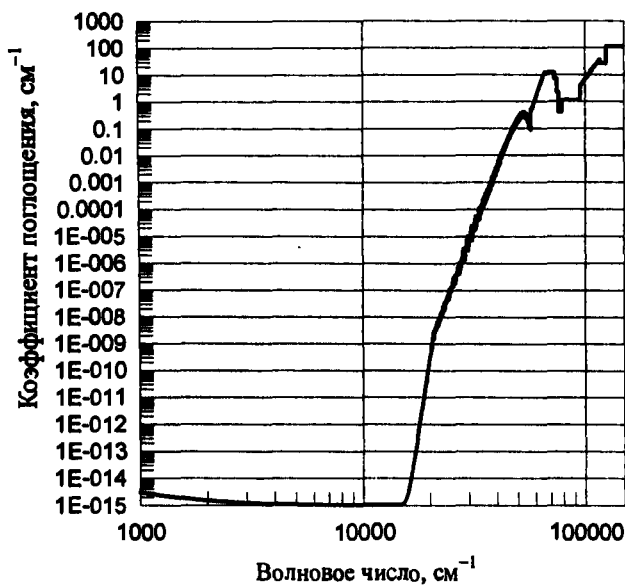


Рис. П.7.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 2000 \text{ К}$ и $p = 1 \text{ атм}$

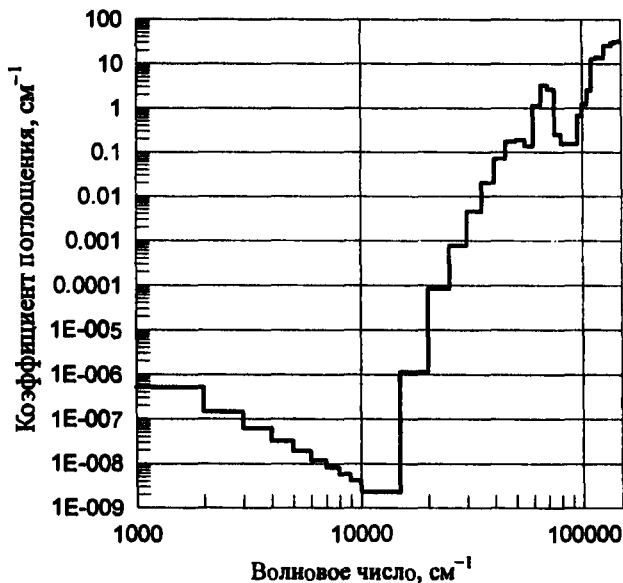
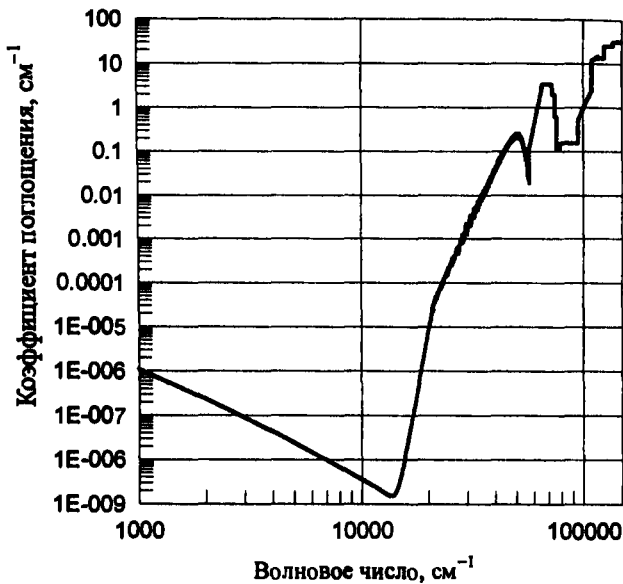


Рис. П.7.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

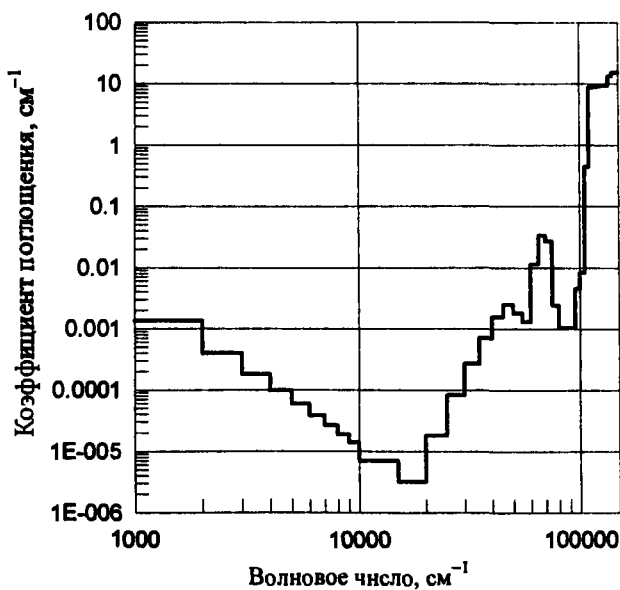
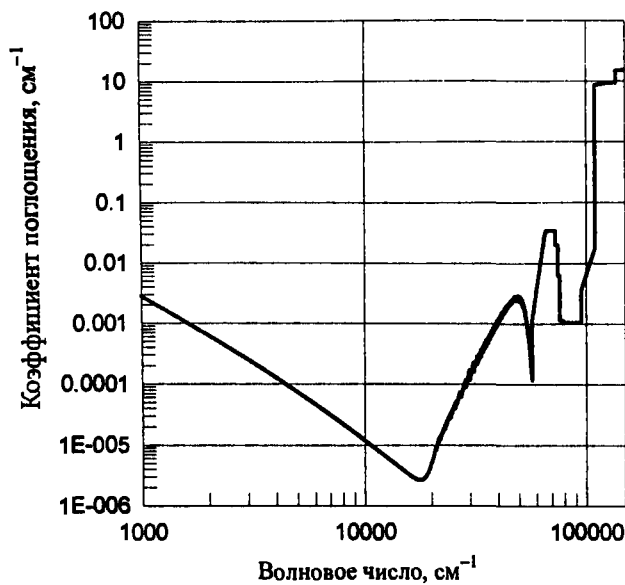


Рис. П.7.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 6000\text{ K}$ и $p = 1\text{ атм}$

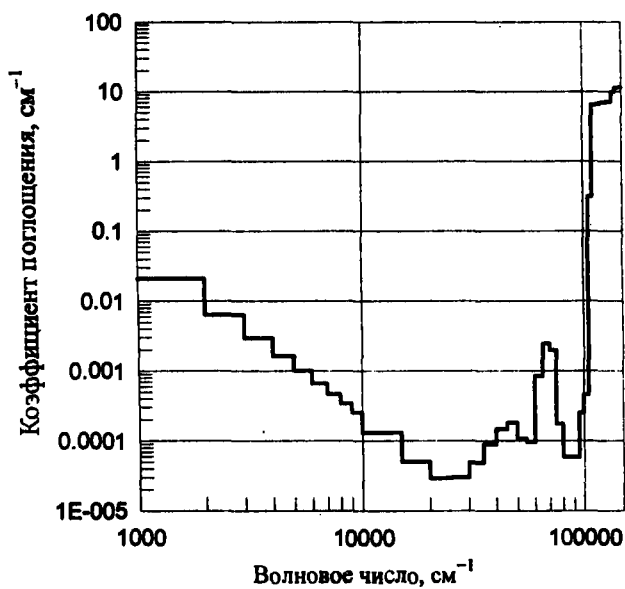
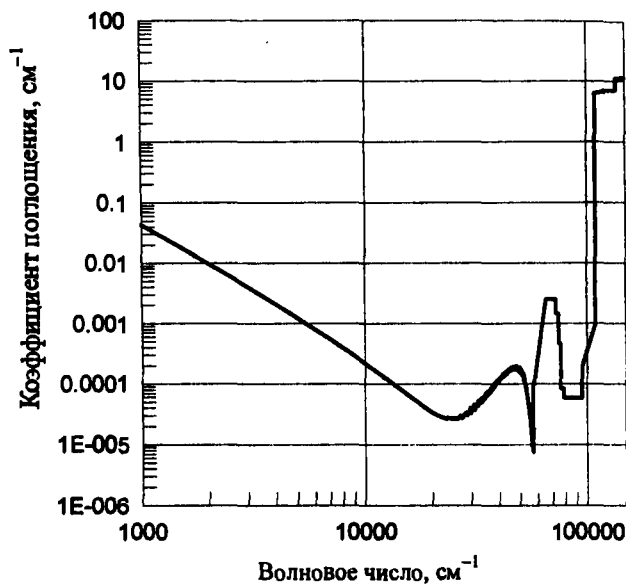


Рис. П.7.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

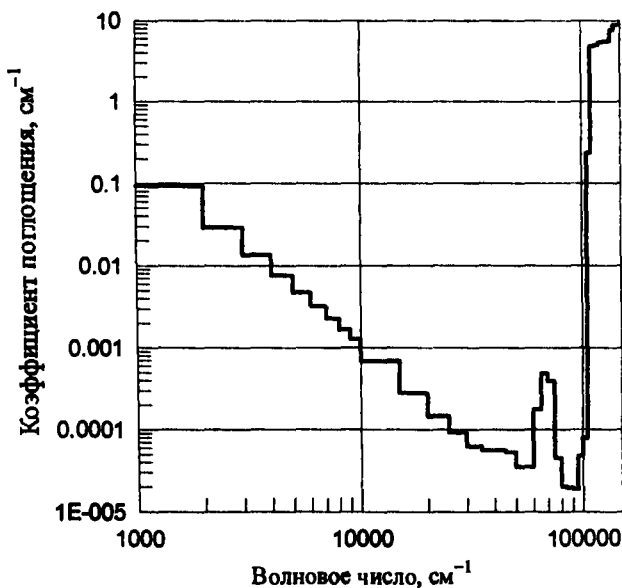
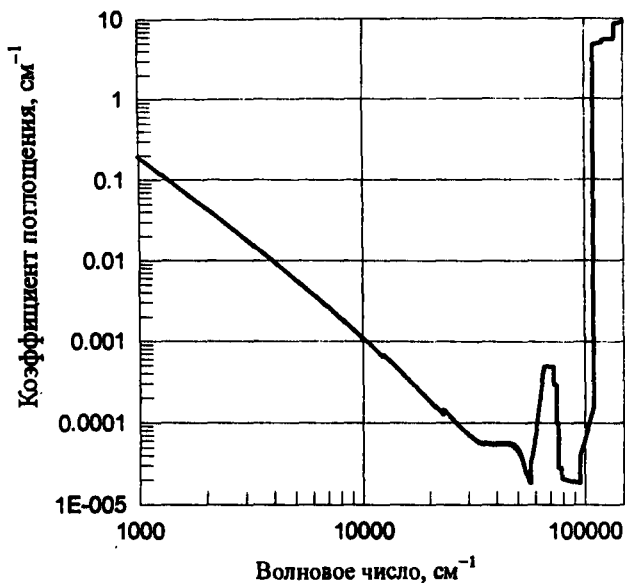


Рис. П.7.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

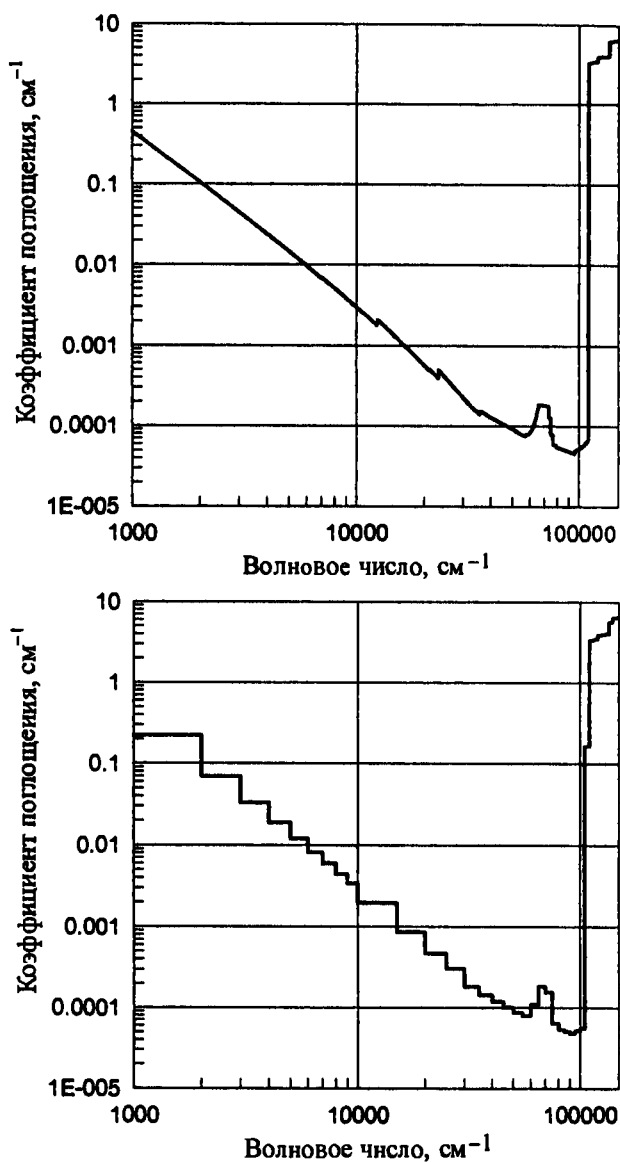


Рис. П.7.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

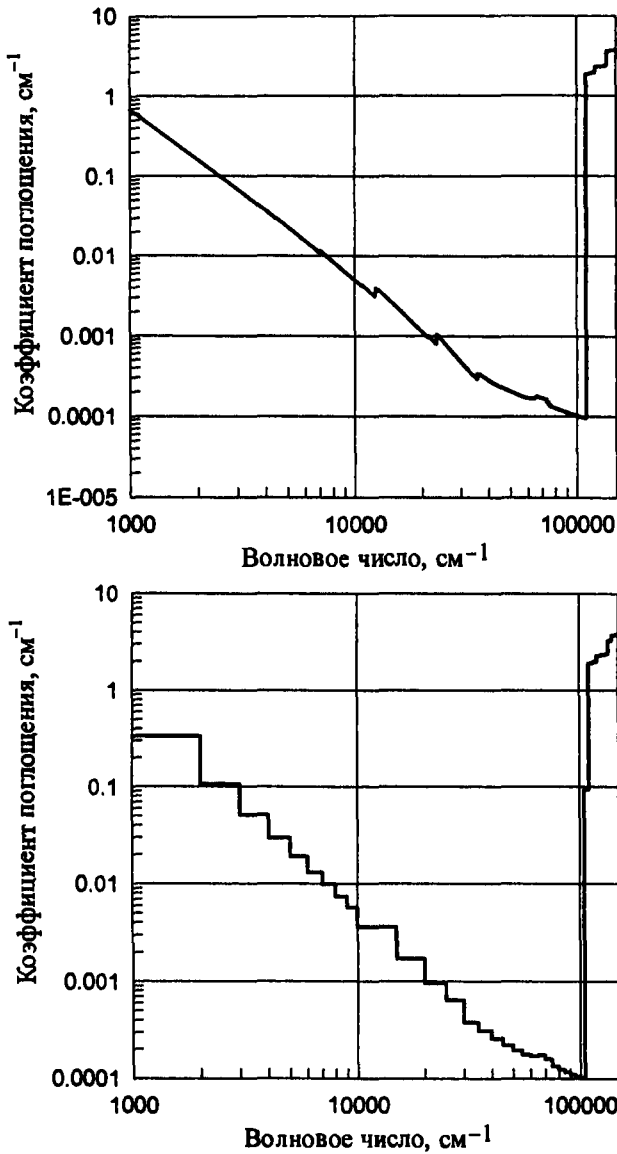


Рис. П.7.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 14000$ К и $p = 1$ атм

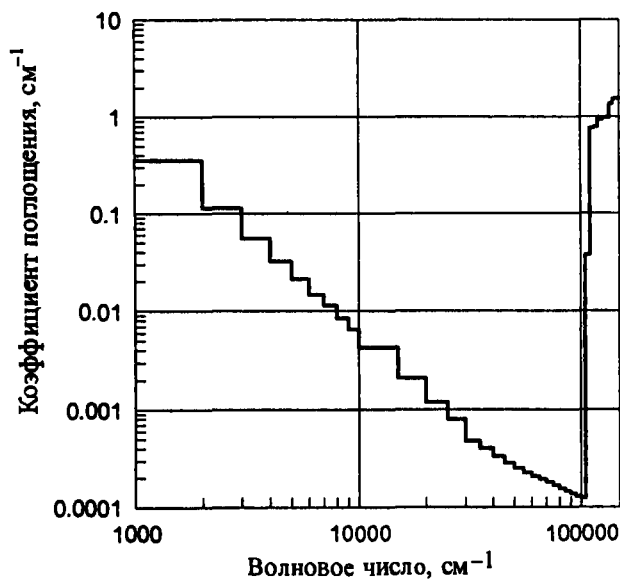
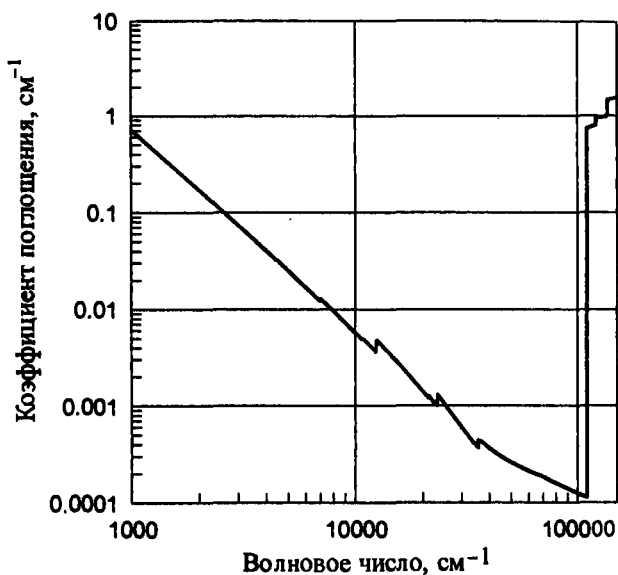


Рис. П.7.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

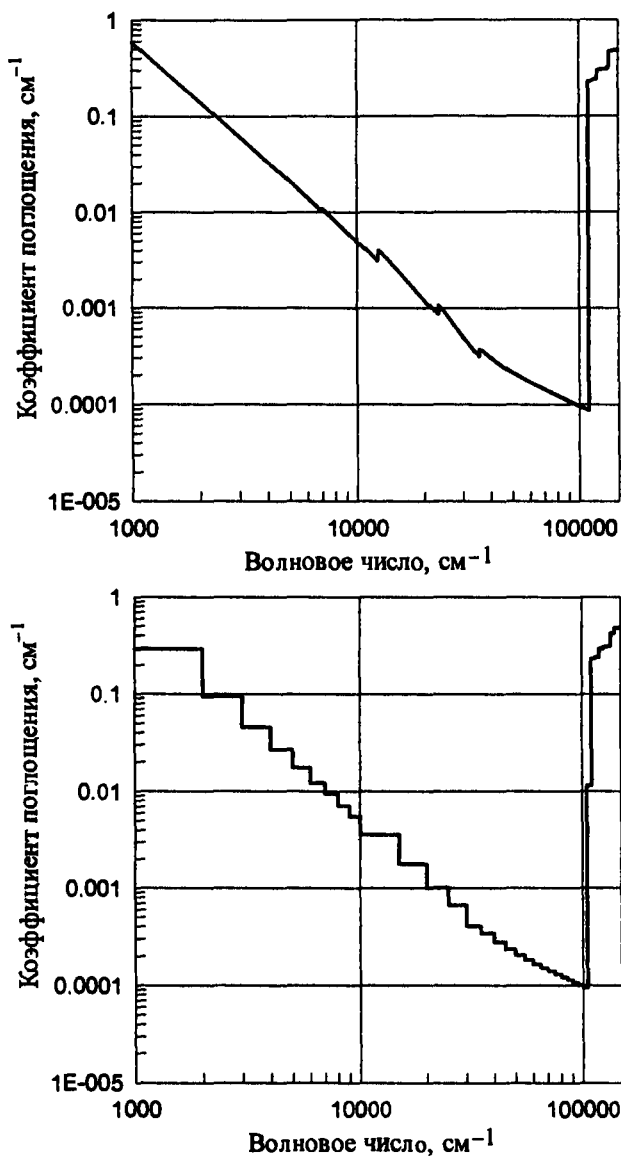


Рис. П.7.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 18000$ К и $p = 1$ атм

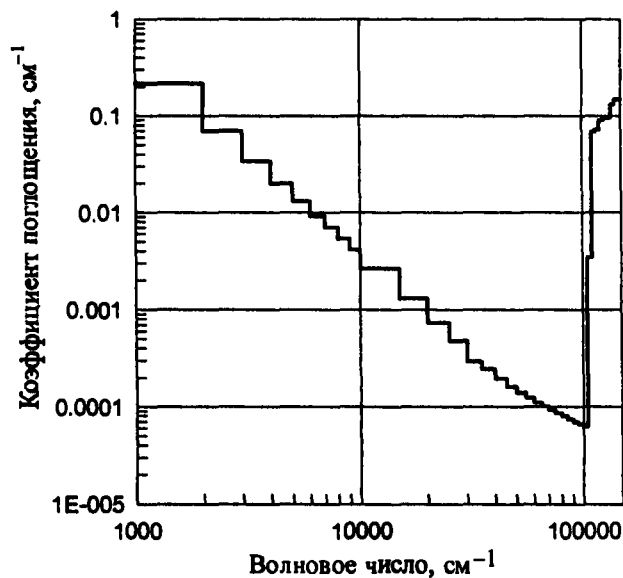
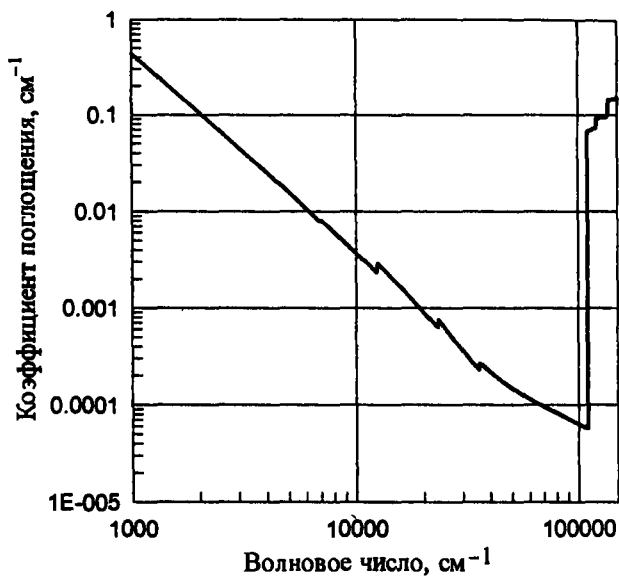


Рис. П.7.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (без учета атомных линий) при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

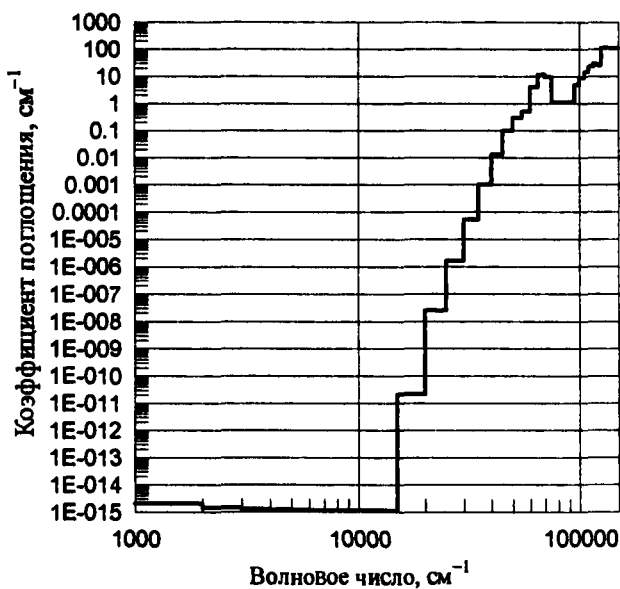
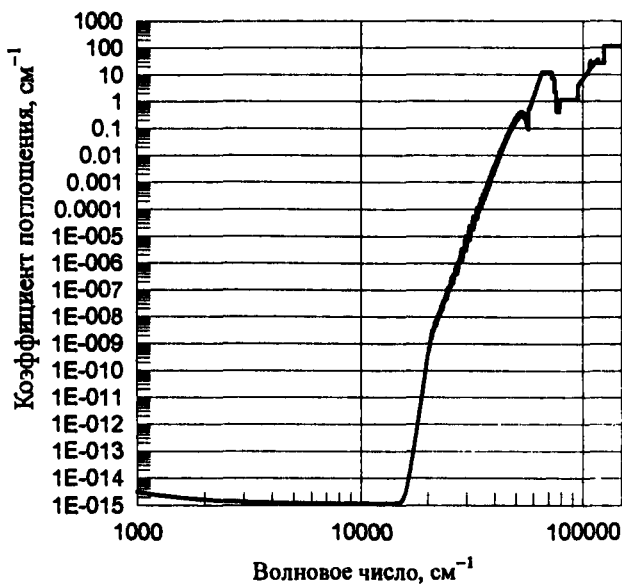


Рис. П.8.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 2000 \text{ К}$ и $p = 1 \text{ атм}$

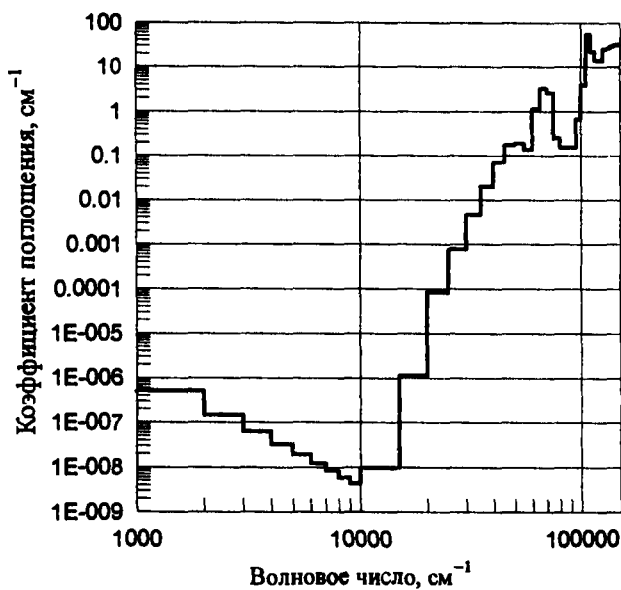
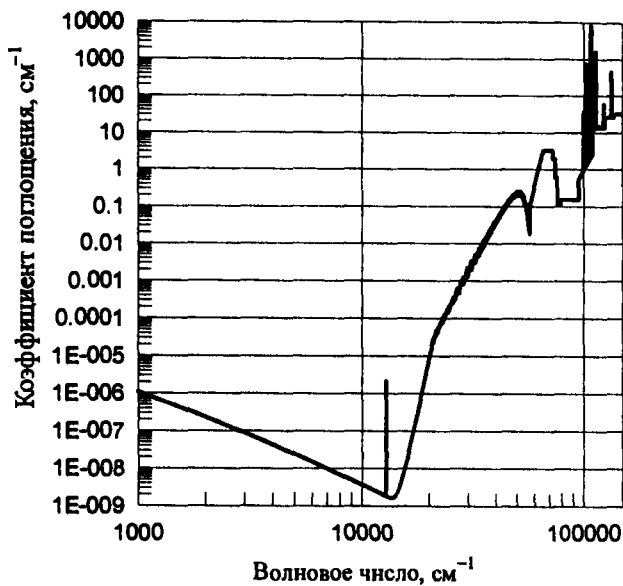


Рис. П.8.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

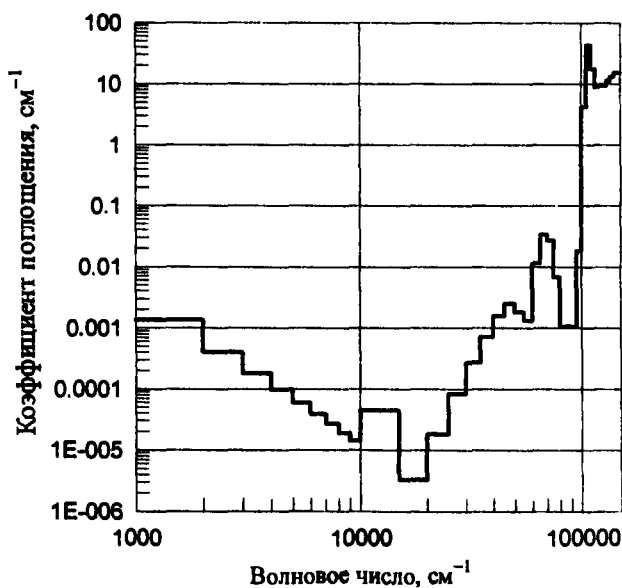
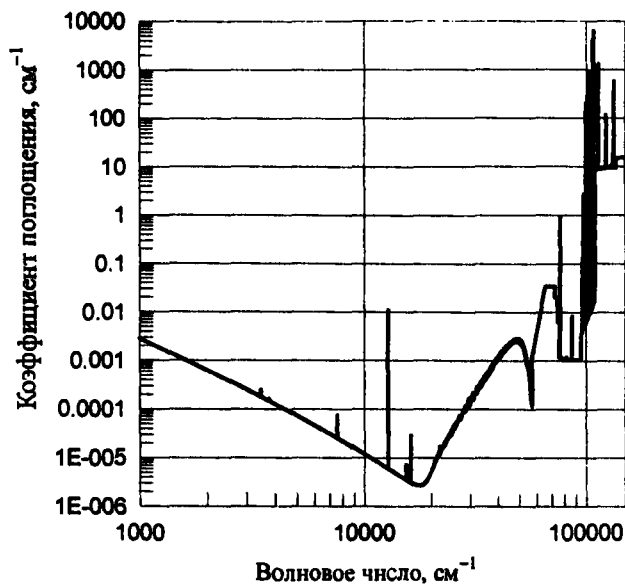


Рис. П.8.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 6000\text{ K}$ и $p = 1\text{ атм}$

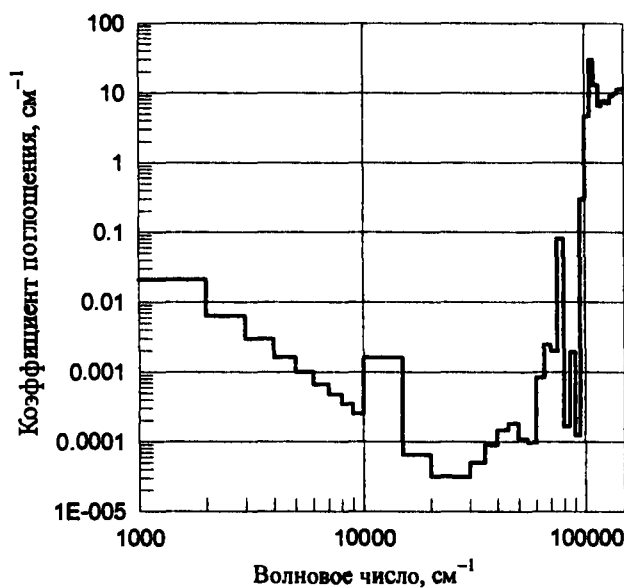
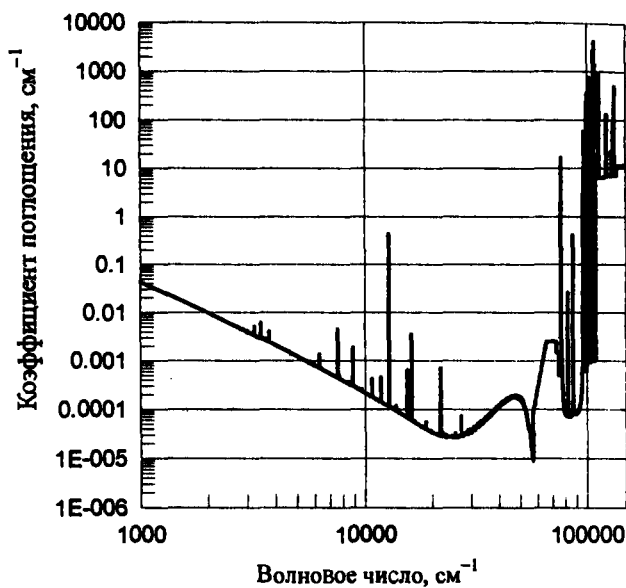


Рис. П.8.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

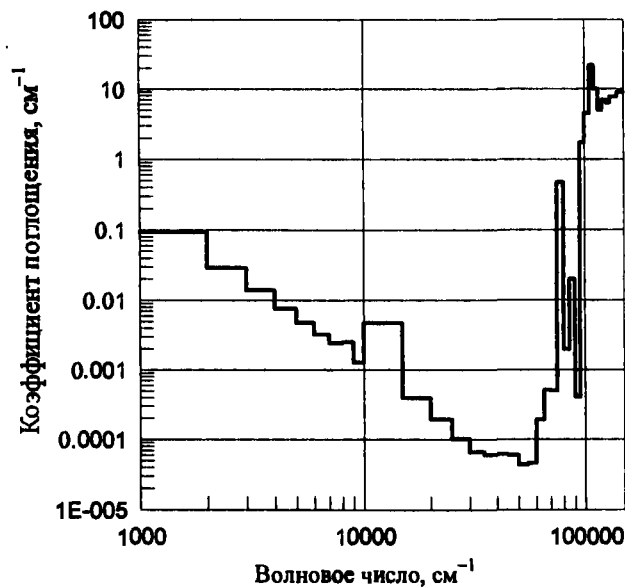
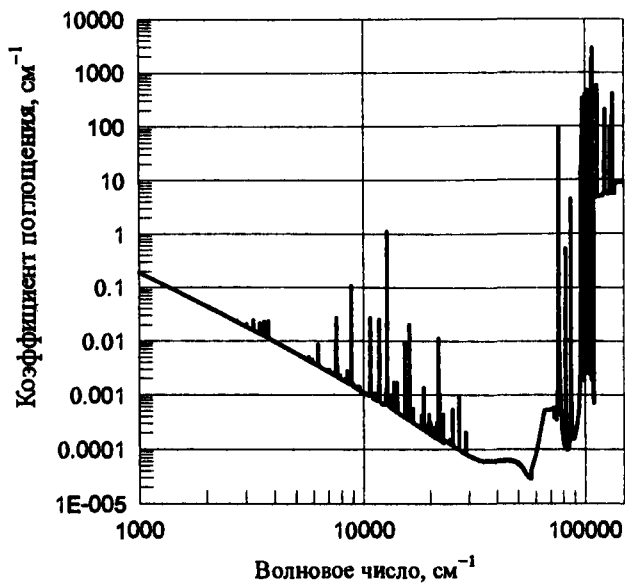


Рис. П.8.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 10000\text{ K}$ и $p = 1\text{ атм}$

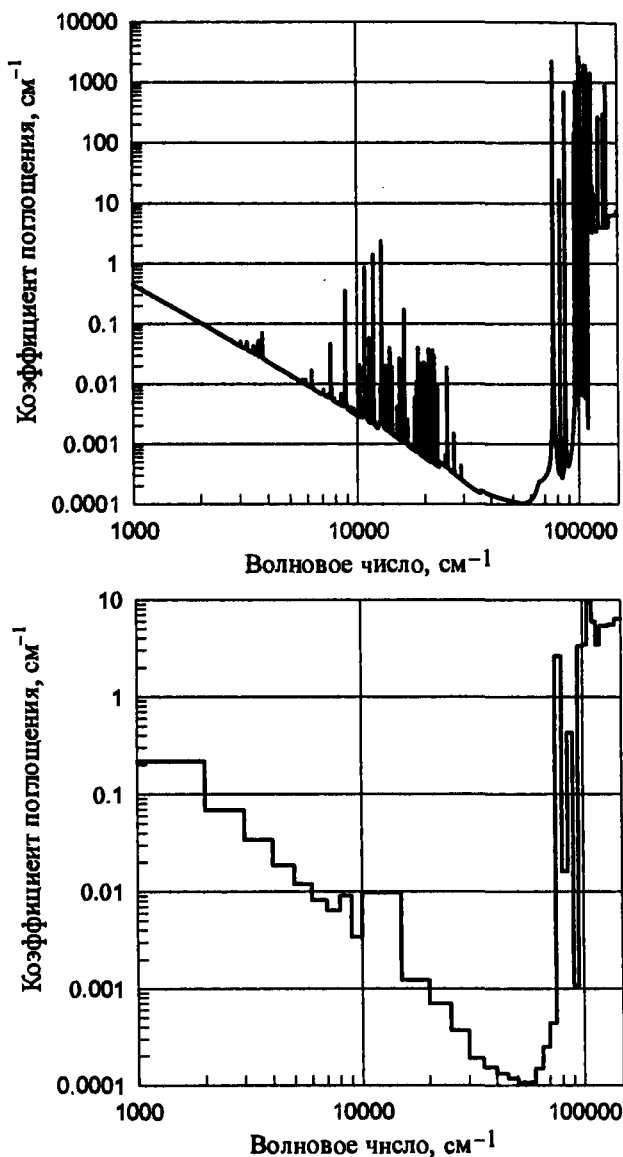


Рис. П.8.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

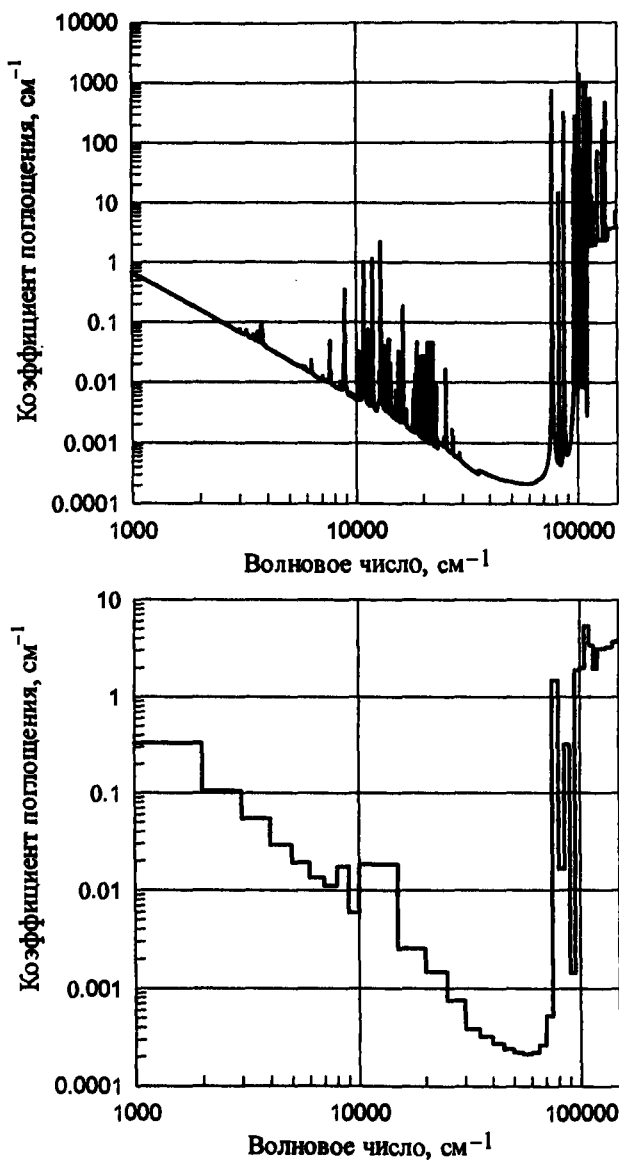


Рис. П.8.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 14000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

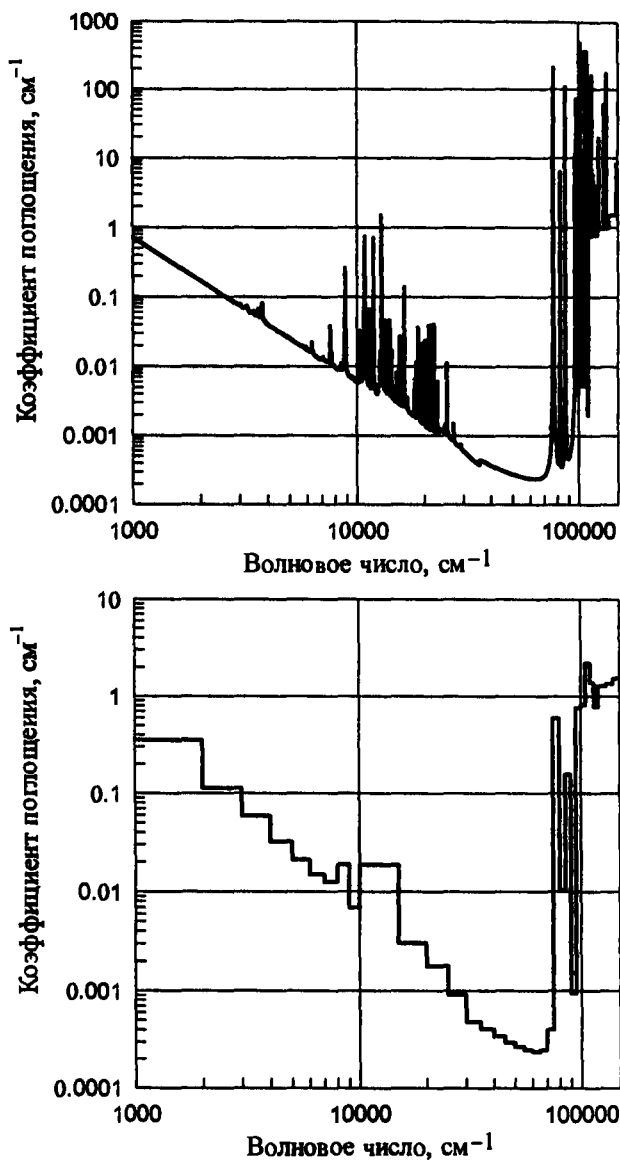


Рис. П.8.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

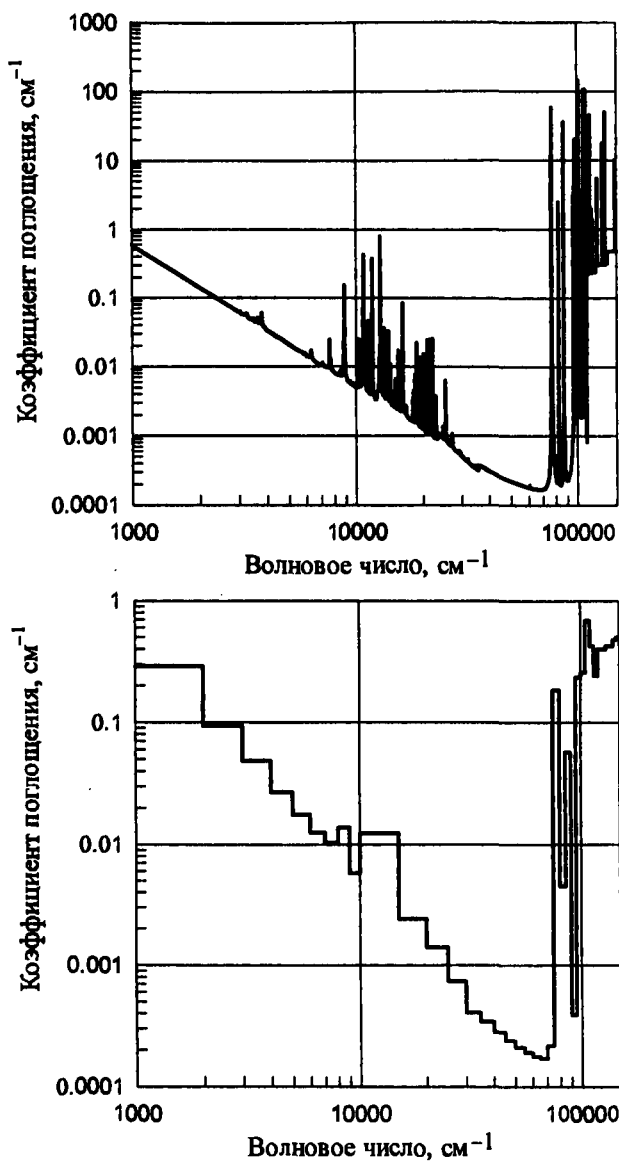


Рис. П.8.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 18000$ К и $p = 1$ атм

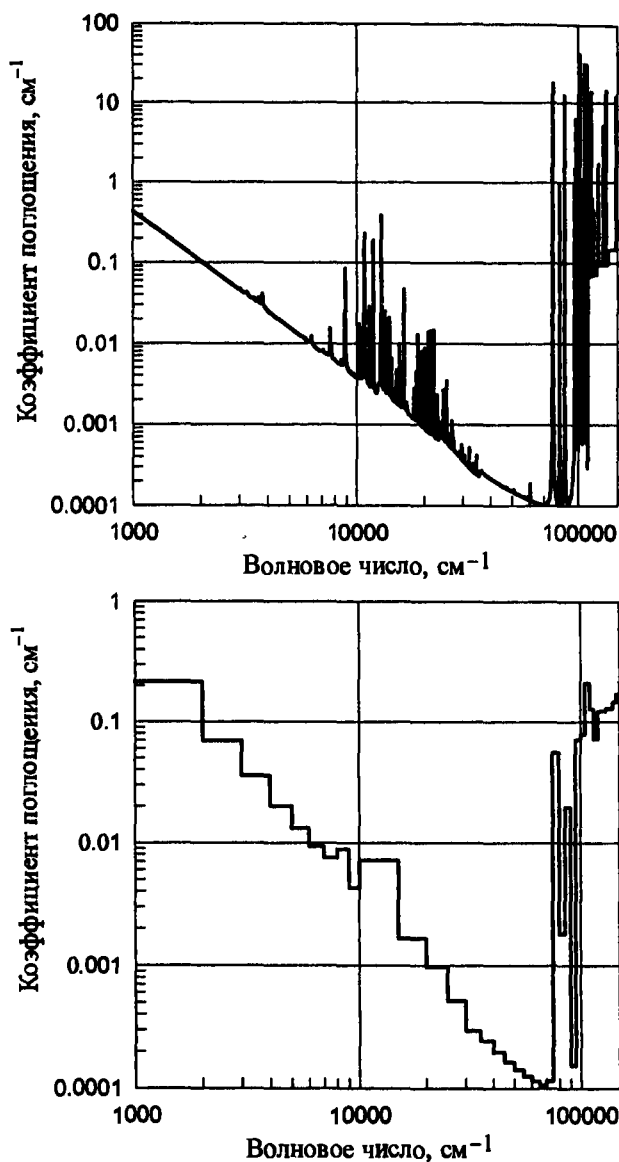


Рис. П.8.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения O_2 (с учетом атомных линий) при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

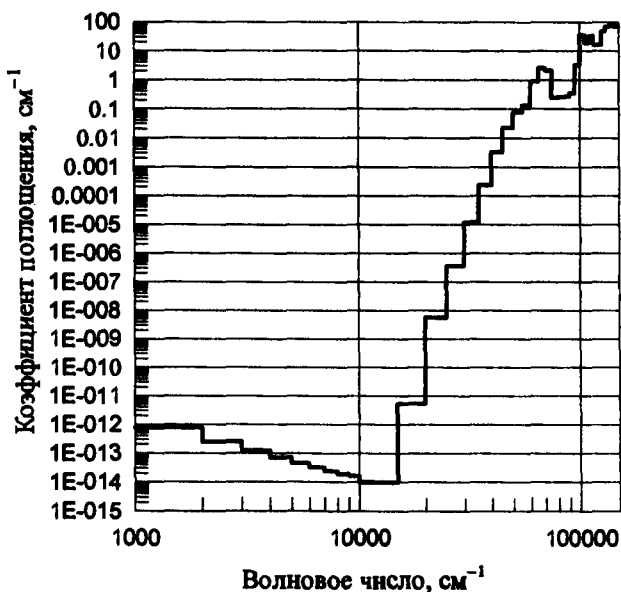
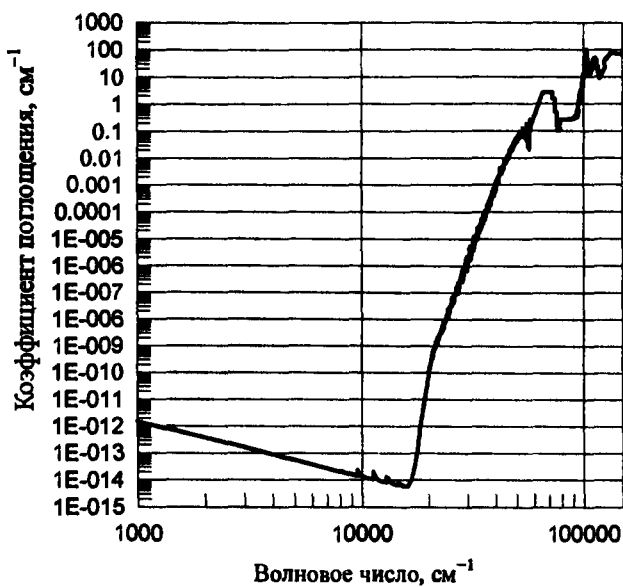


Рис. П.9.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 2000\text{ K}$ и $p = 1\text{ атм}$

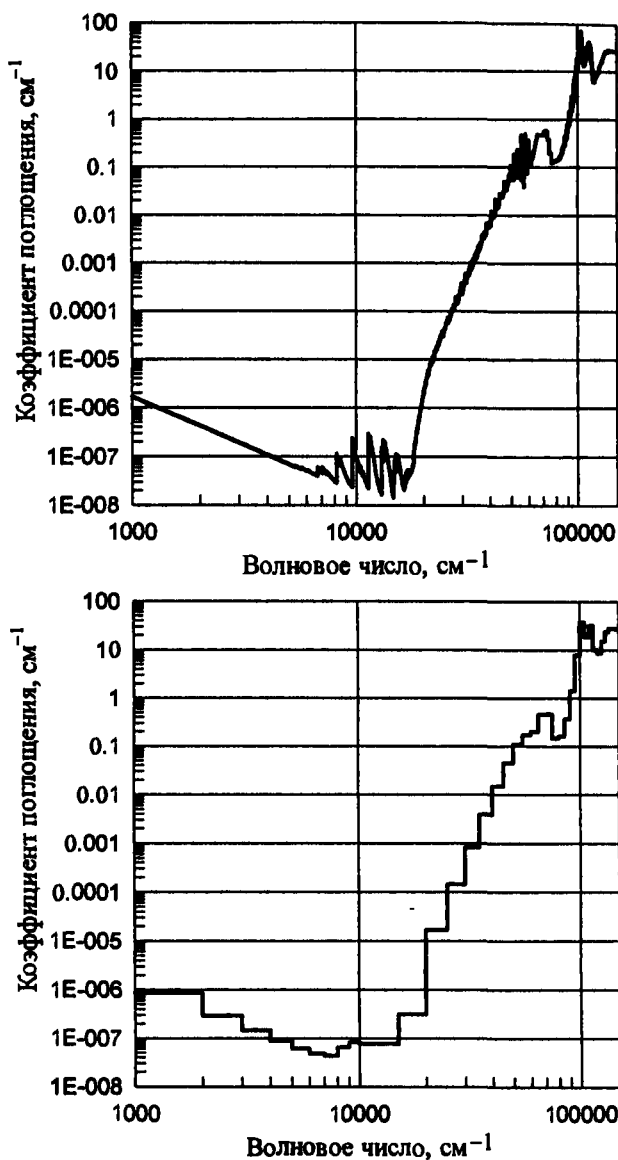


Рис. П.9.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

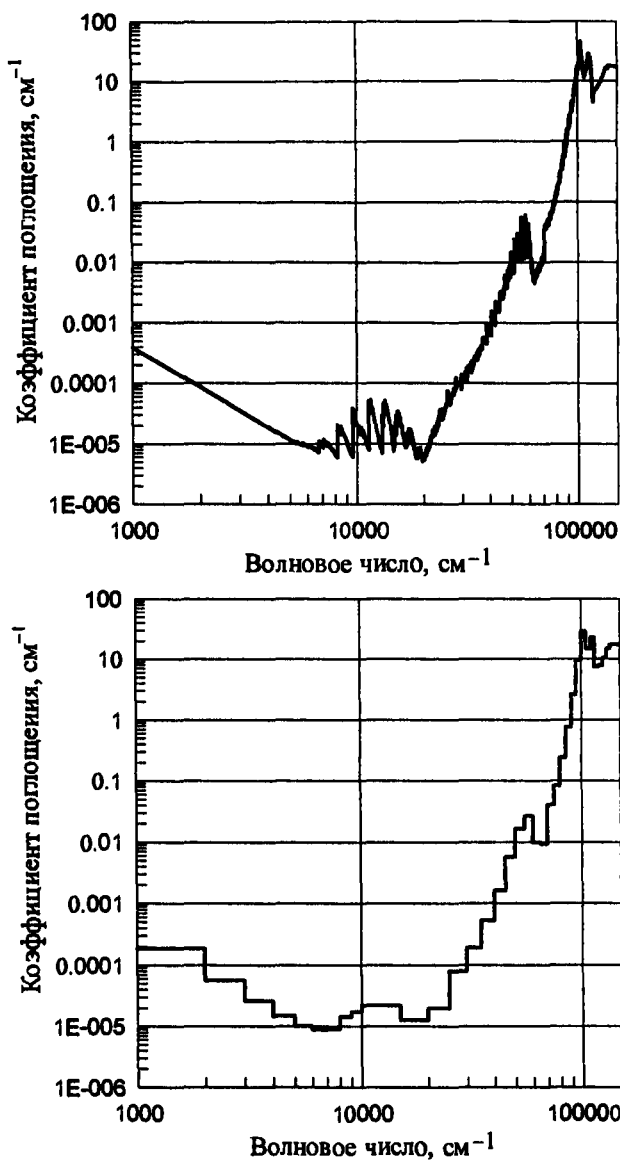


Рис. П.9.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 6000$ К и $p = 1$ атм

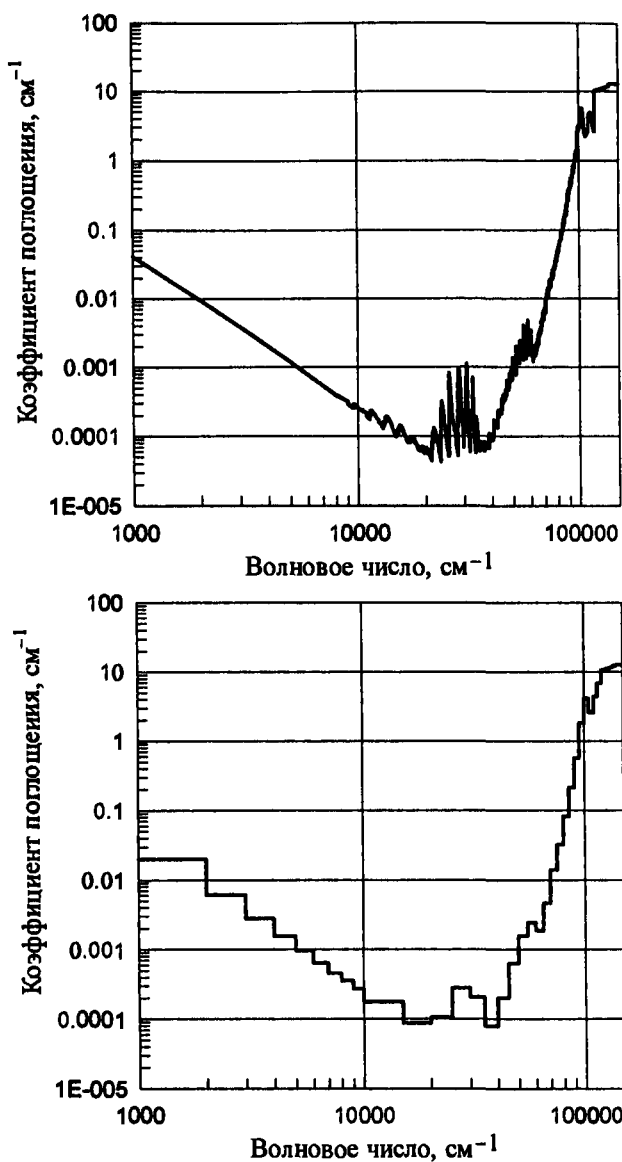


Рис. П.9.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

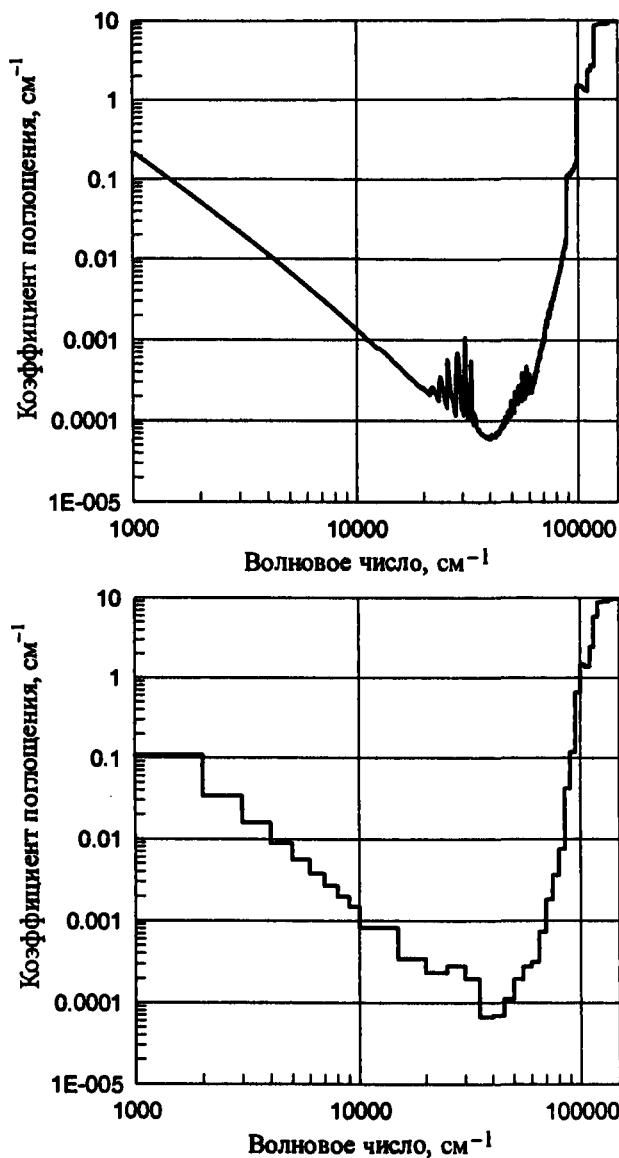


Рис. П.9.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

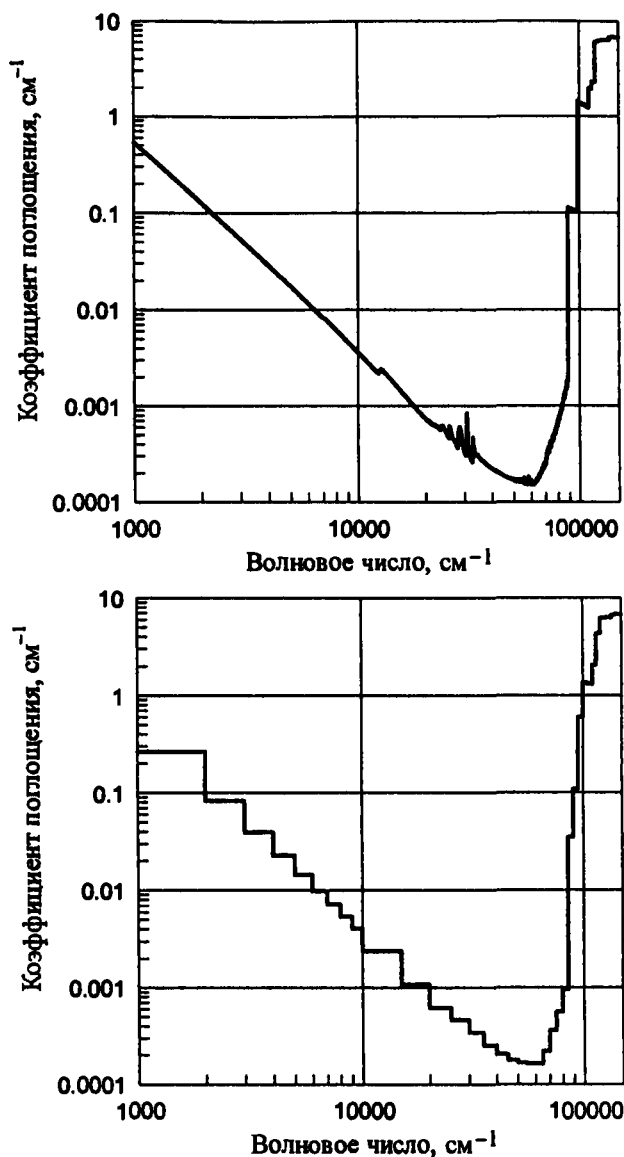


Рис. П.9.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

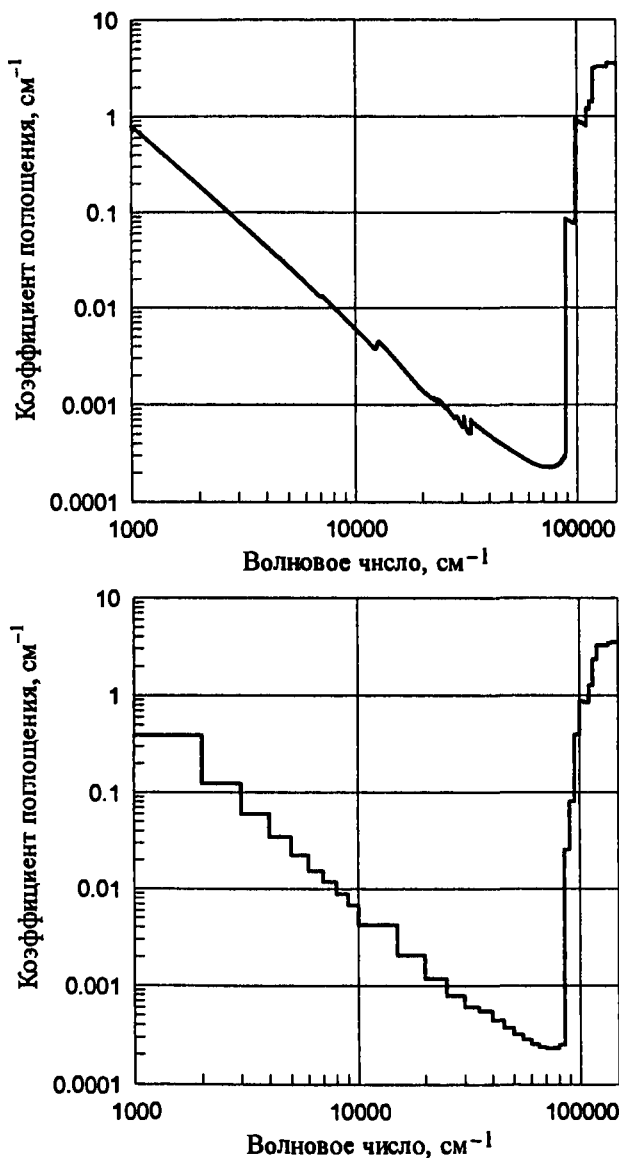


Рис. П.9.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 14000$ К и $p = 1$ атм

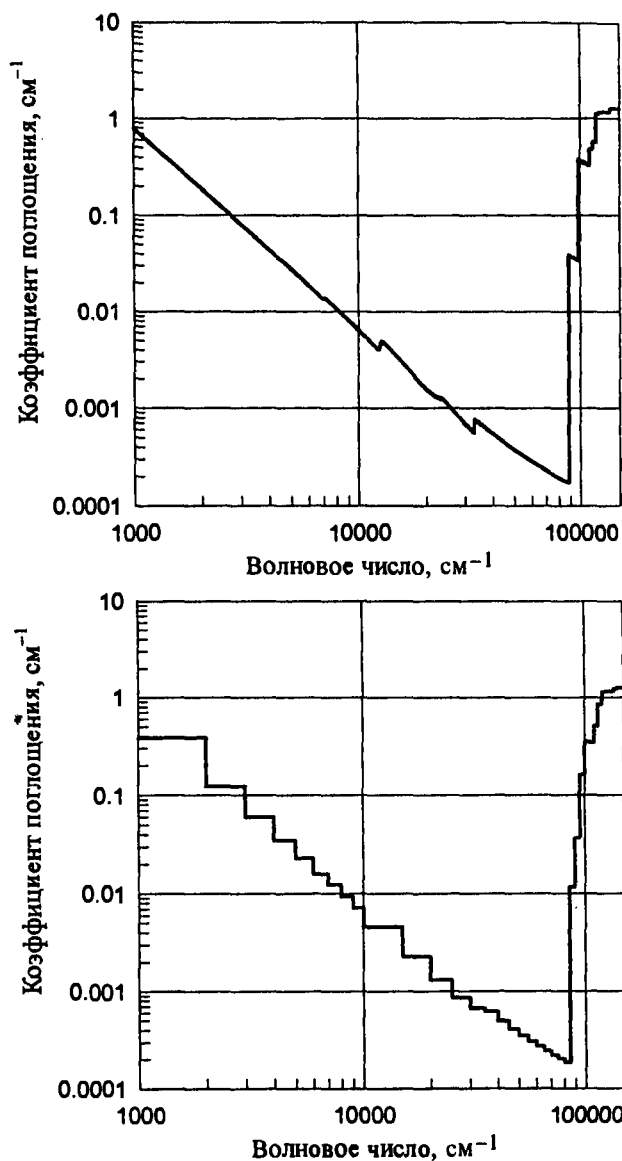


Рис. П.9.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

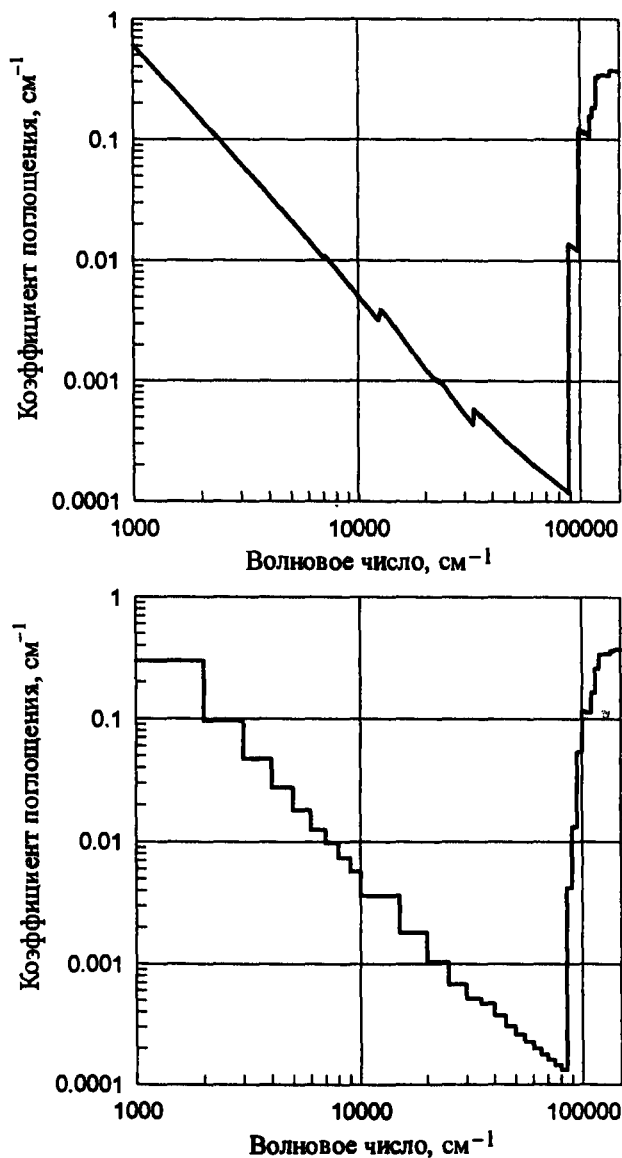


Рис. П.9.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 18000$ К и $p = 1$ атм

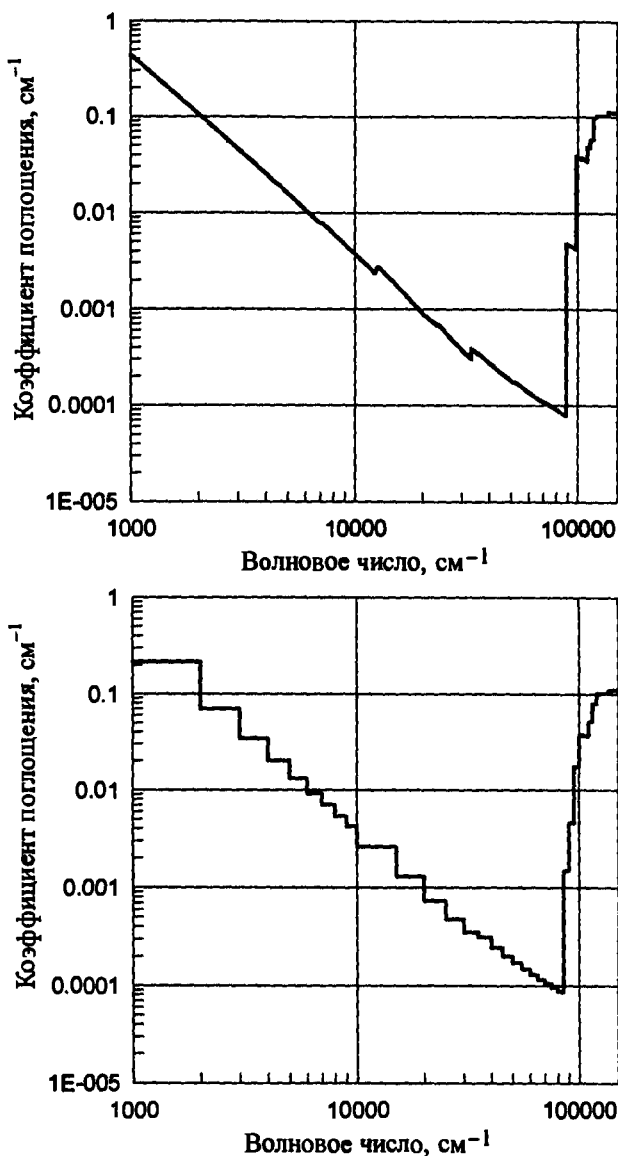


Рис. П.9.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха (без учета атомных линий) при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

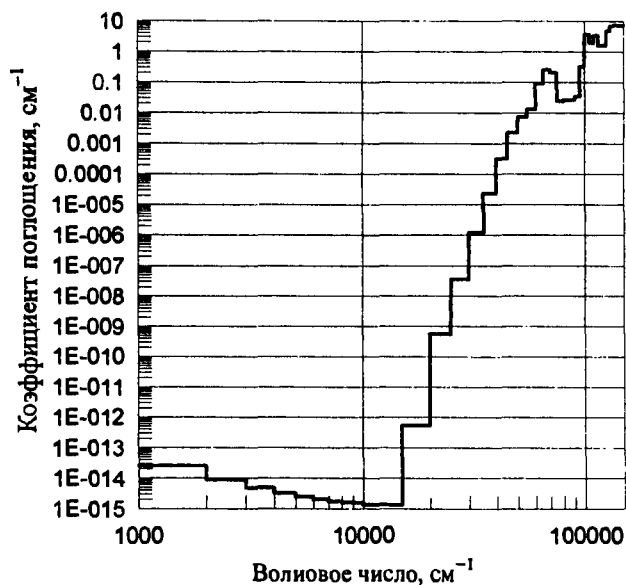
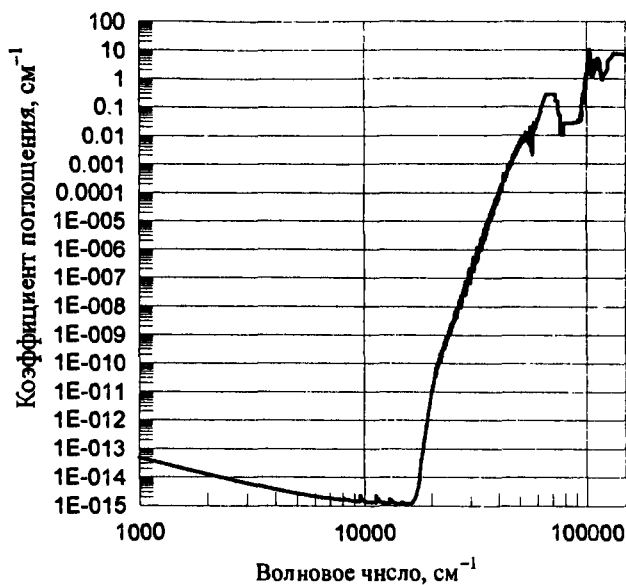


Рис. П.10.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 2000 \text{ К}$ и $p = 0.1 \text{ атм}$

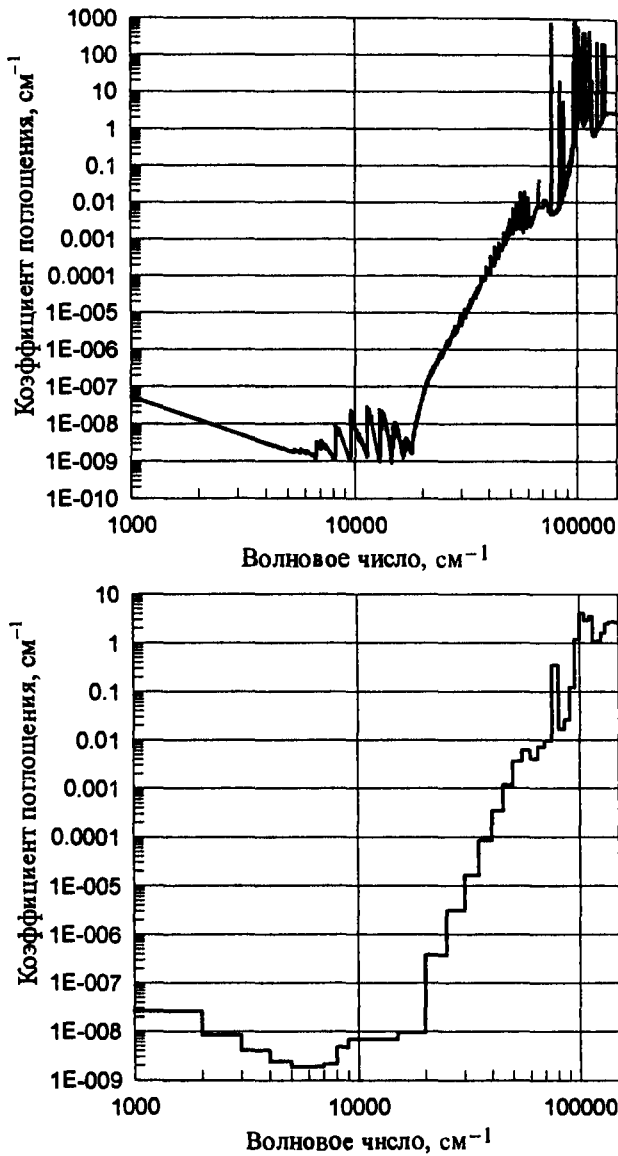


Рис. П.10.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 4000$ К и $p = 0.1$ атм

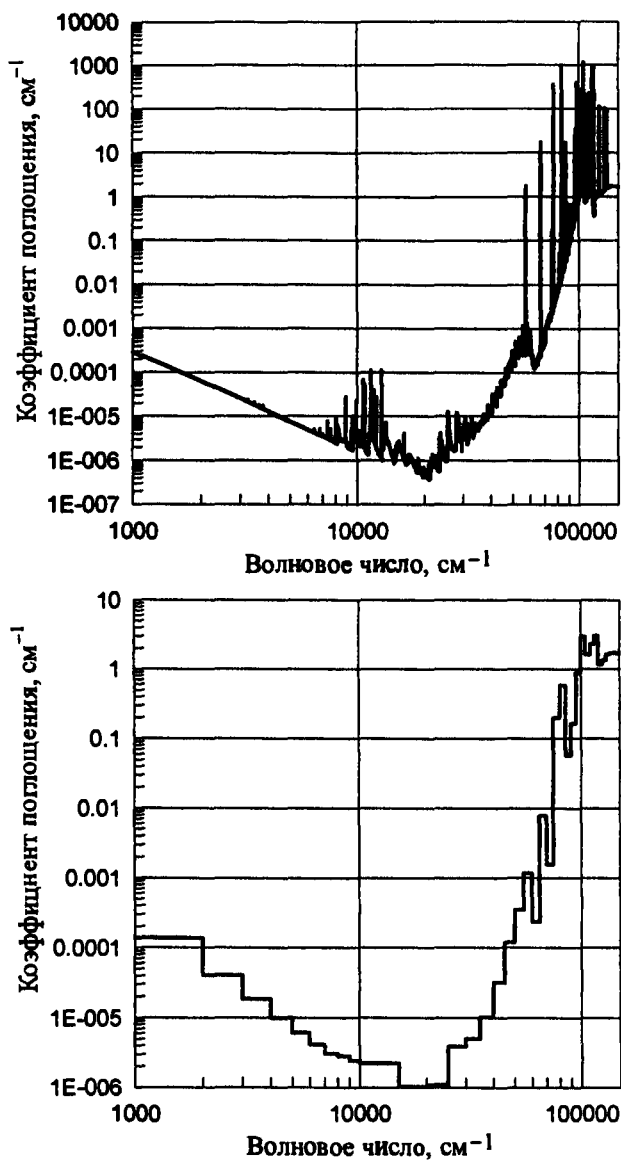


Рис. П.10.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 6000$ К и $p = 0.1$ атм

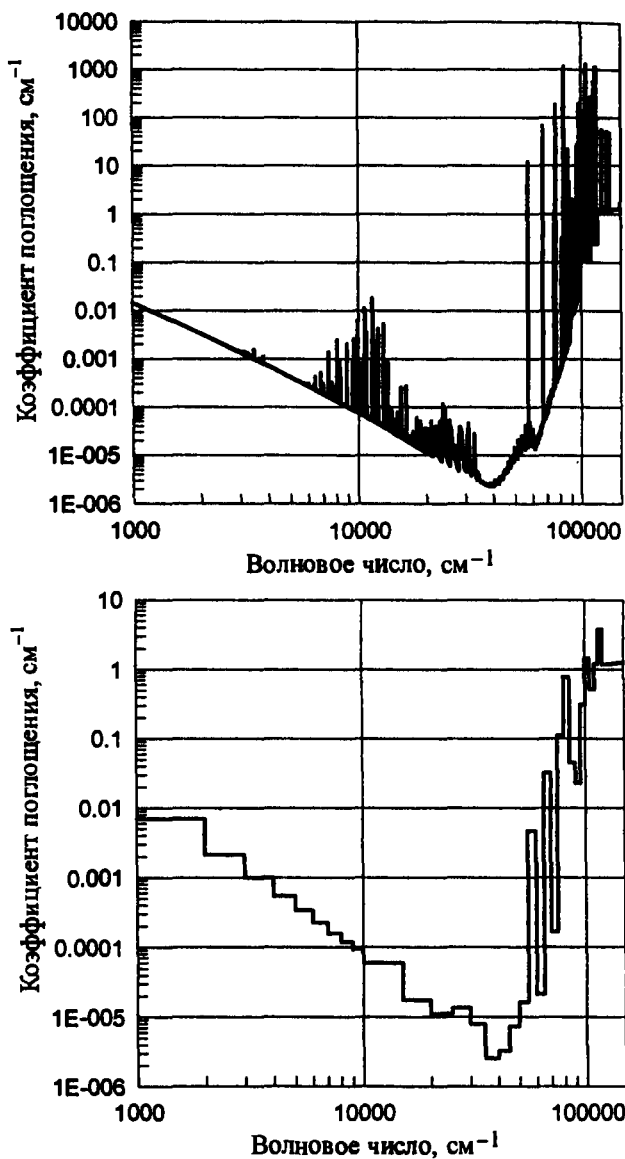


Рис. П.10.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 8000$ К и $p = 0.1$ атм

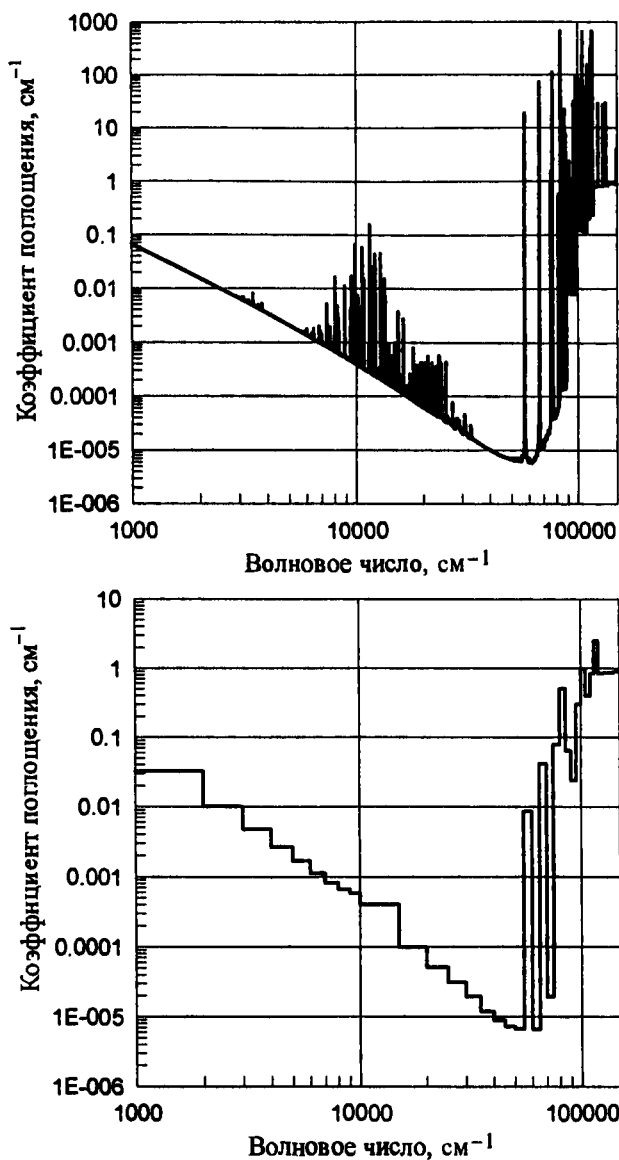


Рис. П.10.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 10000$ К и $p = 0.1$ атм

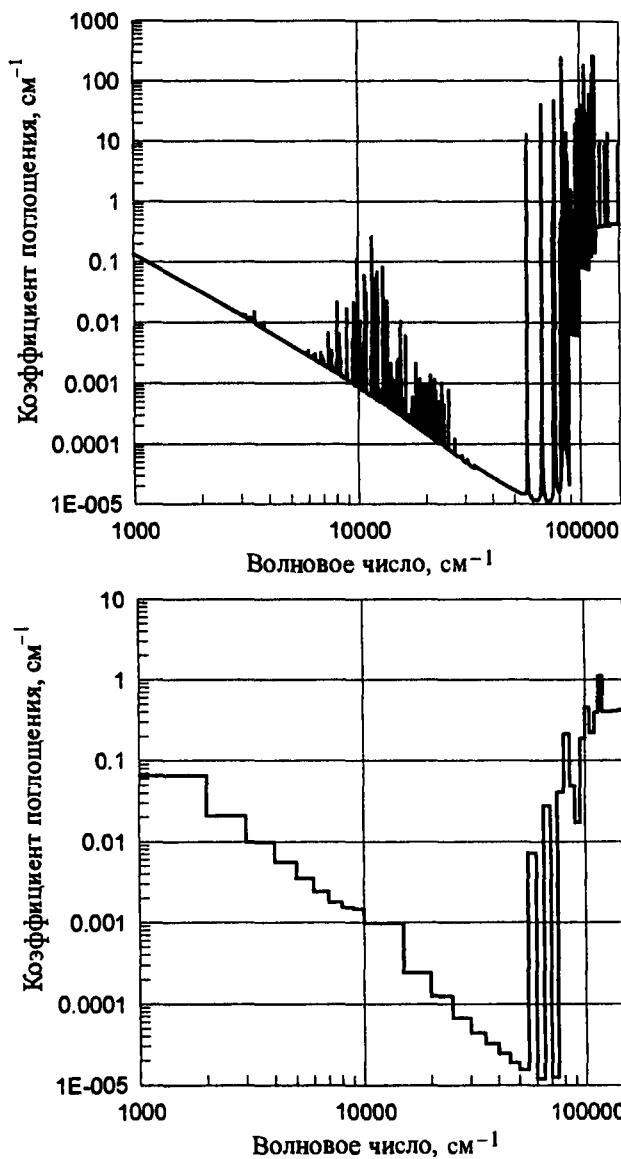


Рис. П.10.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 12000$ К и $p = 0.1$ атм

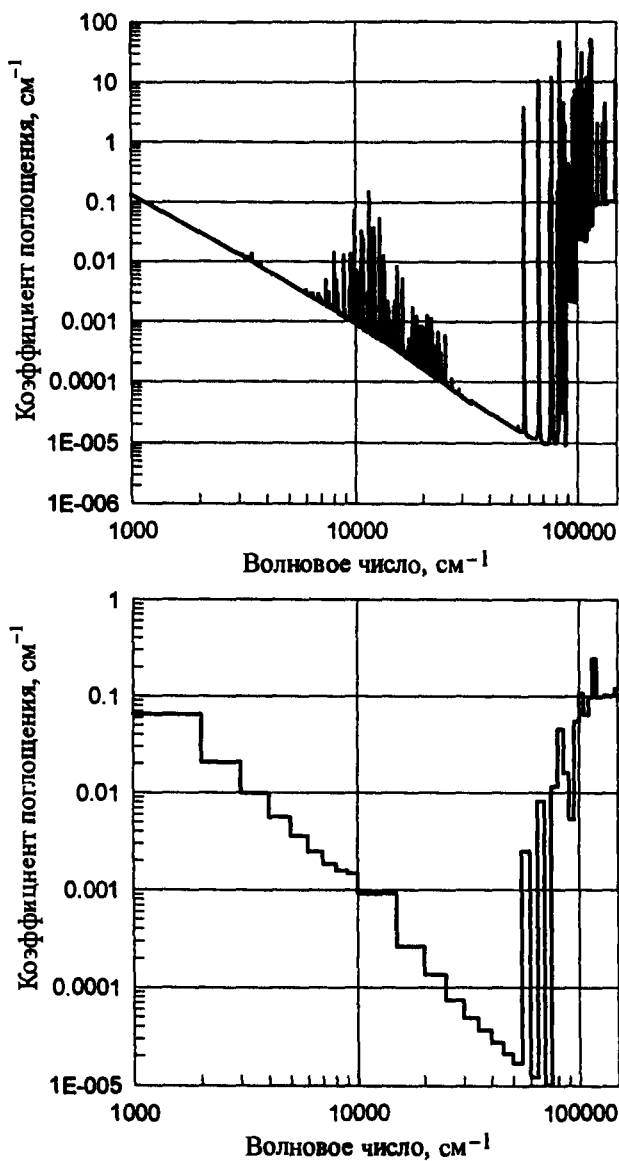


Рис. П.10.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 14000$ К и $p = 0.1$ атм

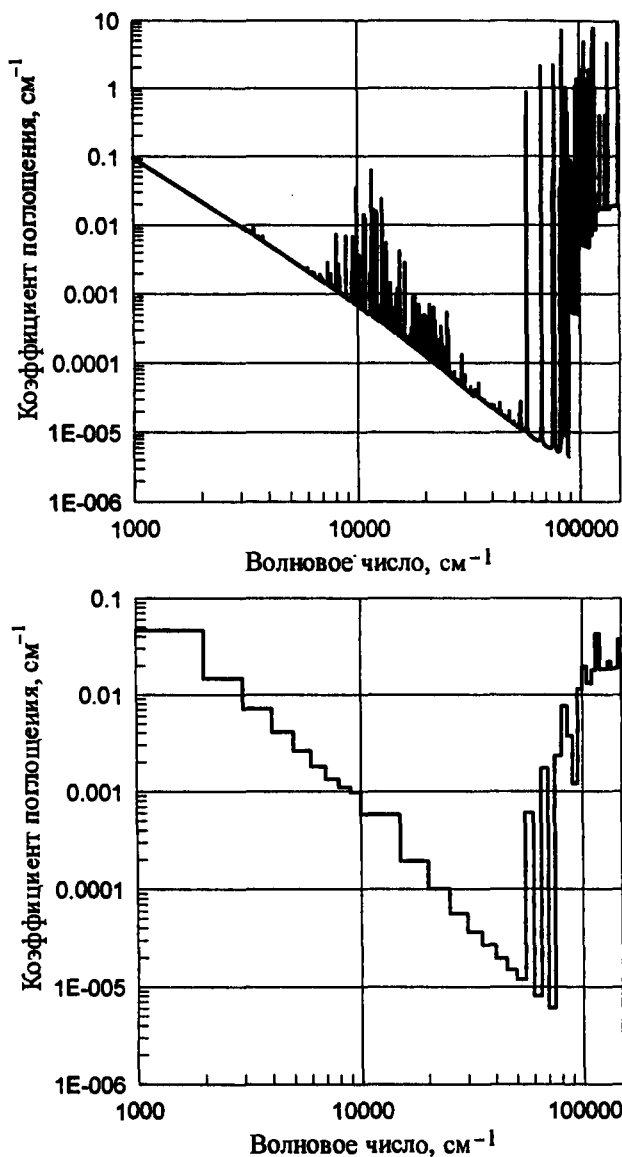


Рис. П.10.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 16000$ К и $p = 0.1$ атм

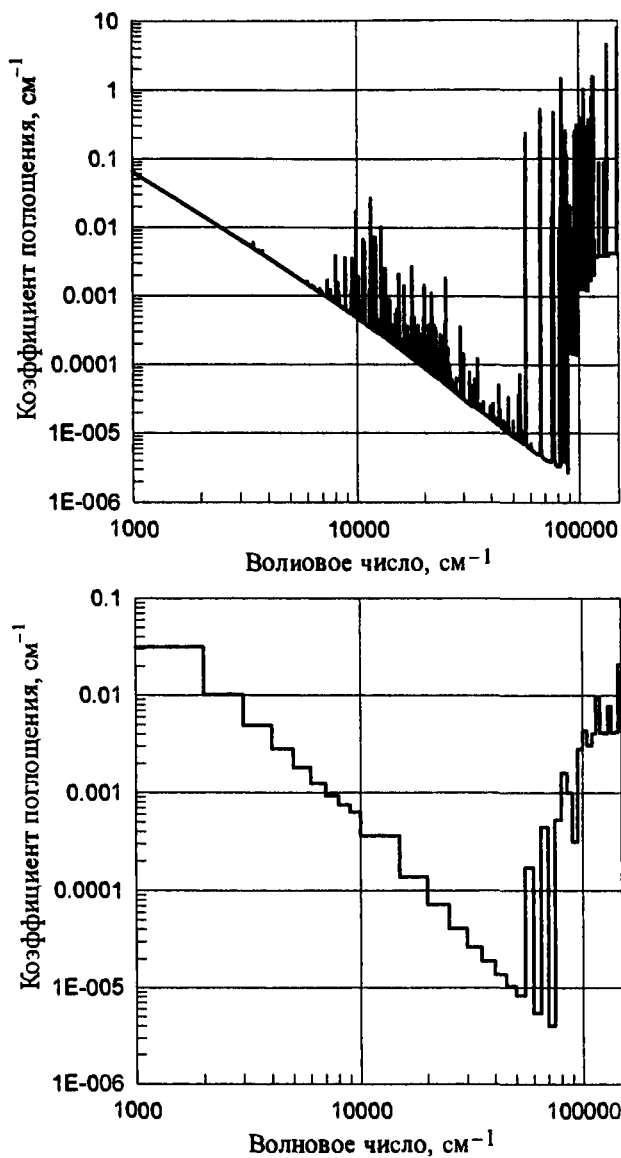


Рис. П.10.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 18000 \text{ K}$ и $p = 0.1 \text{ атм}$

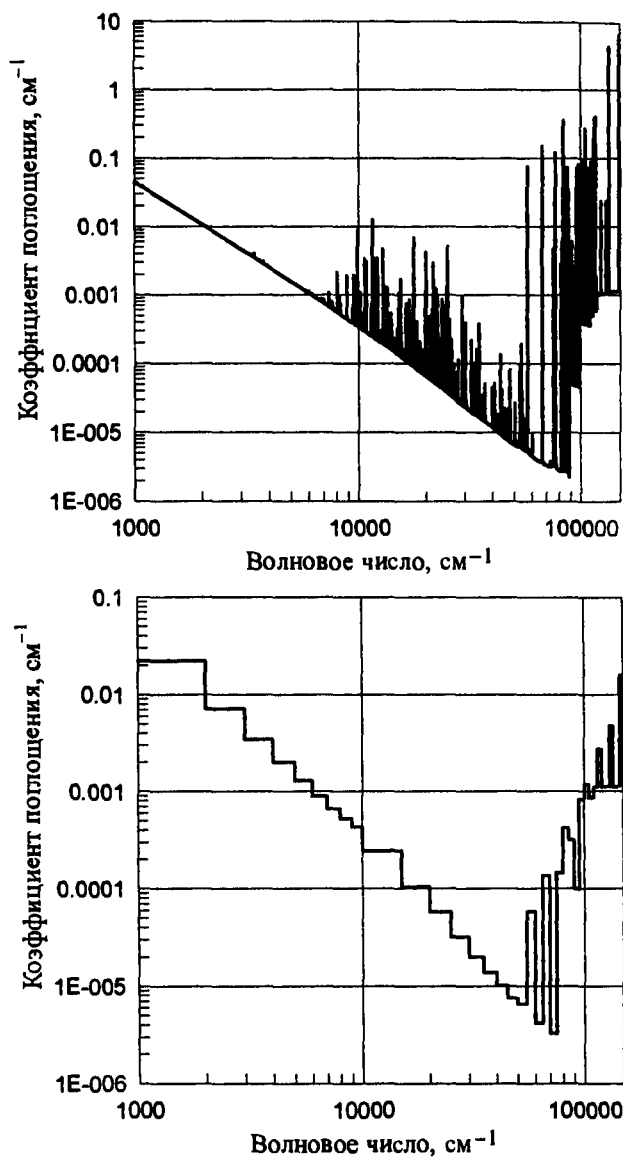


Рис. П.10.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 20000 \text{ K}$ и $p = 0.1 \text{ атм}$

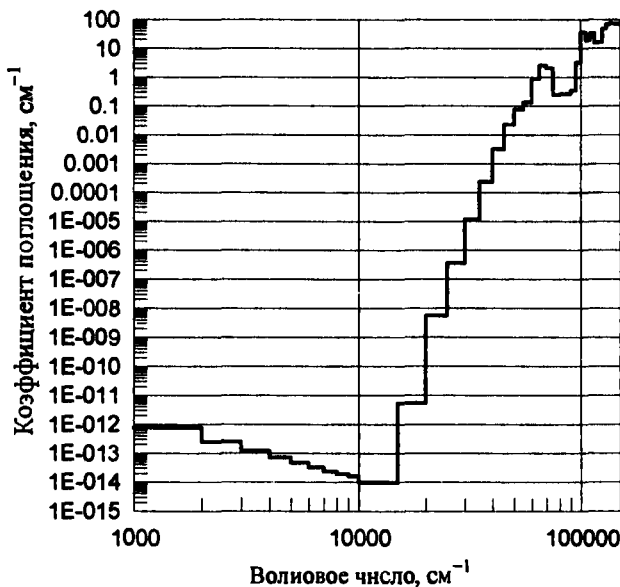
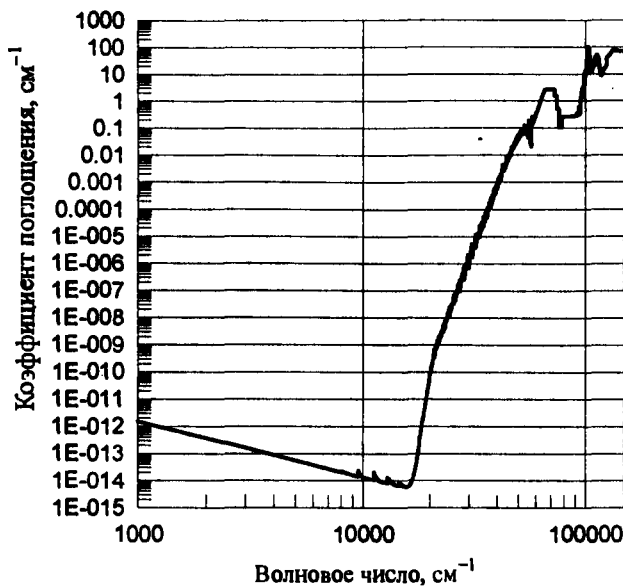


Рис. П.11.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 2000$ К и $p = 1$ атм

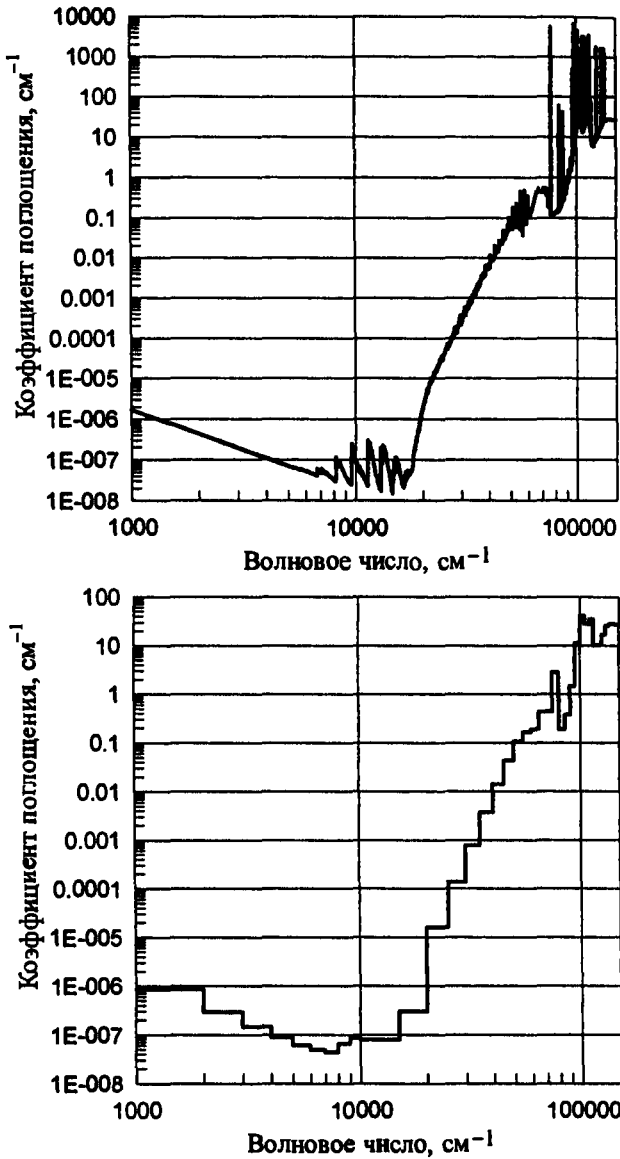


Рис. П.11.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

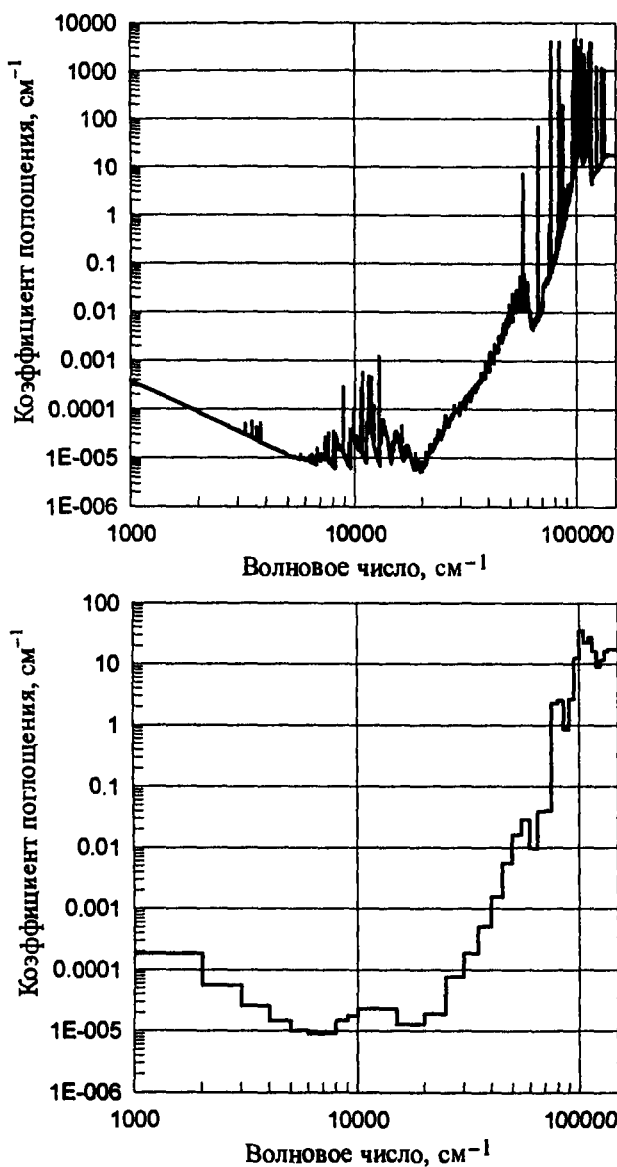


Рис. П.11.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 6000$ К и $p = 1$ атм

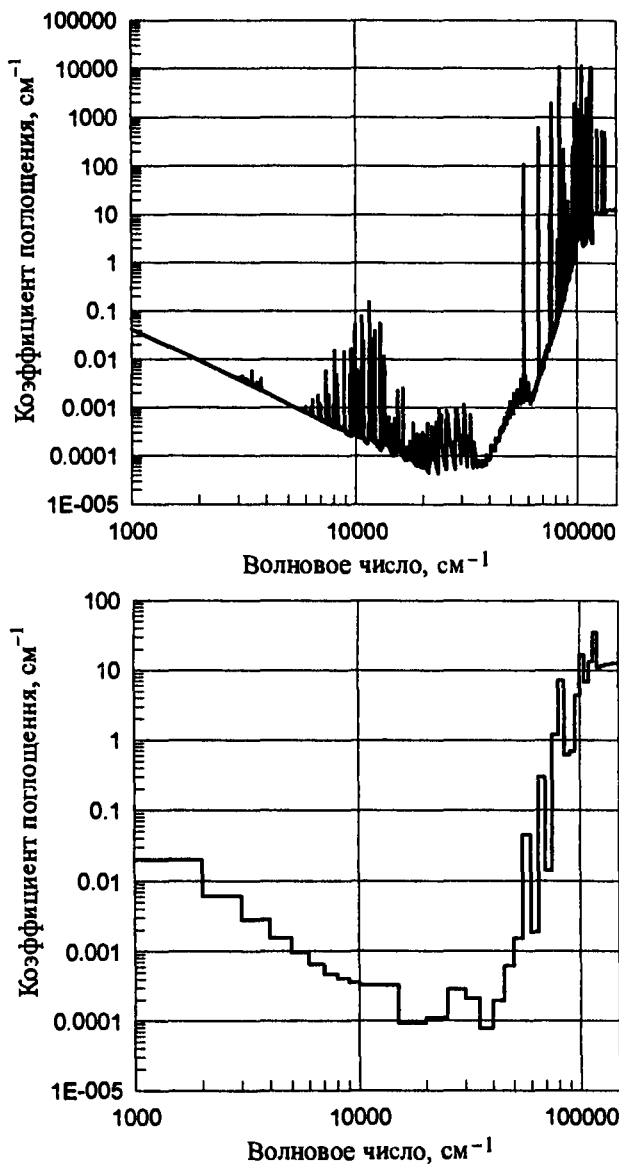


Рис. П.11.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

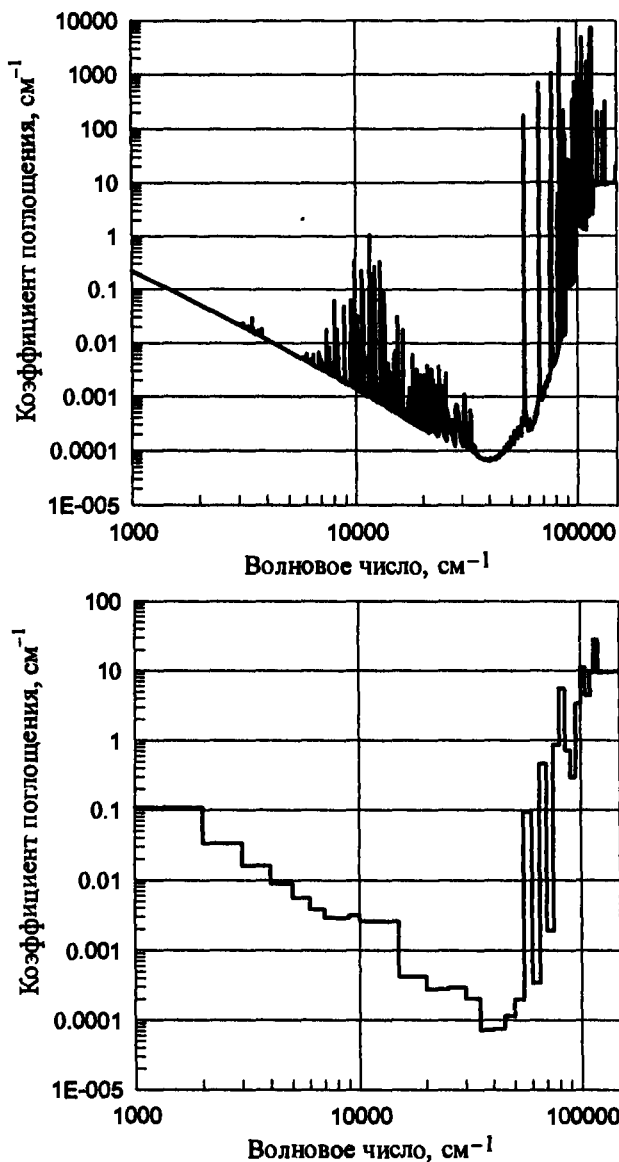


Рис. П.11.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 10000 \text{ К}$ и $p = 1 \text{ атм}$

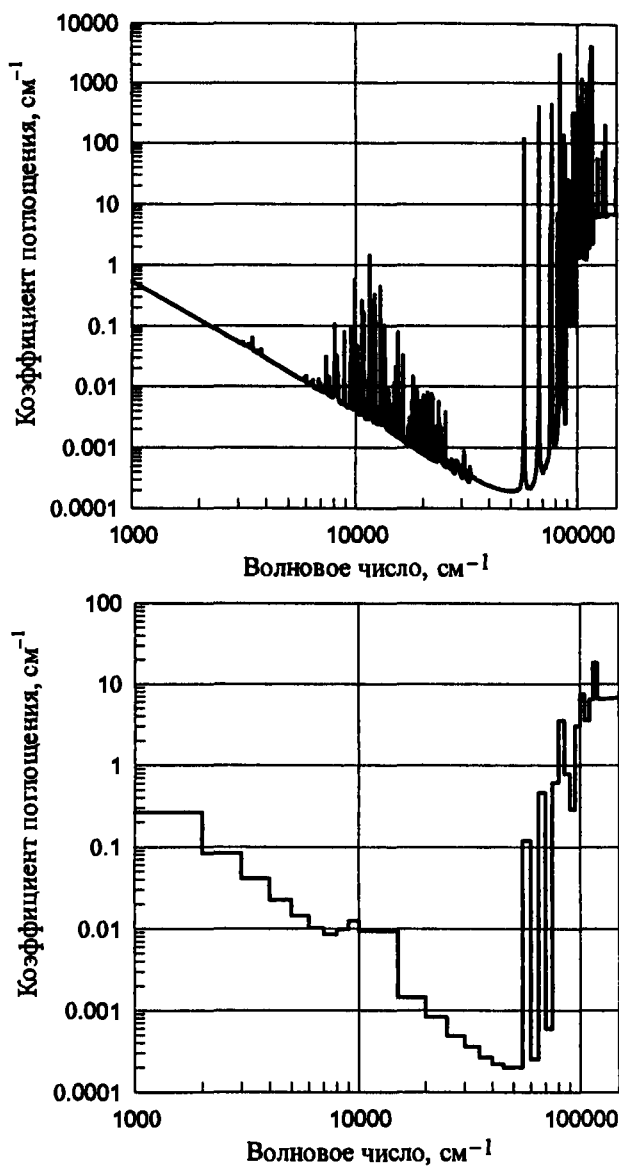


Рис. П.11.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

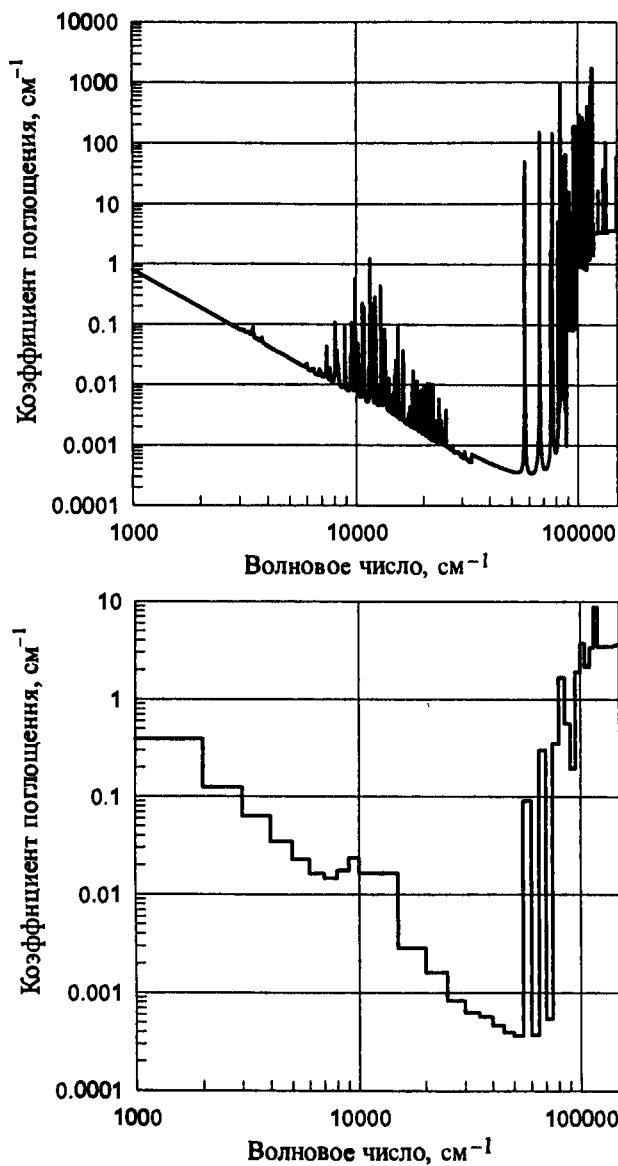


Рис. П.11.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 14000$ К и $p = 1$ атм

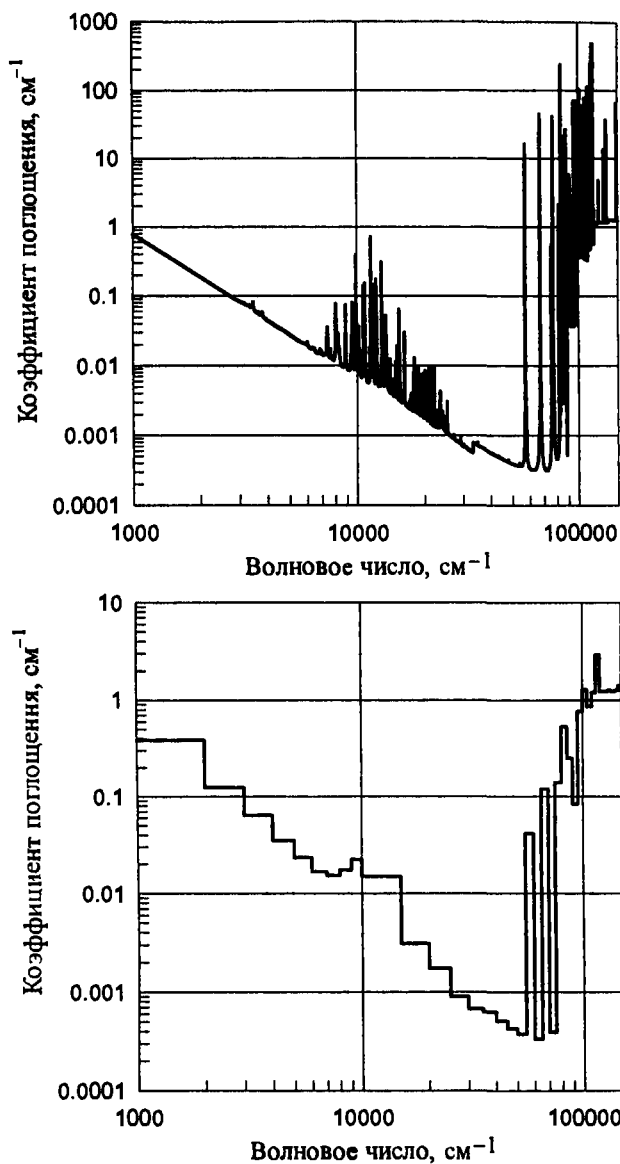


Рис. П.11.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

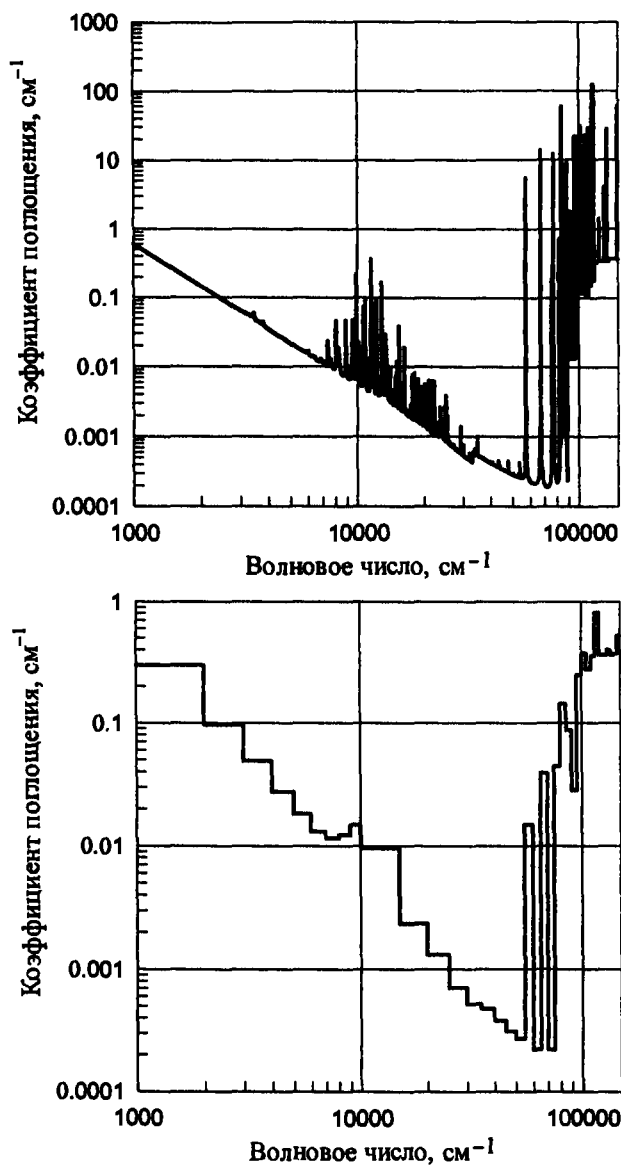


Рис. П.11.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 18000$ К и $p = 1$ атм

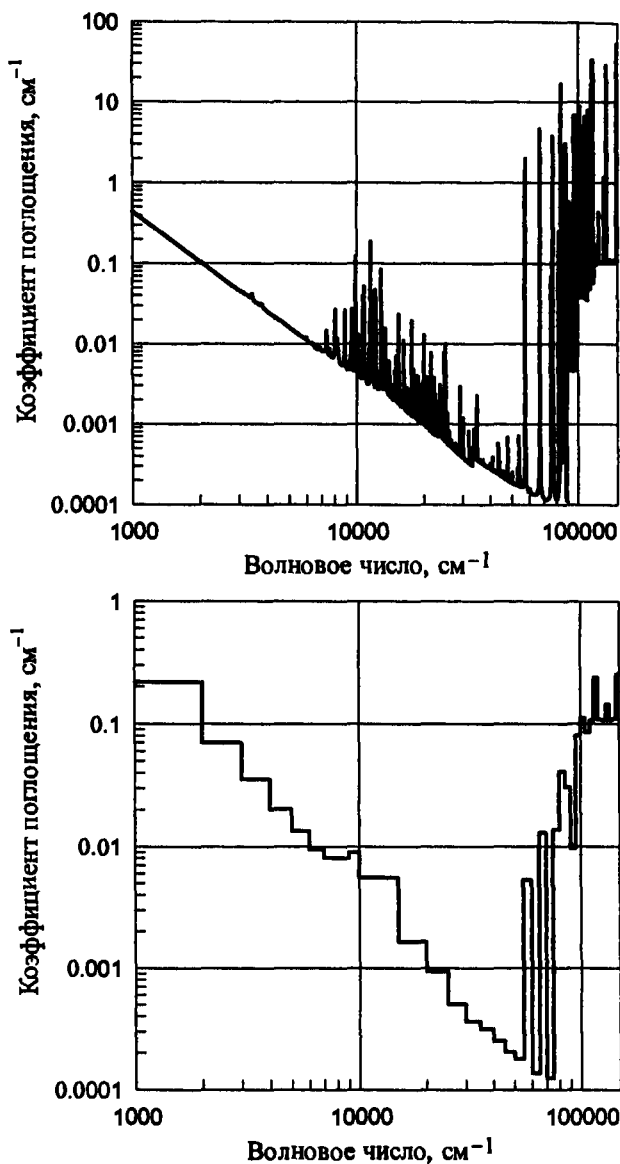


Рис. П.11.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T=20000$ К и $p=1$ атм

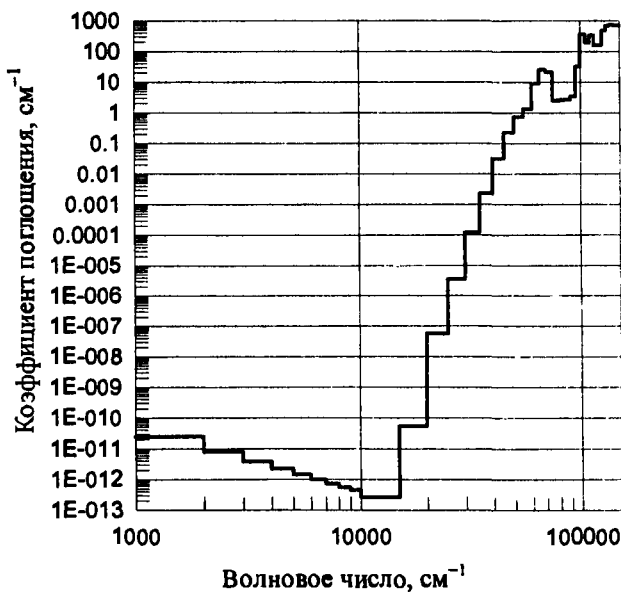
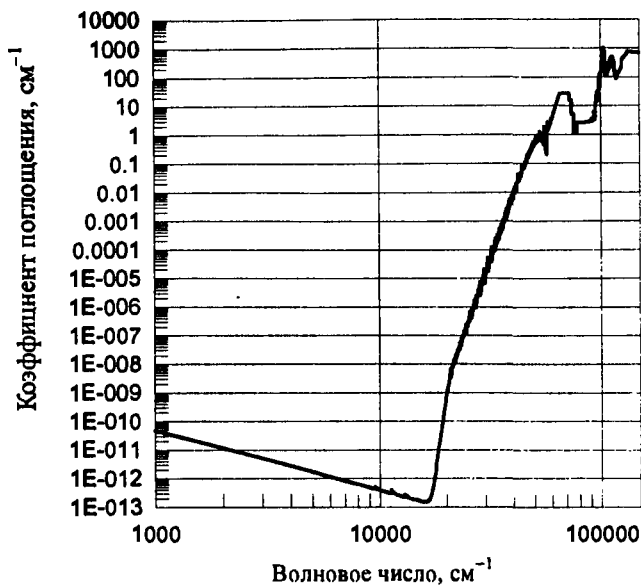


Рис. П.12.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 2000\text{ K}$ и $p = 10\text{ атм}$

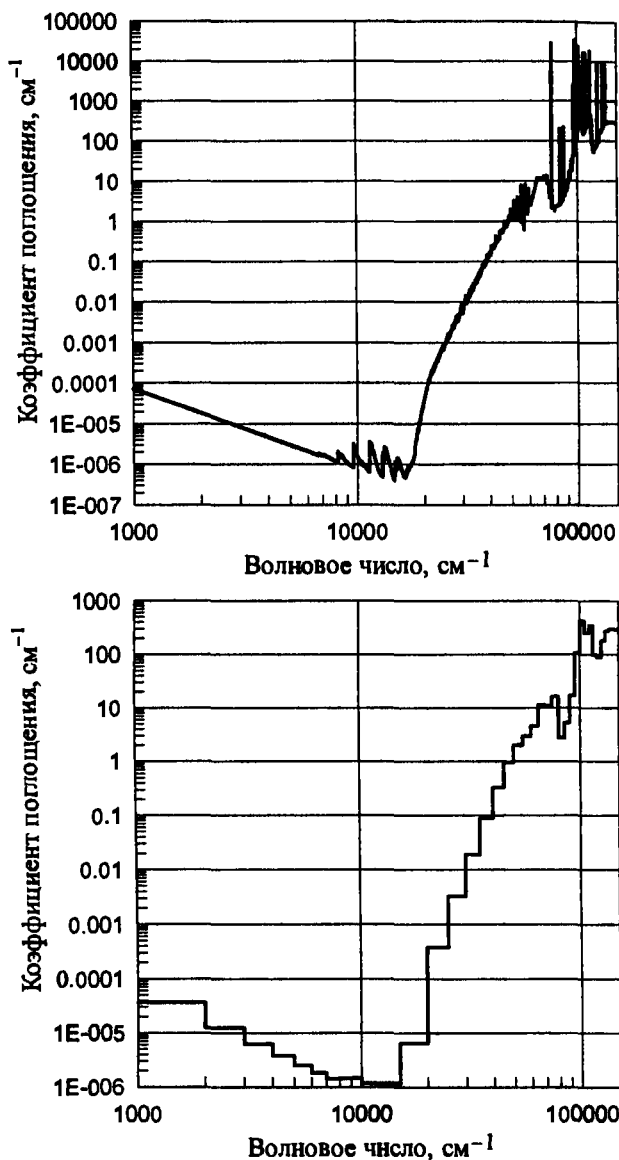


Рис. П.12.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 4000$ К и $p = 10$ атм

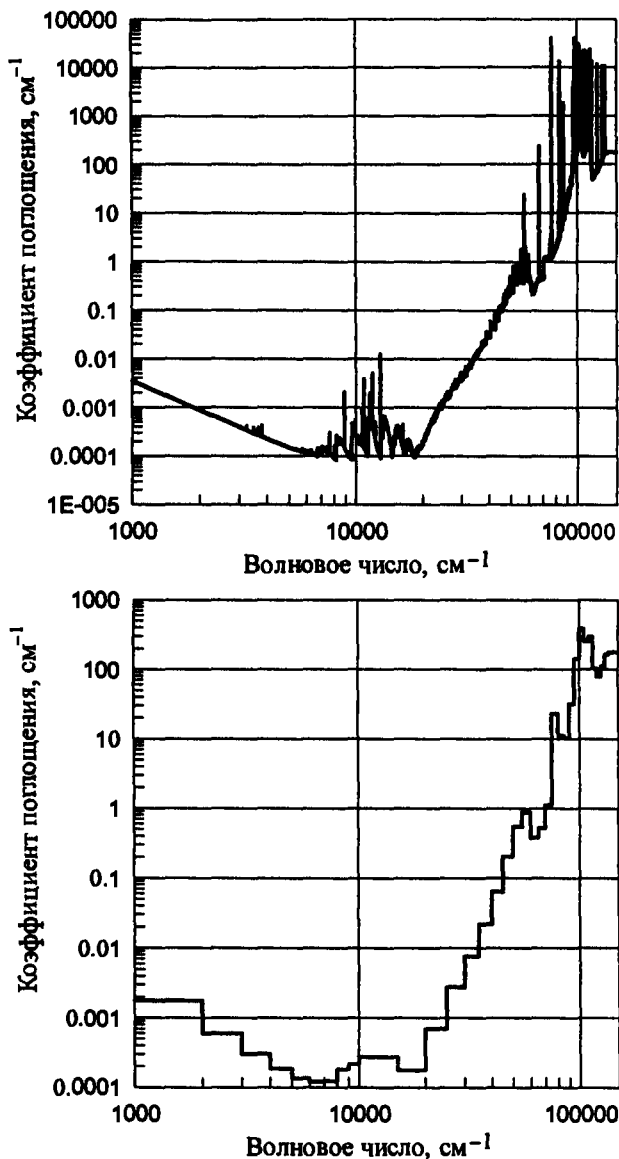


Рис. П.12.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 6000$ К и $p = 10$ атм

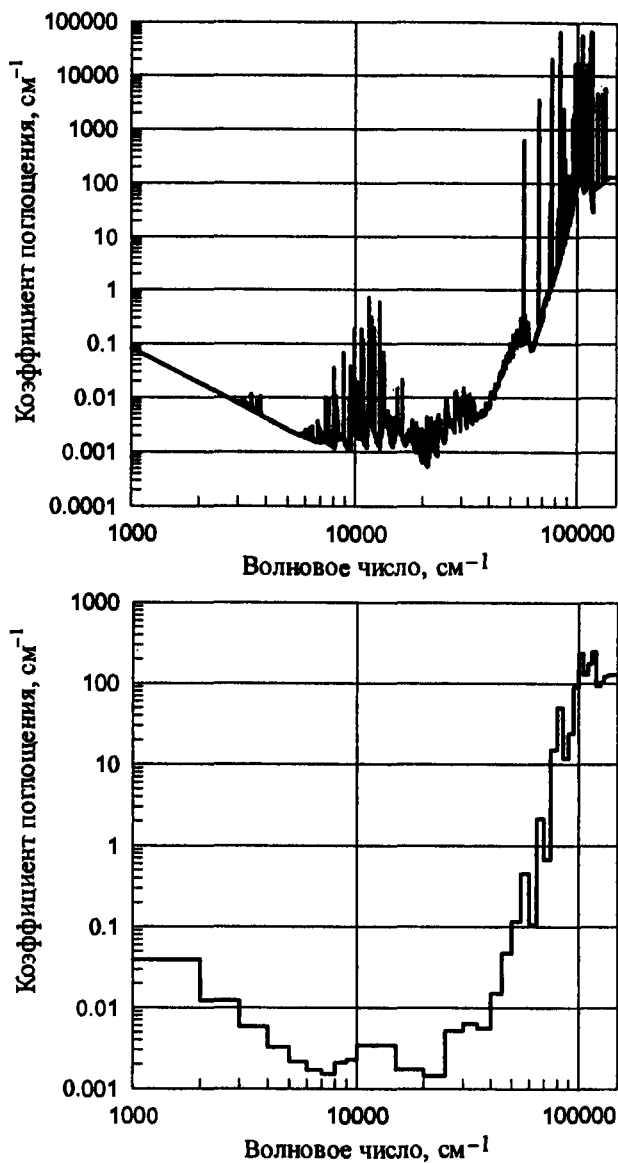


Рис. П.12.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 8000$ К и $p = 10$ атм

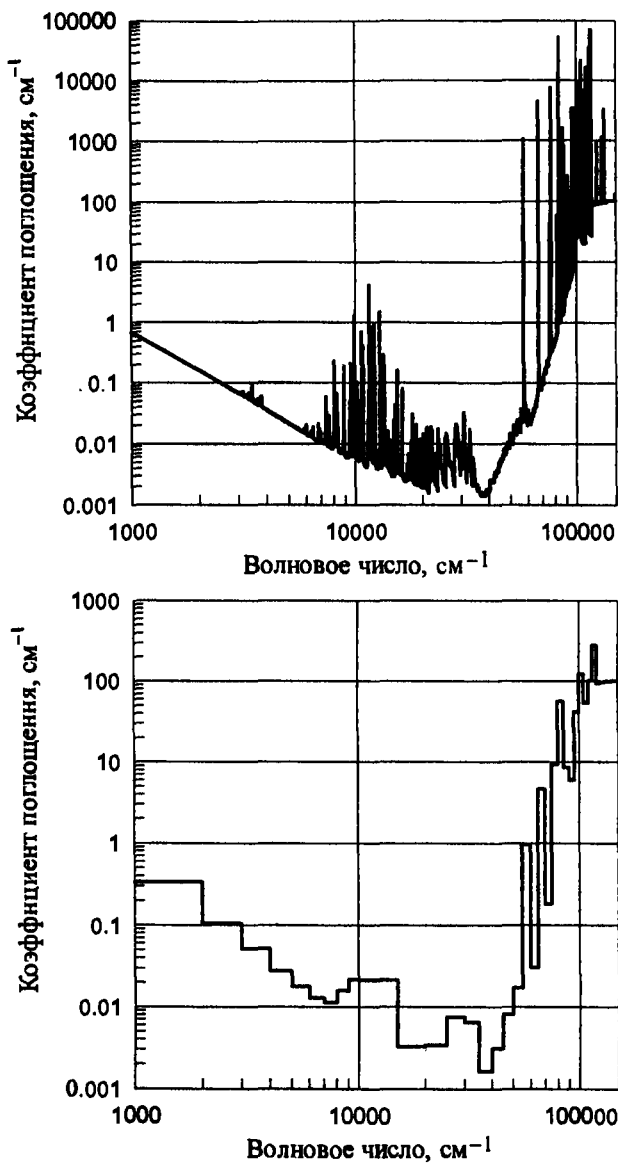


Рис. П.12.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 10000$ К и $p = 10$ атм

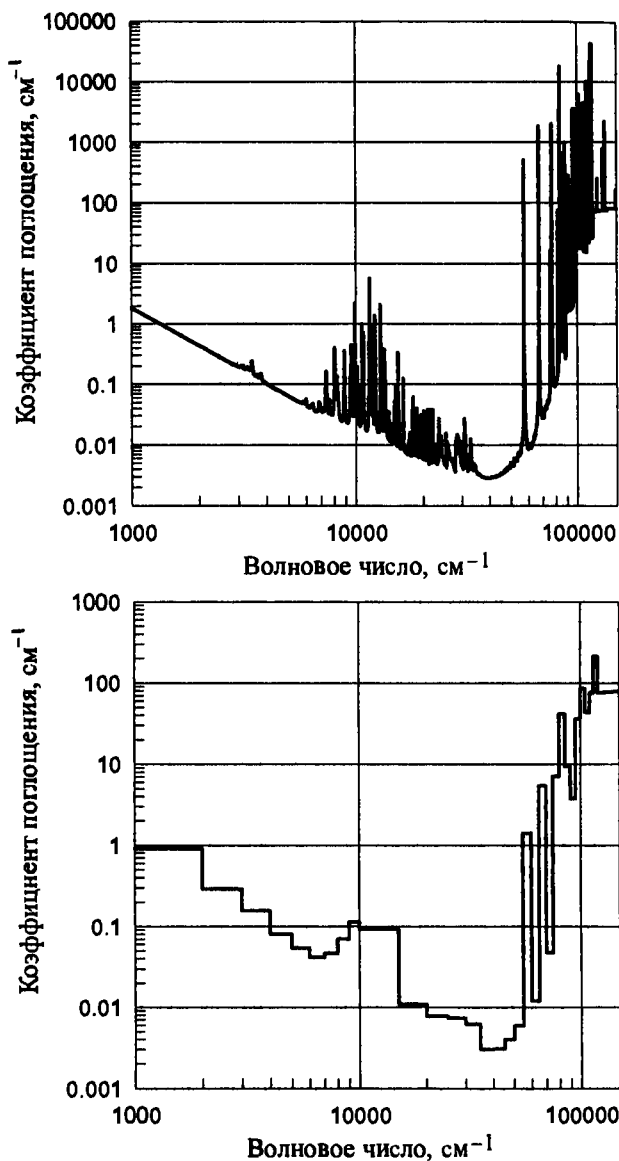


Рис. П.12.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 12000$ К и $p = 10$ атм

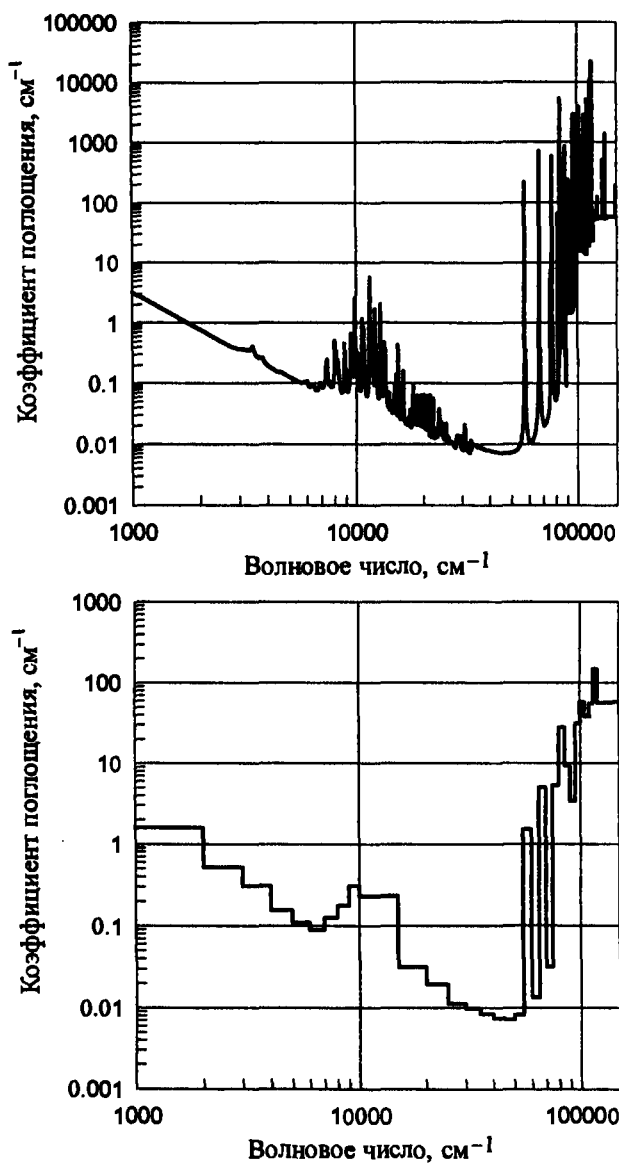


Рис. П.12.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 14000$ К и $p = 10$ атм

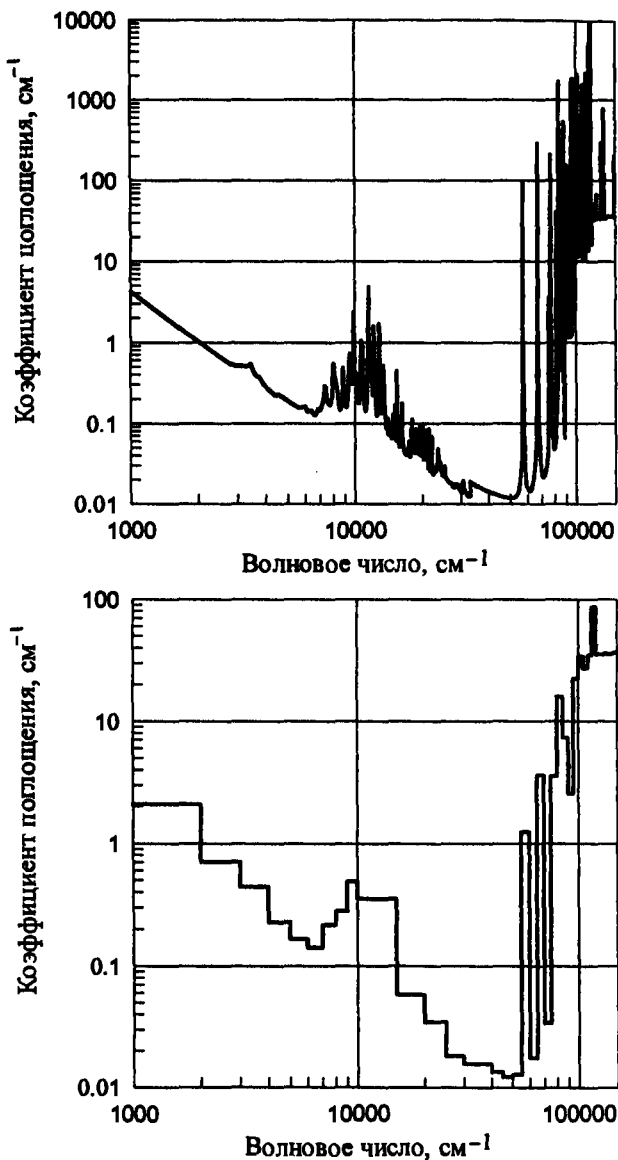


Рис. П.12.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 16000$ К и $p = 10$ атм

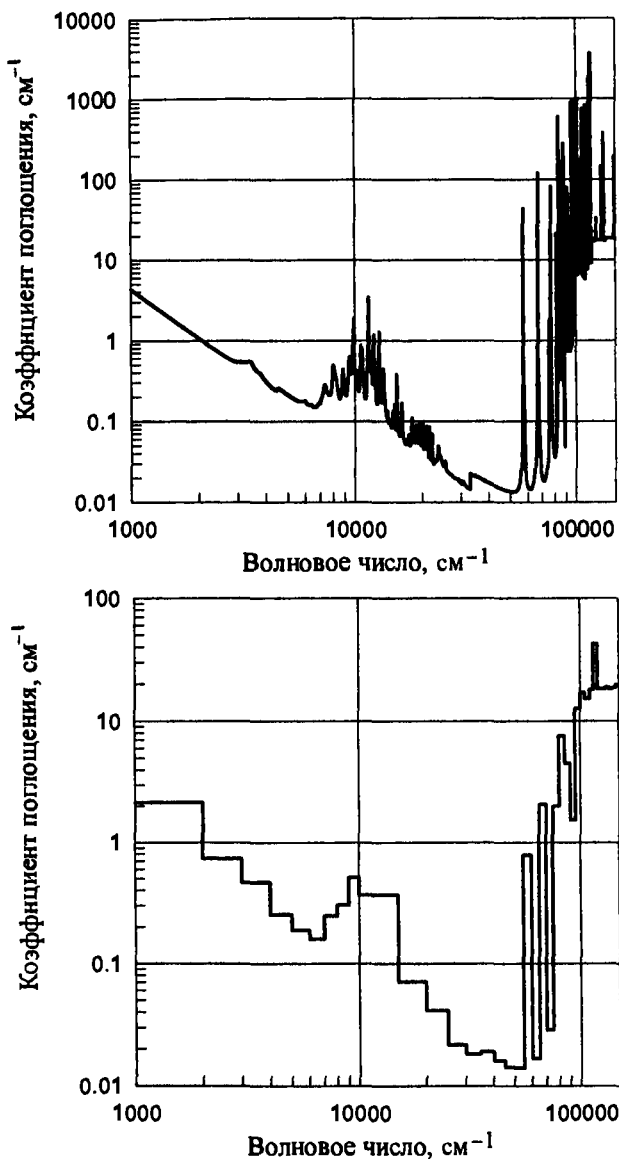


Рис. П.12.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 18000$ К и $p = 10$ атм

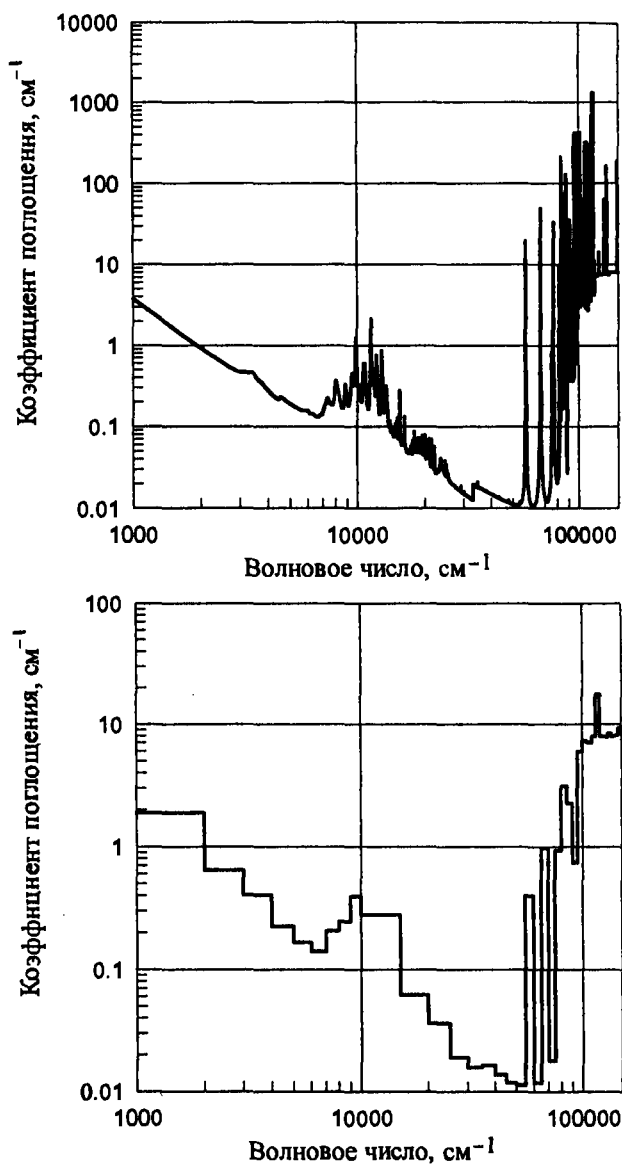


Рис. П.12.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения воздуха при $T = 20000$ К и $p = 10$ атм

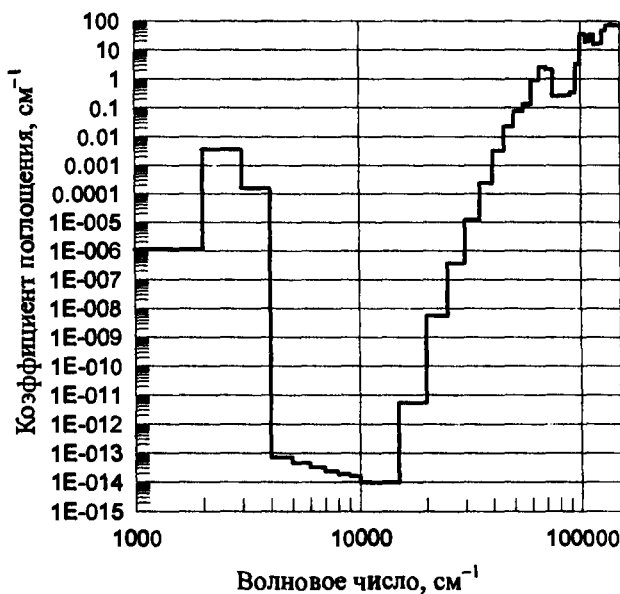
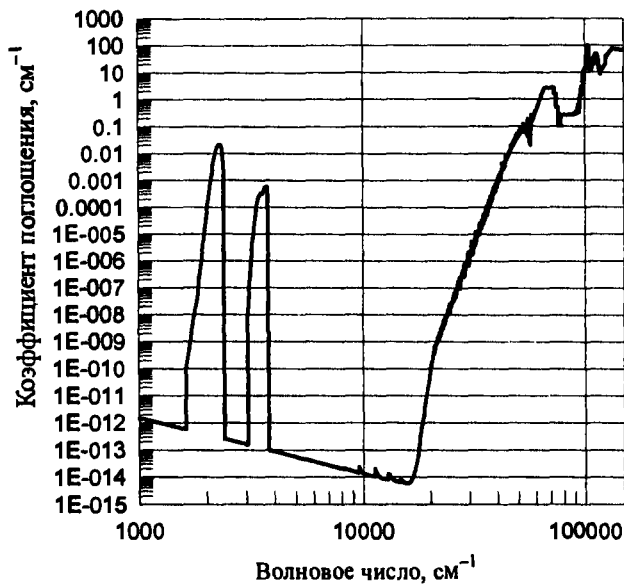


Рис. П.13.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO_2 при $T = 2000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

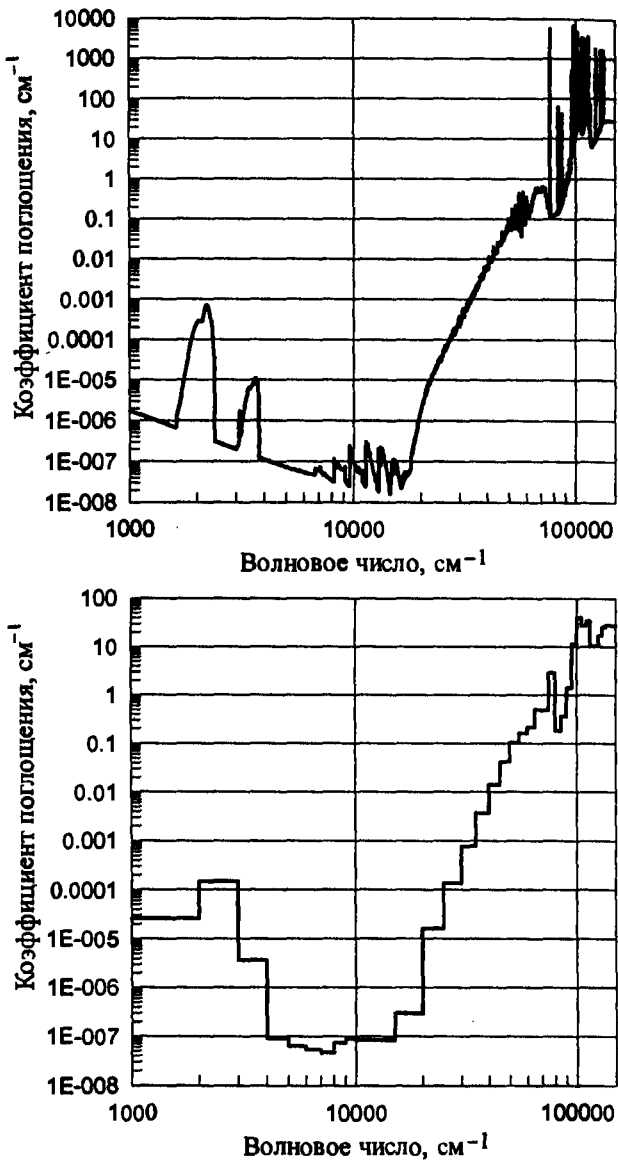


Рис. П.13.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO₂ при $T = 4000$ К и $p = 1$ атм

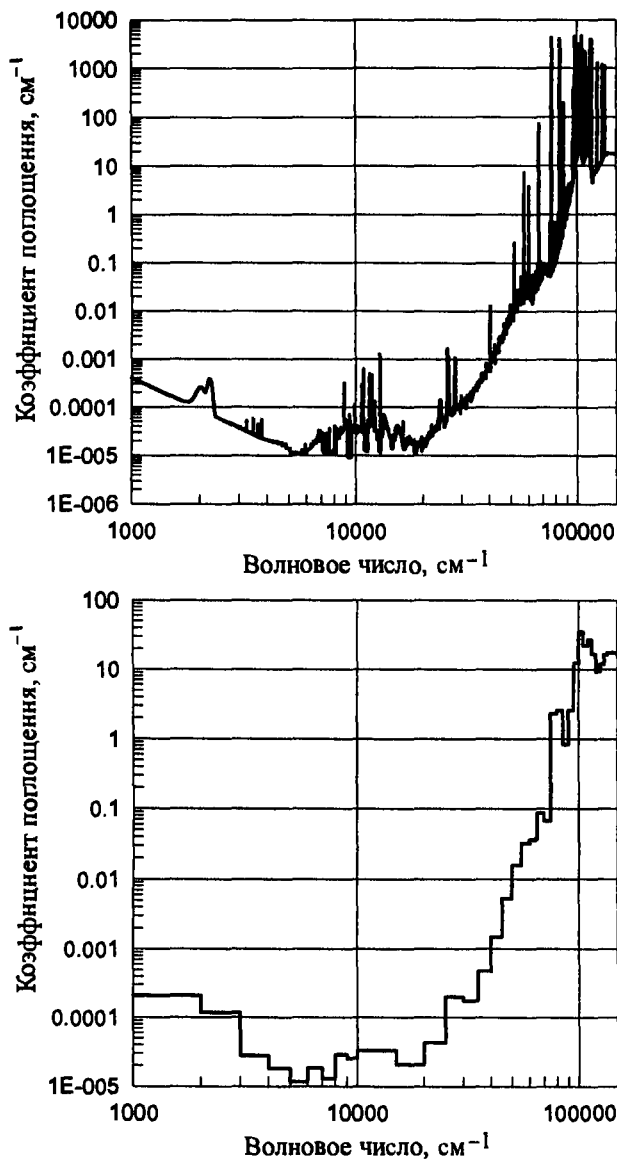


Рис. П.13.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO₂ при $T = 6000$ К и $p = 1$ атм

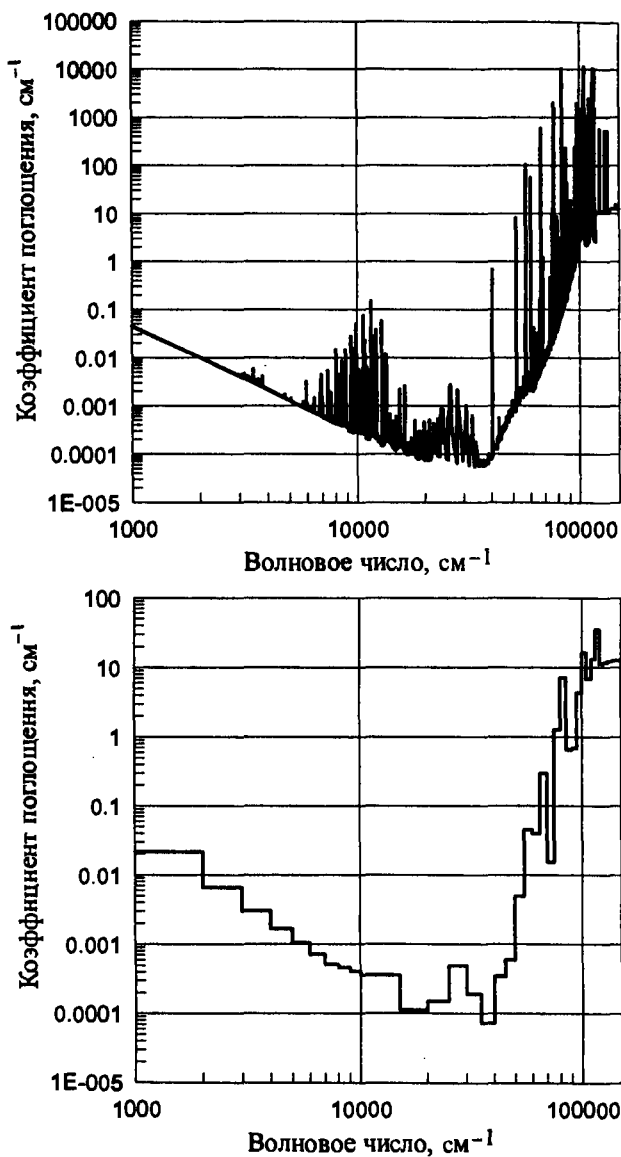


Рис. П.13.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO₂ при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

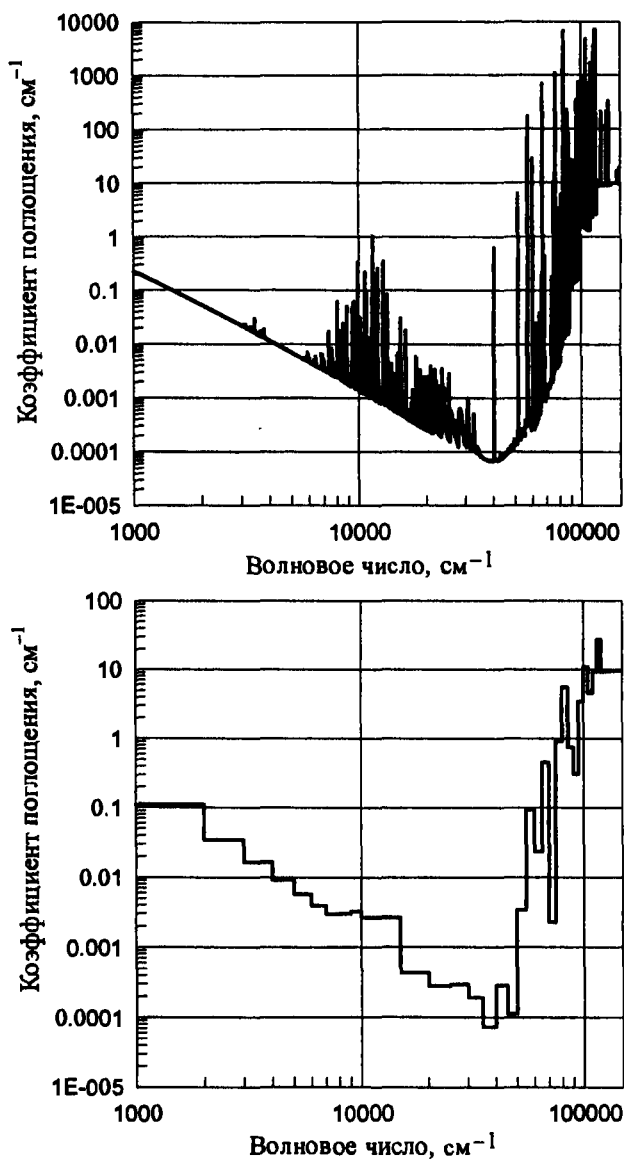


Рис. П.13.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO₂ при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

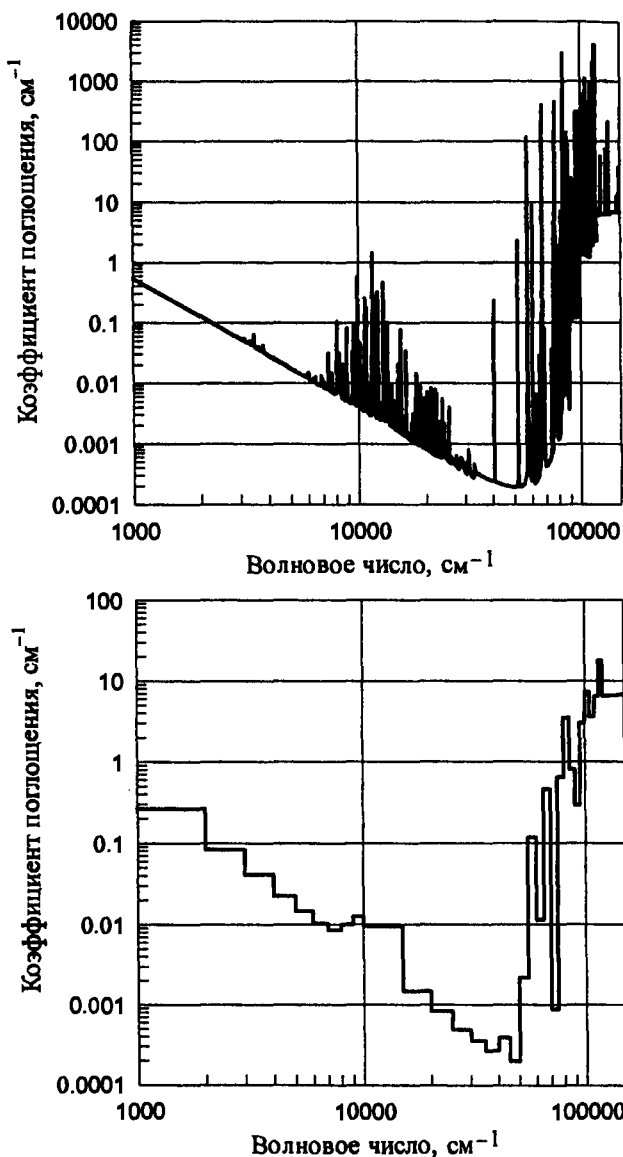


Рис. П.13.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO₂ при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

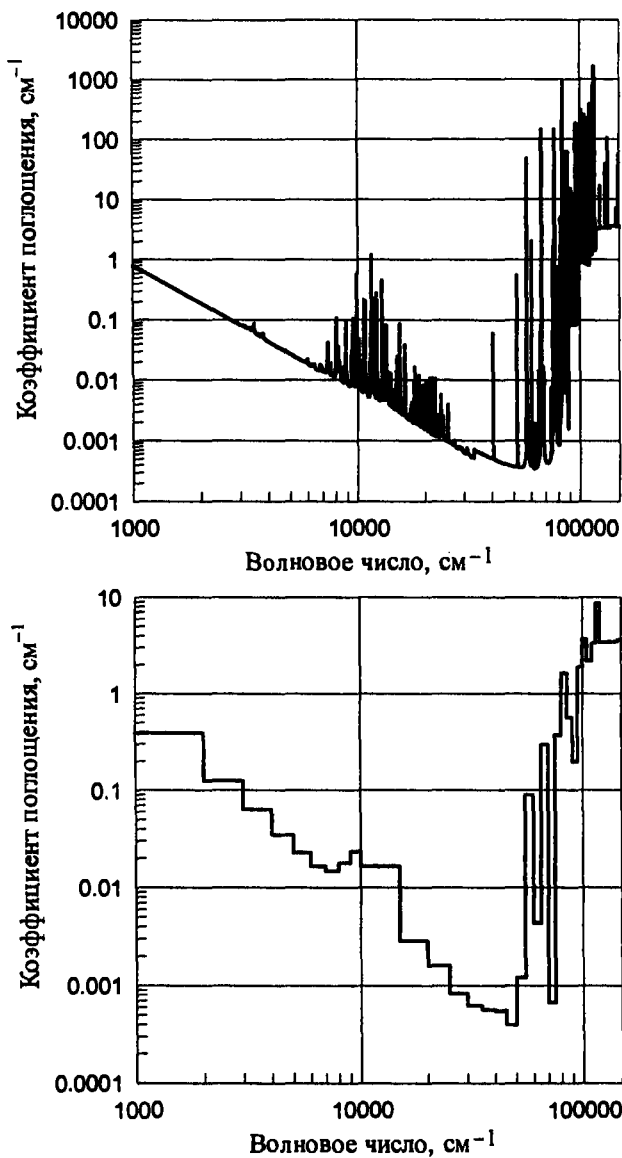


Рис. П.13.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO₂ при $T = 14000$ К и $p = 1$ атм

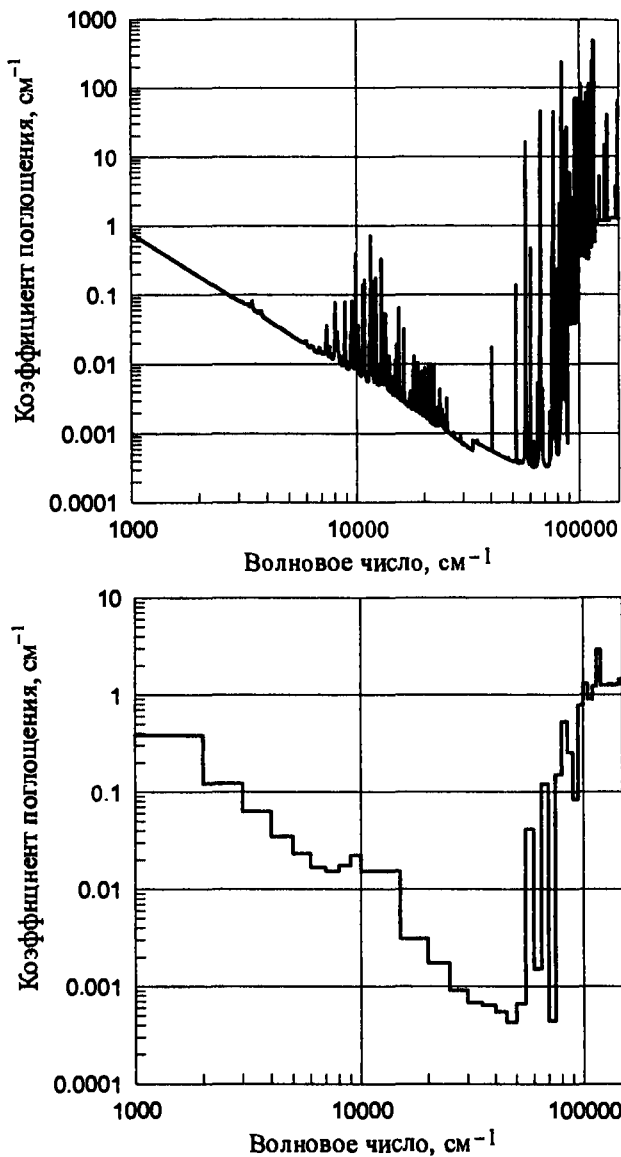


Рис. П.13.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO₂ при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

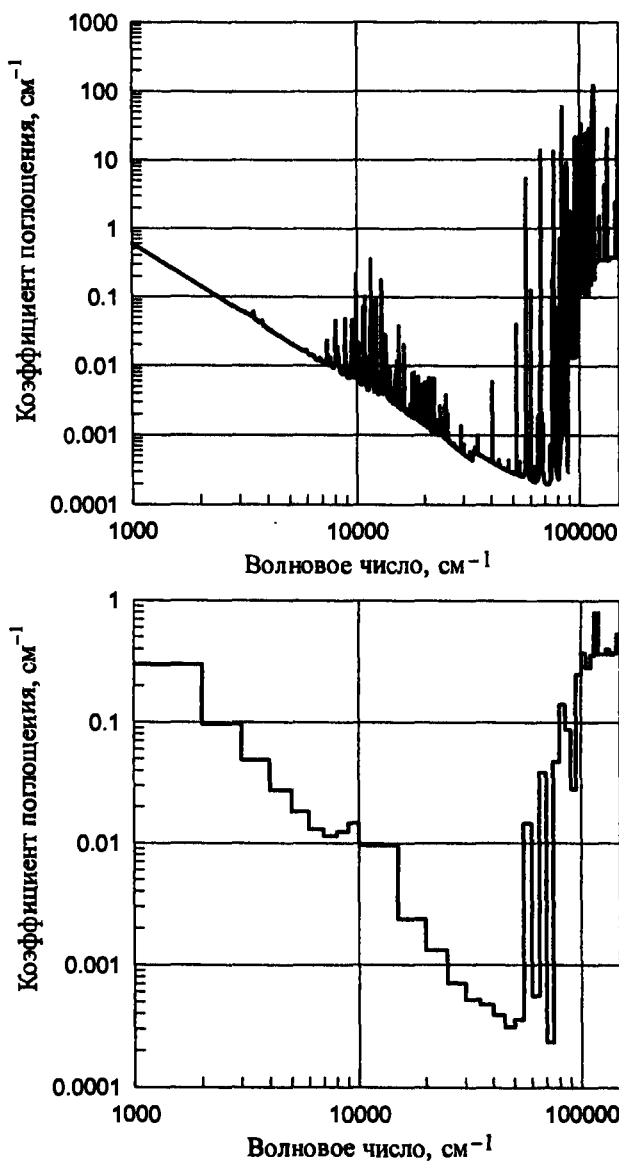


Рис. П.13.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO_2 при $T = 18000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

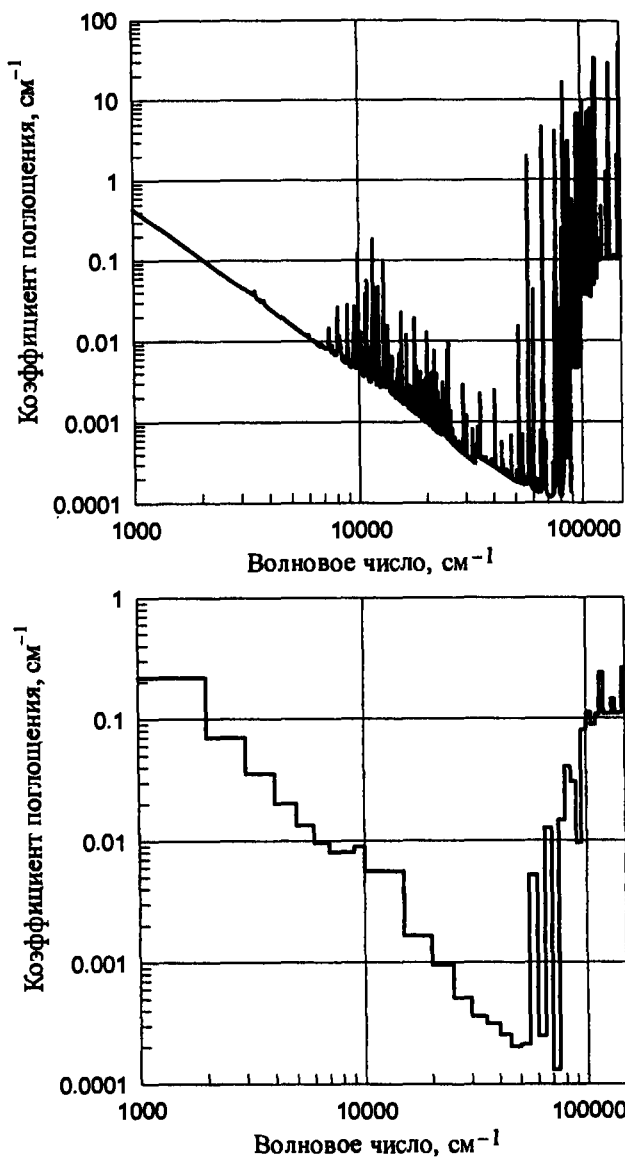


Рис. П.13.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и CO₂ при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

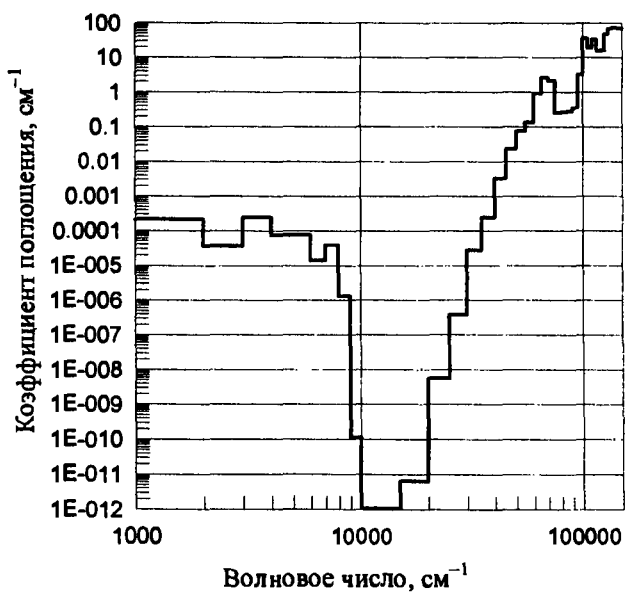
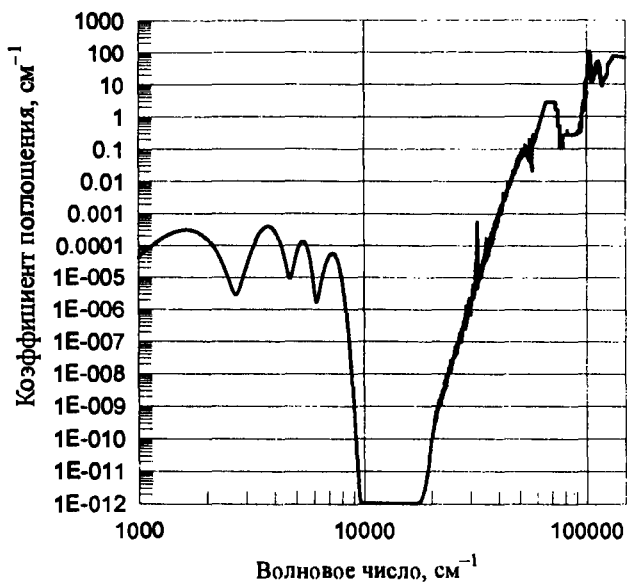


Рис. П.14.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H_2O при $T = 2000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

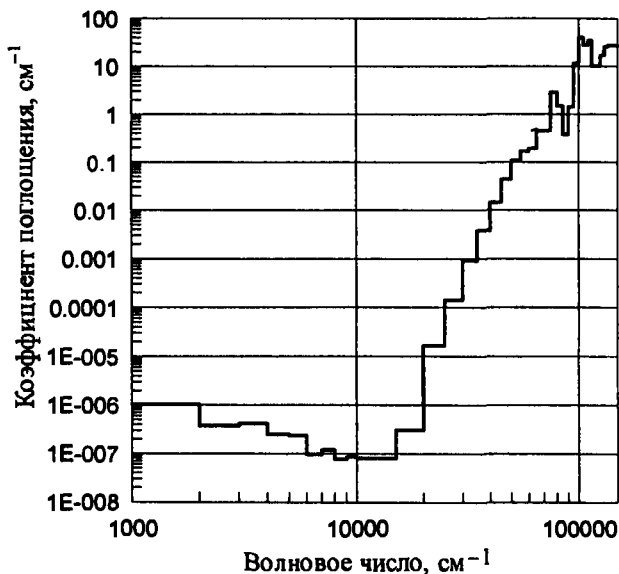
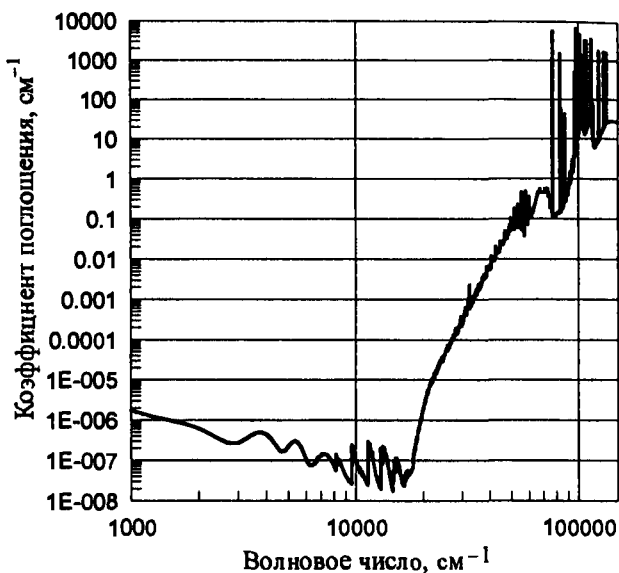


Рис. П.14.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 4000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

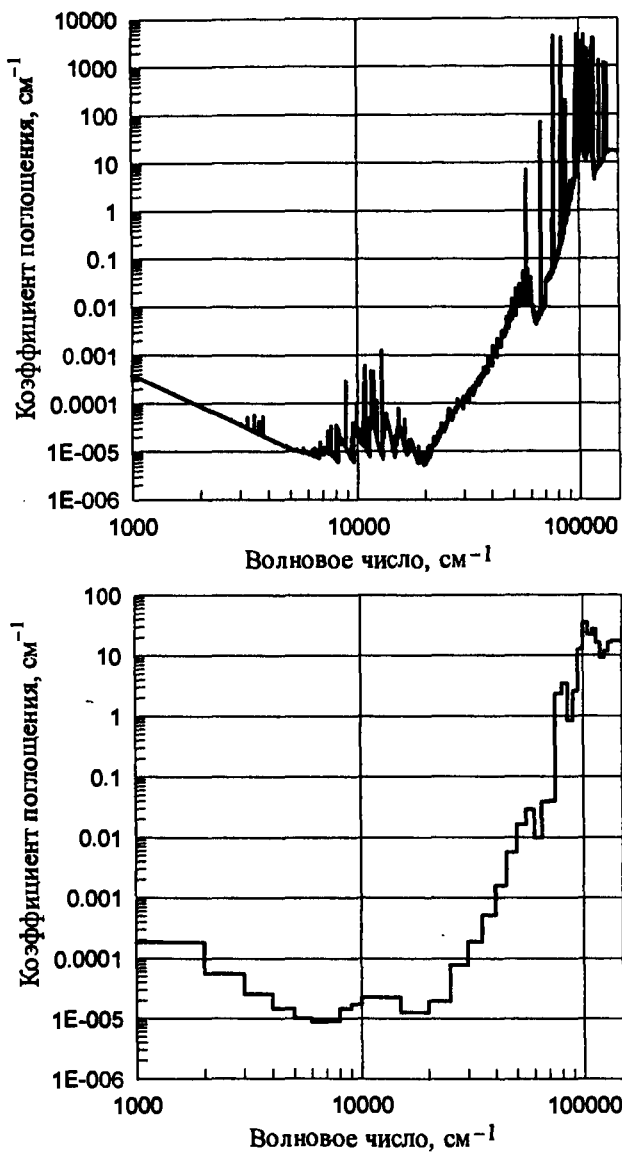


Рис. П.14.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 6000$ К и $p = 1$ атм

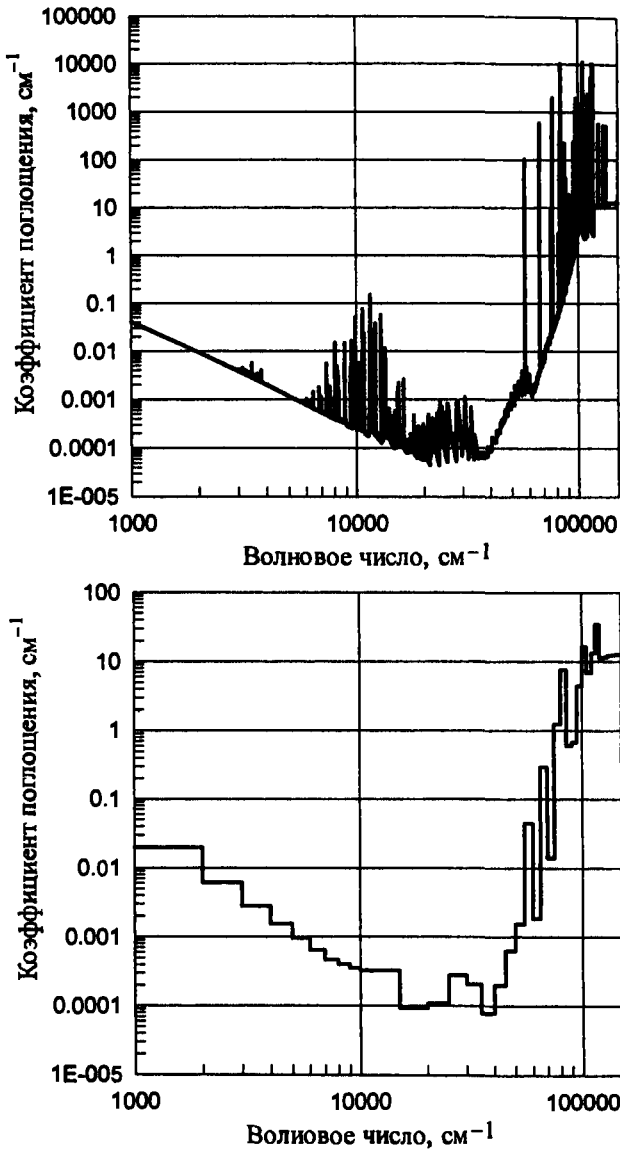


Рис. П.14.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 8000$ К и $p = 1$ атм

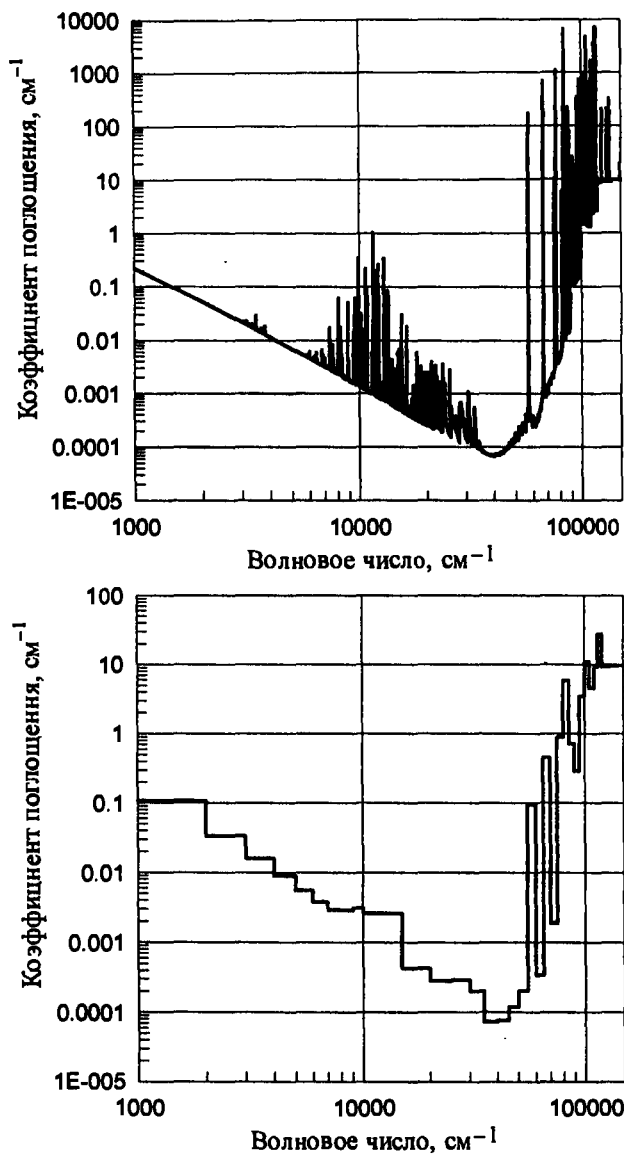


Рис. П.14.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

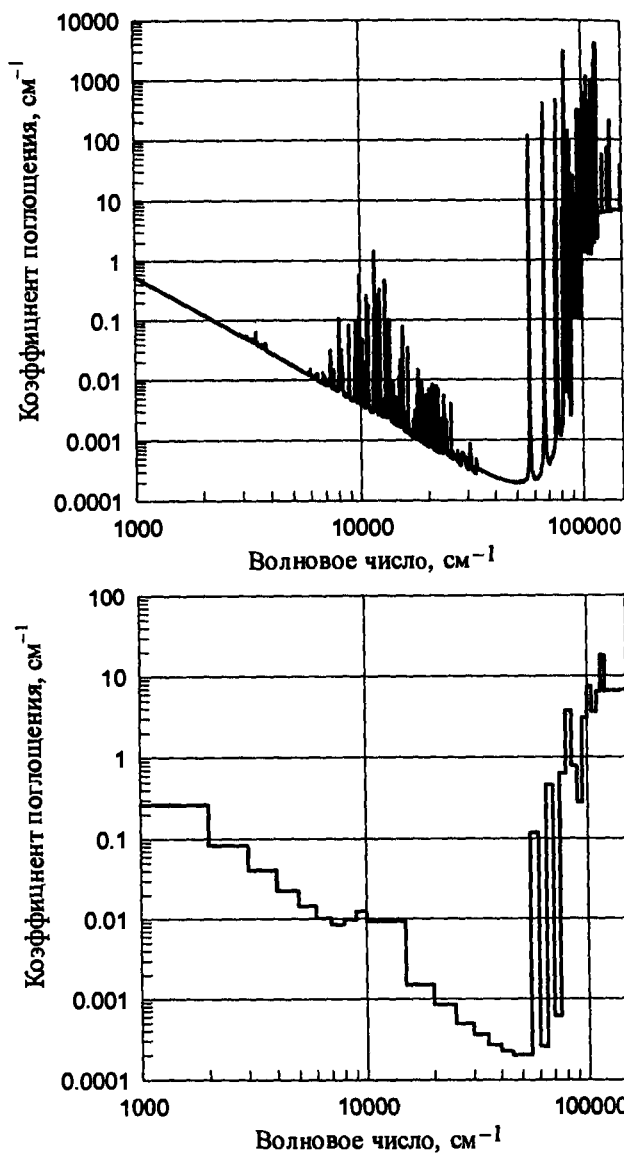


Рис. П.14.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 12000$ К и $p = 1$ атм

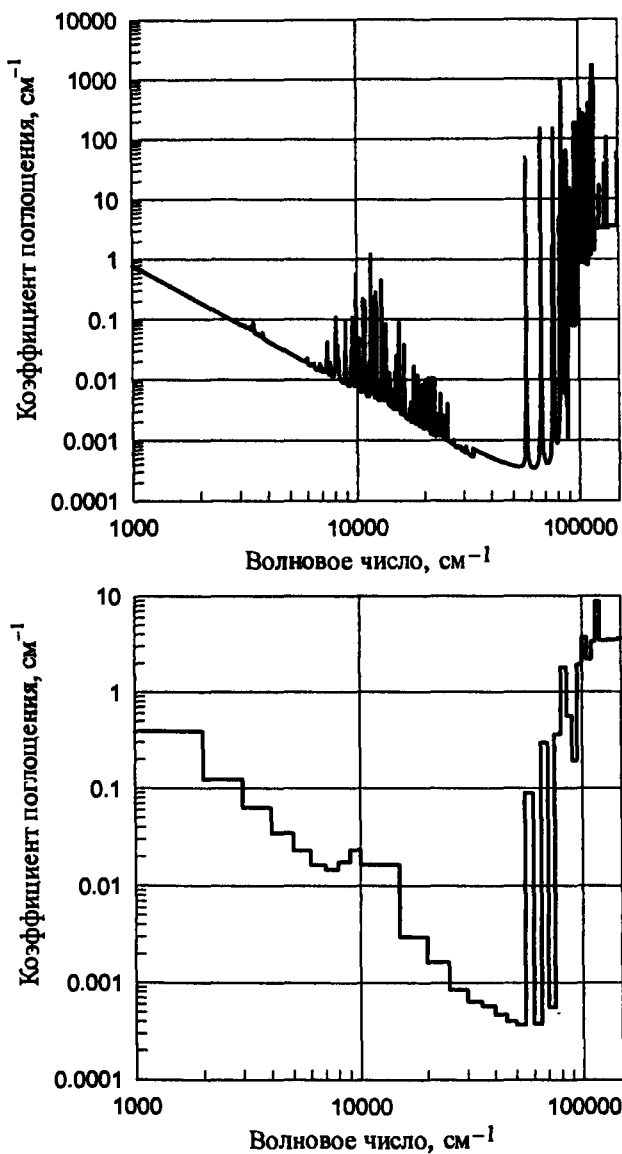


Рис. П.14.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 14000$ К и $p = 1$ атм

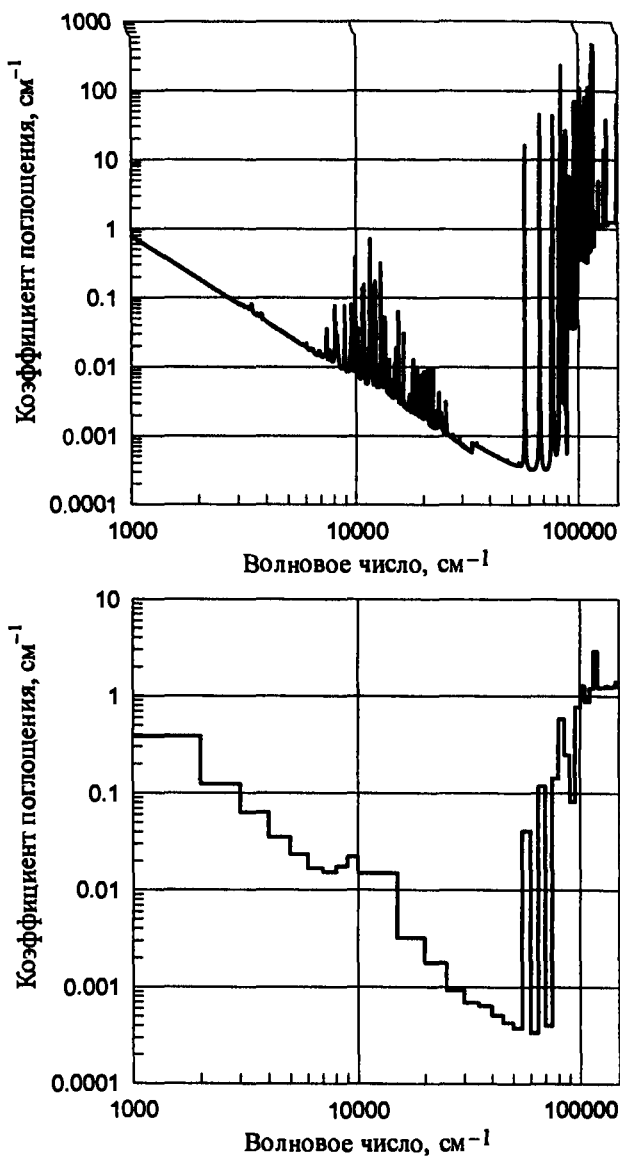


Рис. П.14.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 16000$ К и $p = 1$ атм

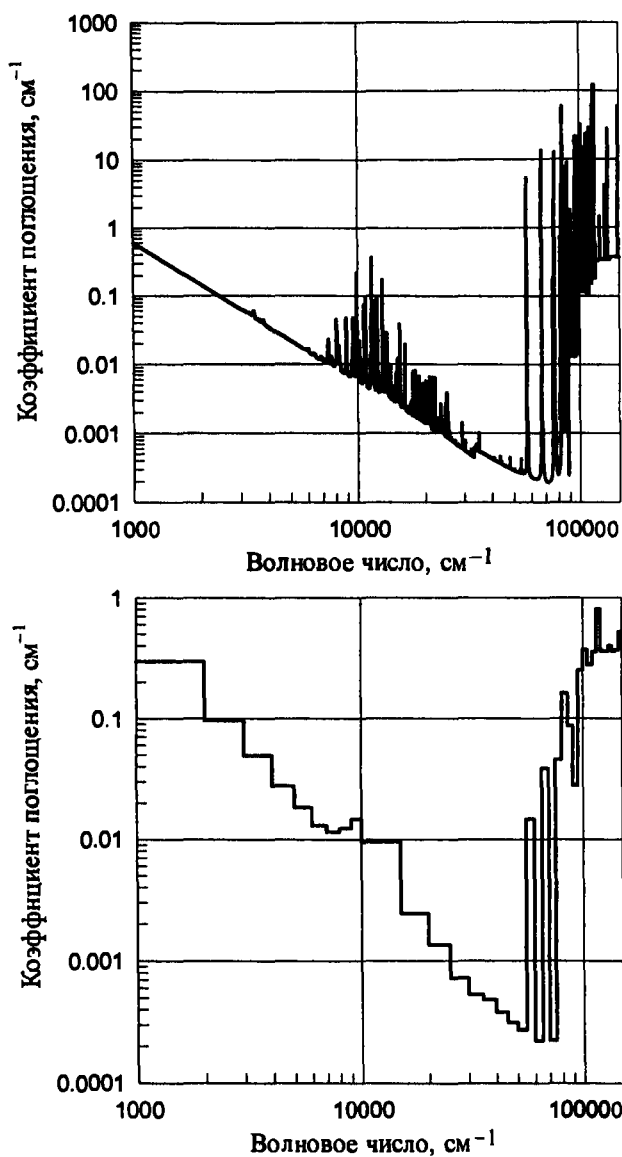


Рис. П.14.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 18000$ К и $p = 1$ атм

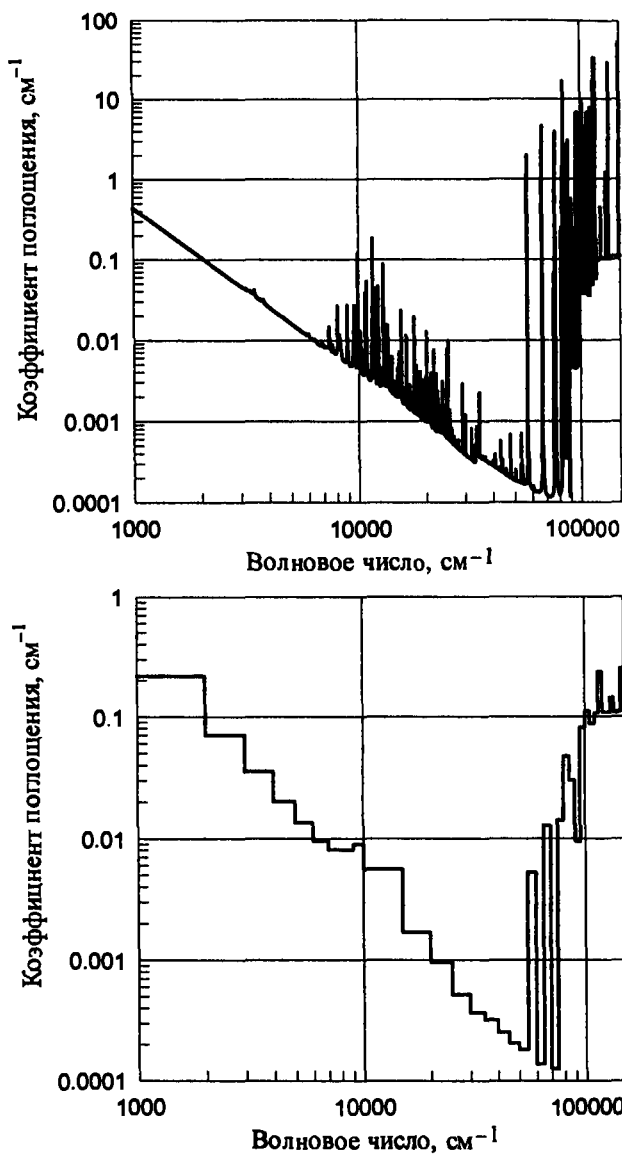


Рис. П.14.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси воздуха и H₂O при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

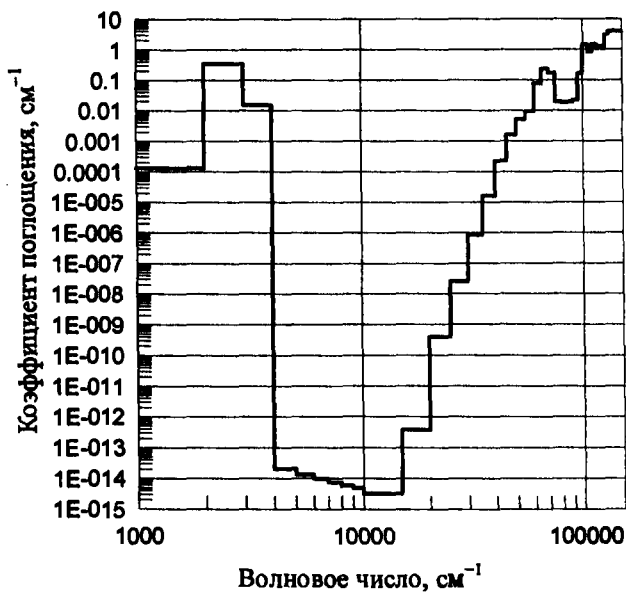
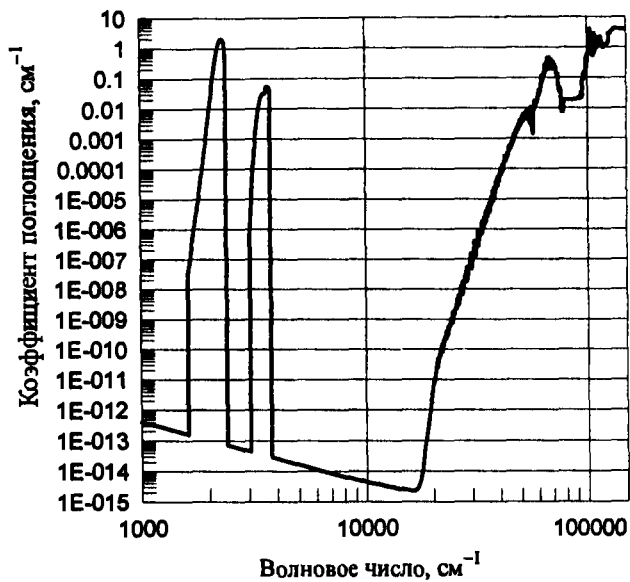


Рис. П.15.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO₂ при $T = 2000$ К и $p = 1$ атм

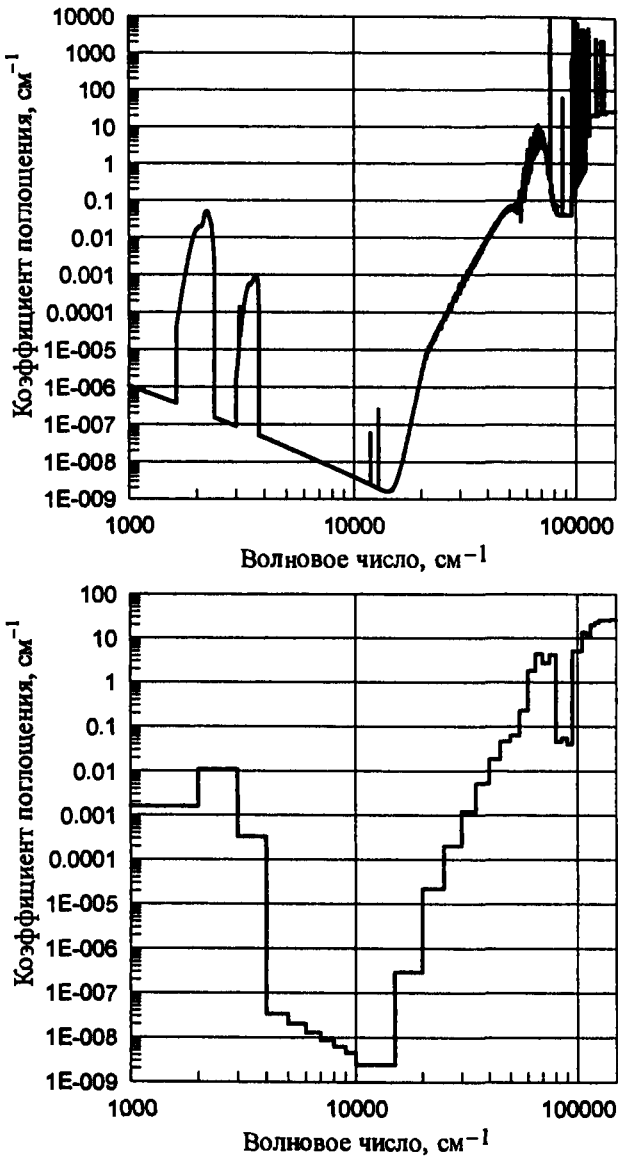


Рис. П.15.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 4000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

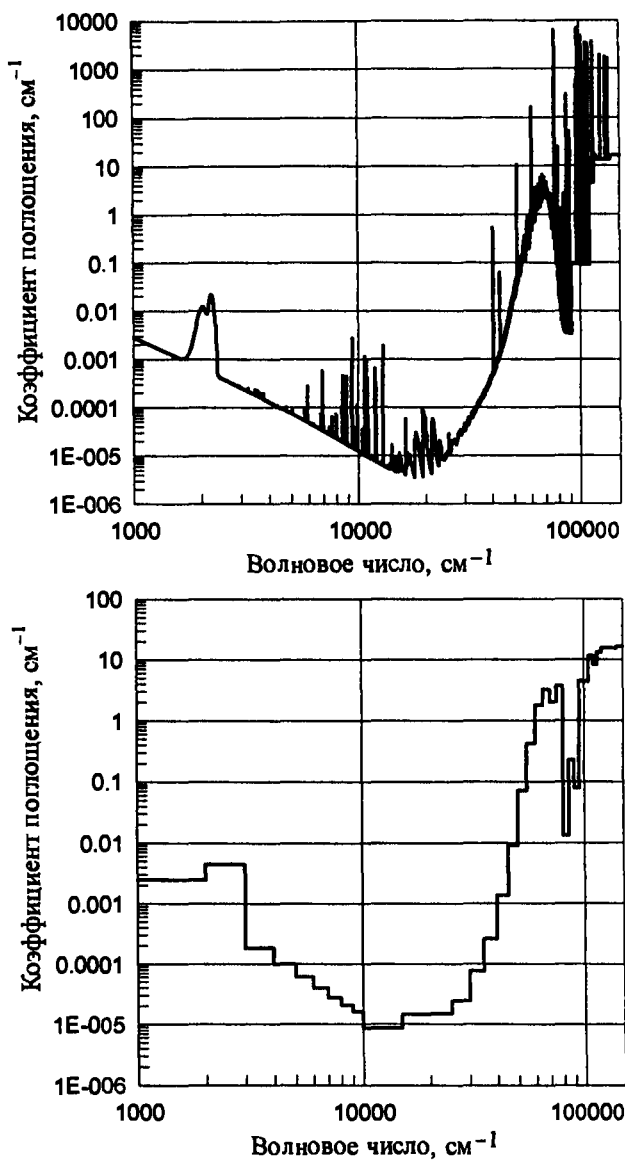


Рис. П.15.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 6000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

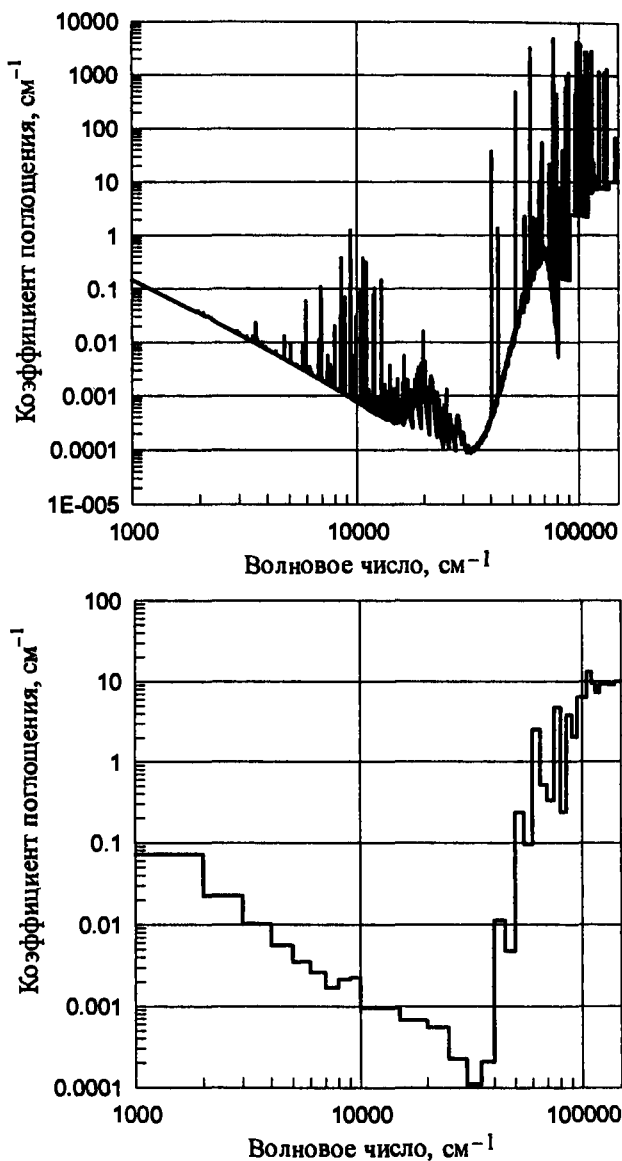


Рис. П.15.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 8000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

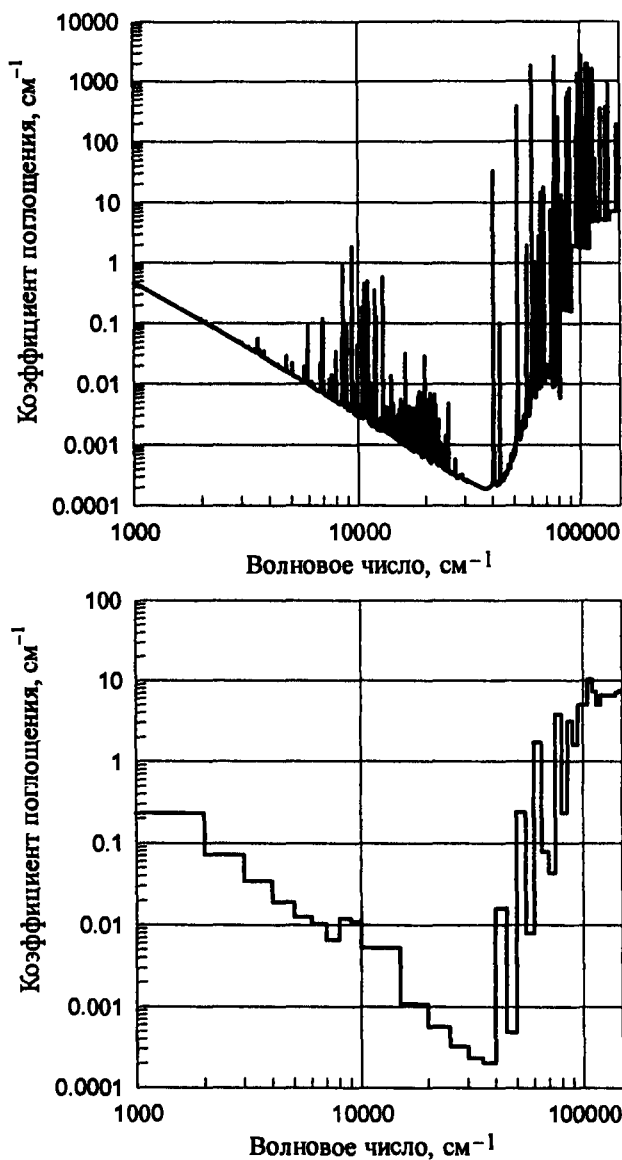


Рис. П.15.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 10000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

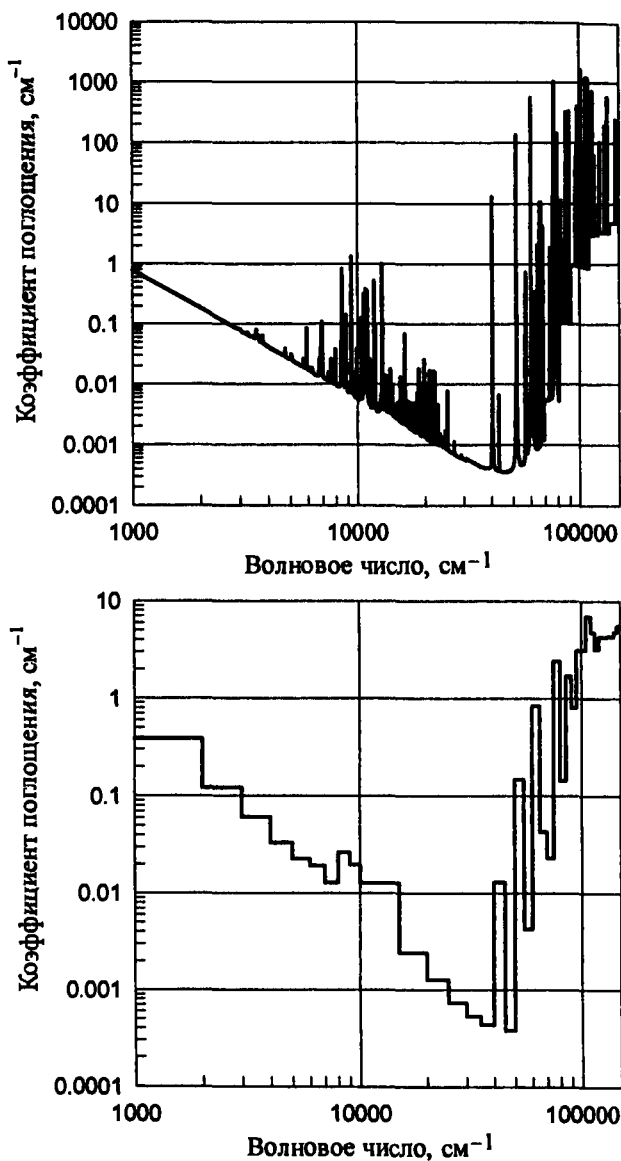


Рис. П.15.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 12000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

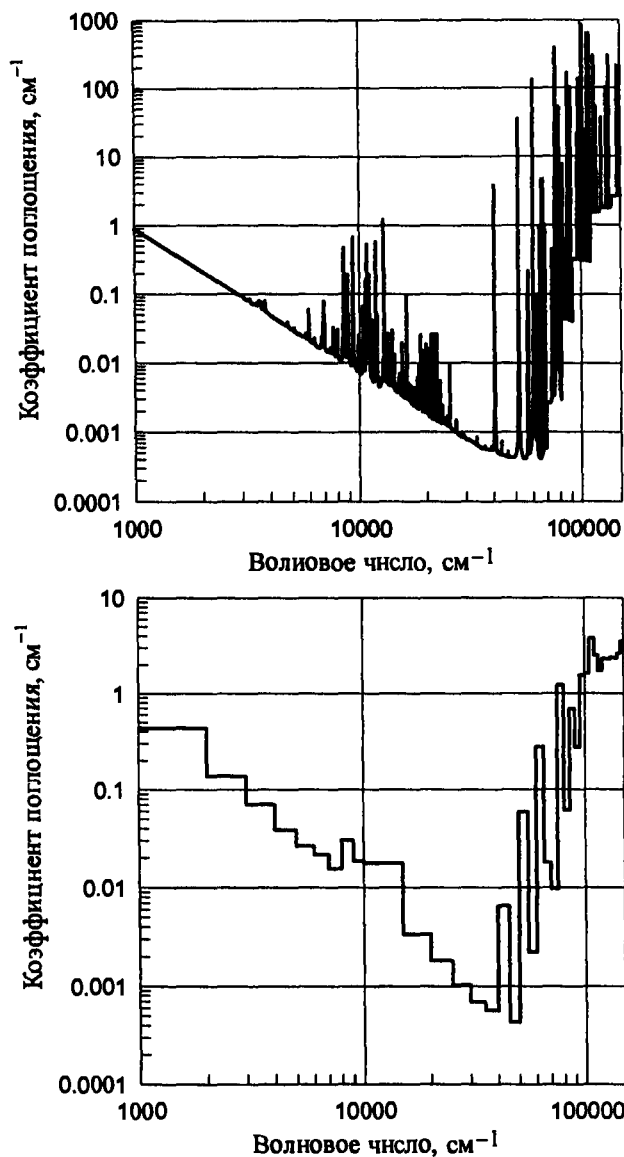


Рис. П.15.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 14000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

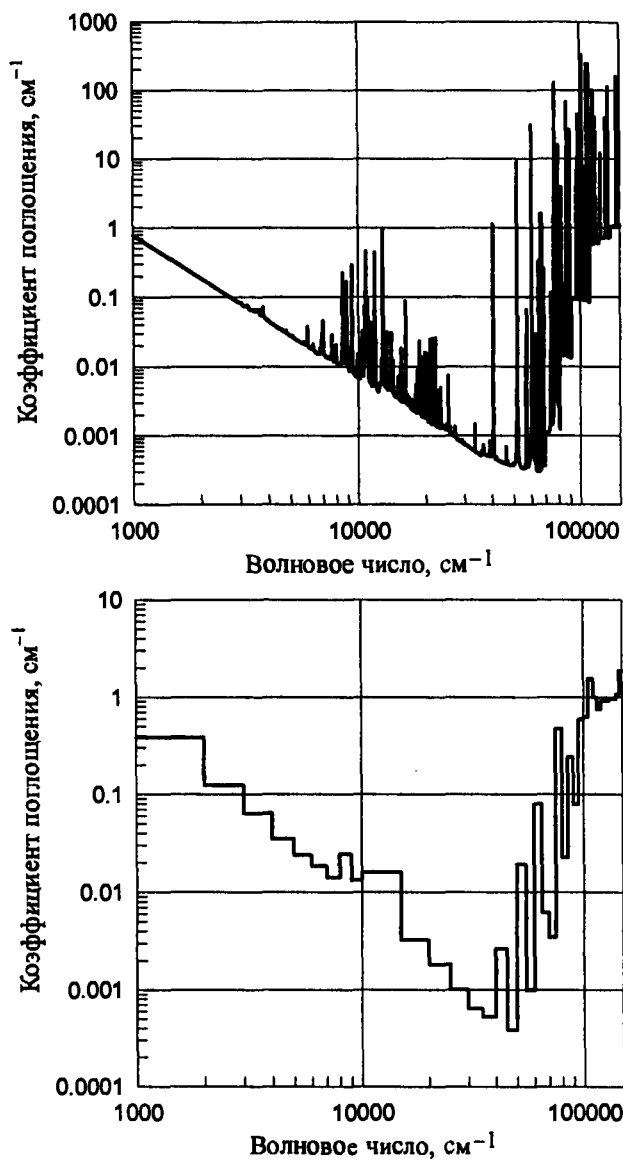


Рис. П.15.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 16000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

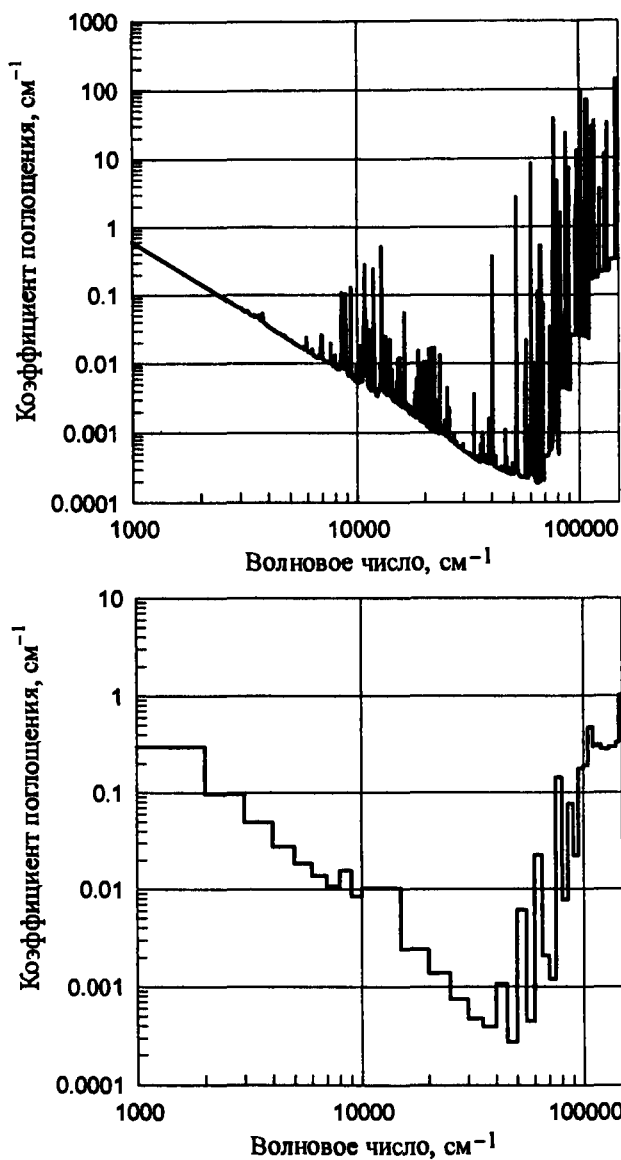


Рис. П.15.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 18000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

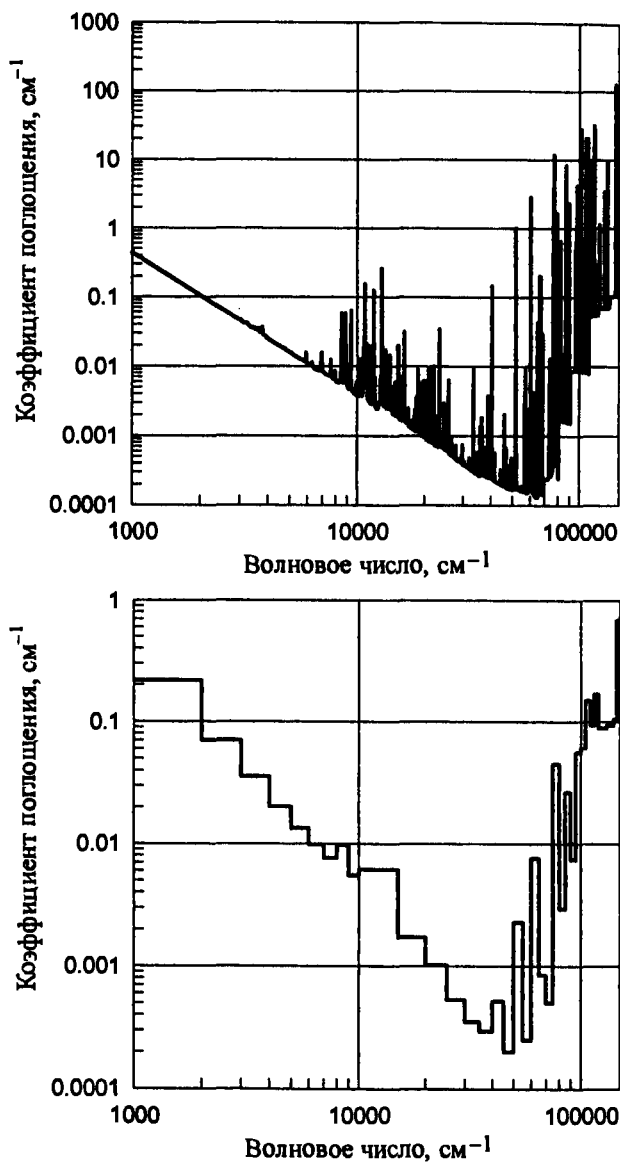


Рис. П.15.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения CO_2 при $T = 20000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

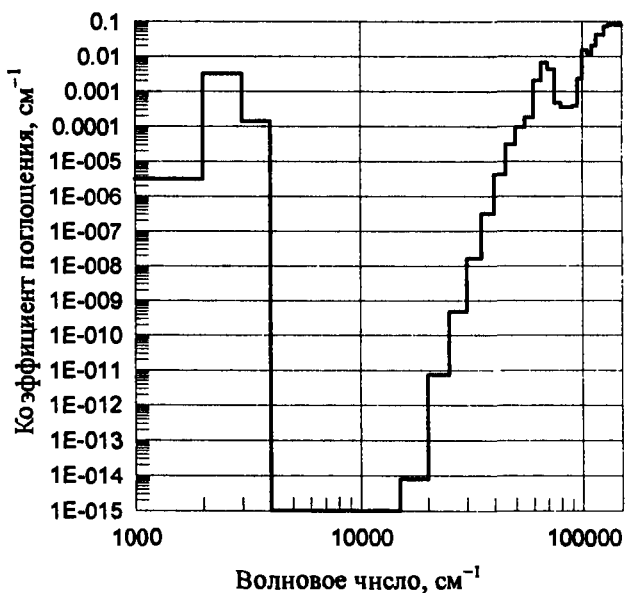
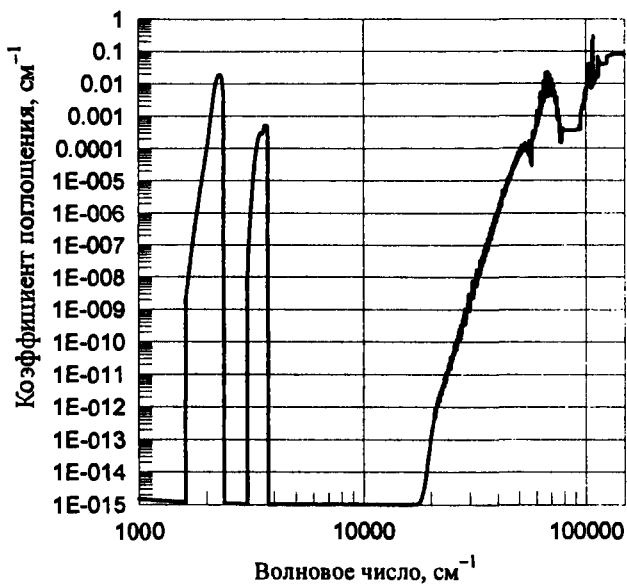


Рис. П.16.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 2000$ К и $p = 0.01$ атм

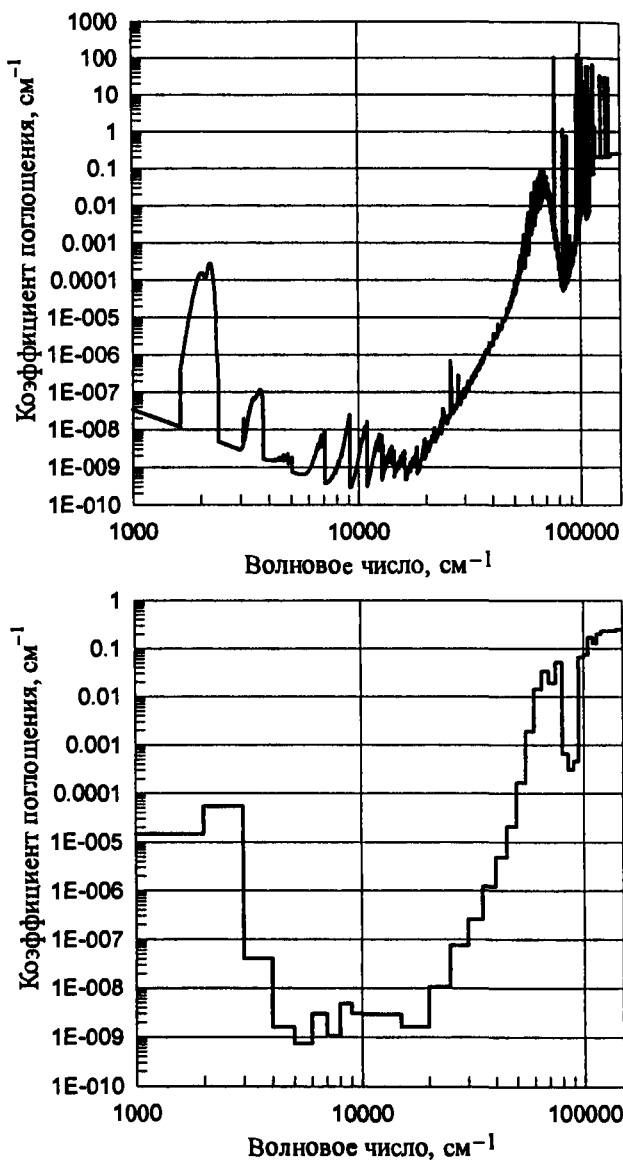


Рис. П.16.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 4000$ К и $p = 0.01$ атм

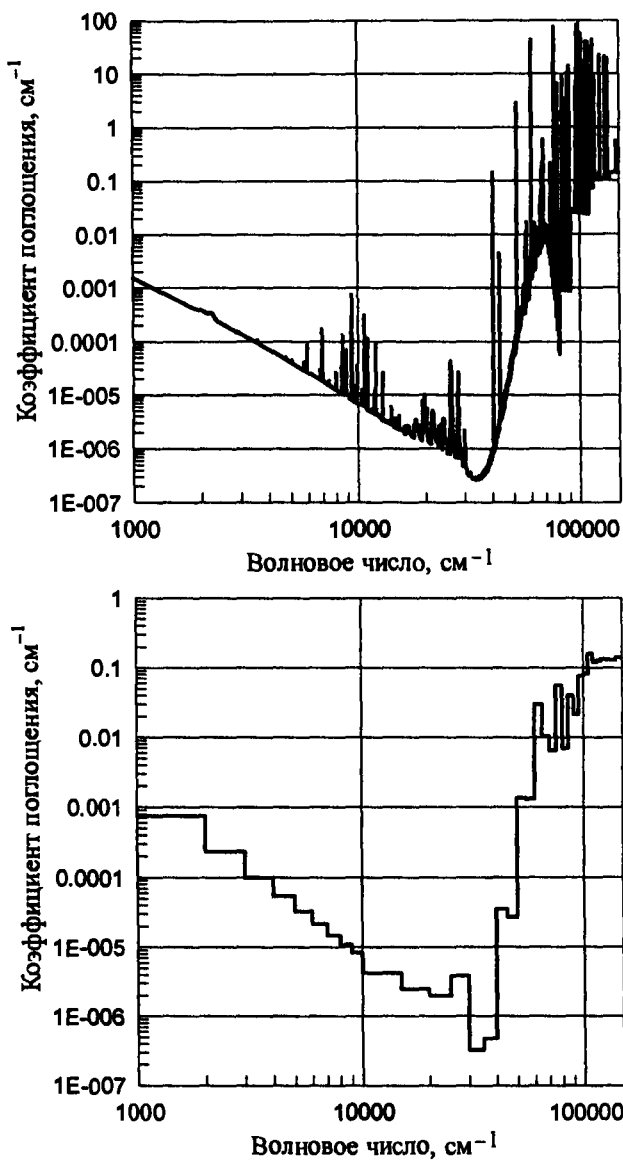


Рис. П.16.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 6000 \text{ K}$ и $p = 0.01 \text{ атм}$

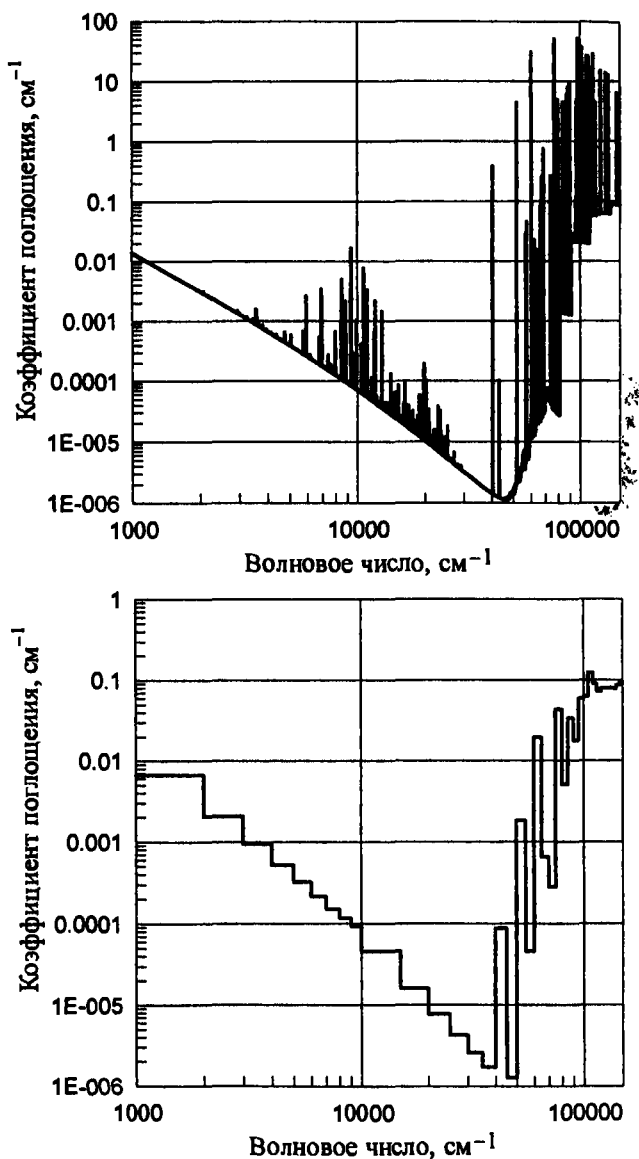


Рис. П.16.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 8000$ К и $p = 0.01$ атм

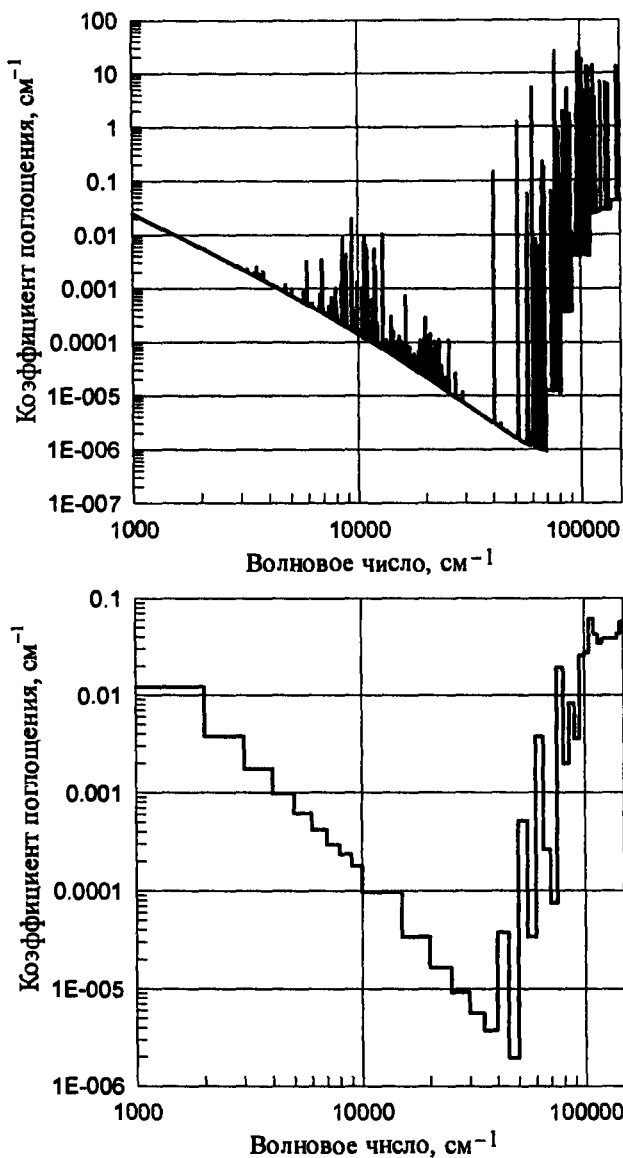


Рис. П.16.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 10000\text{ K}$ и $p = 0.01\text{ атм}$

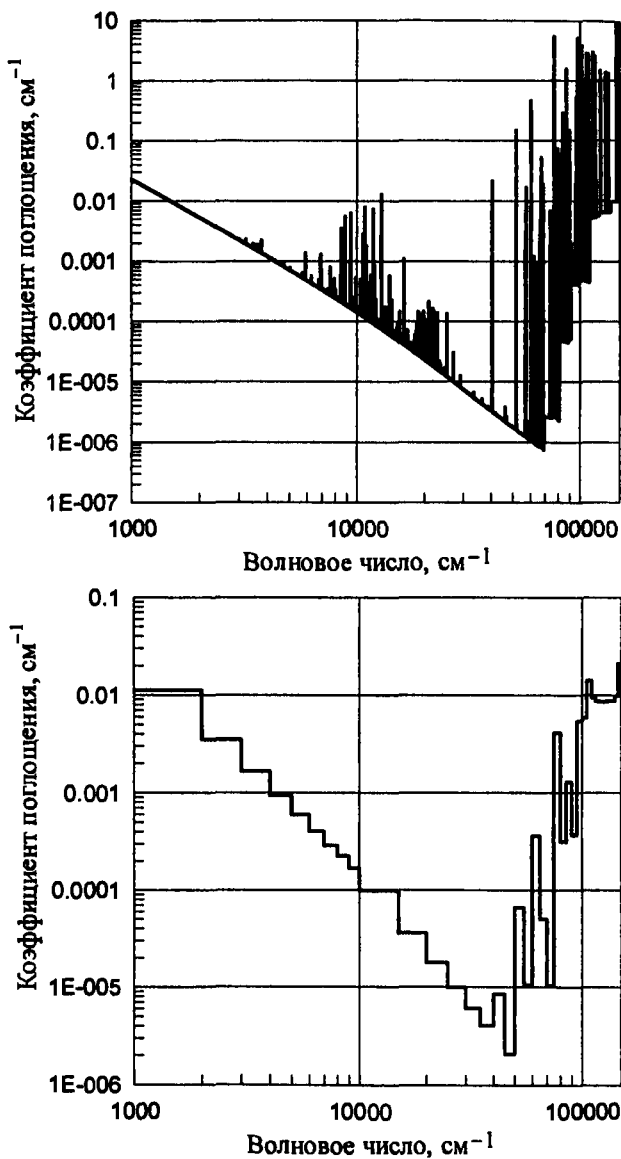


Рис. П.16.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 12000\text{ K}$ и $p = 0.01\text{ атм}$

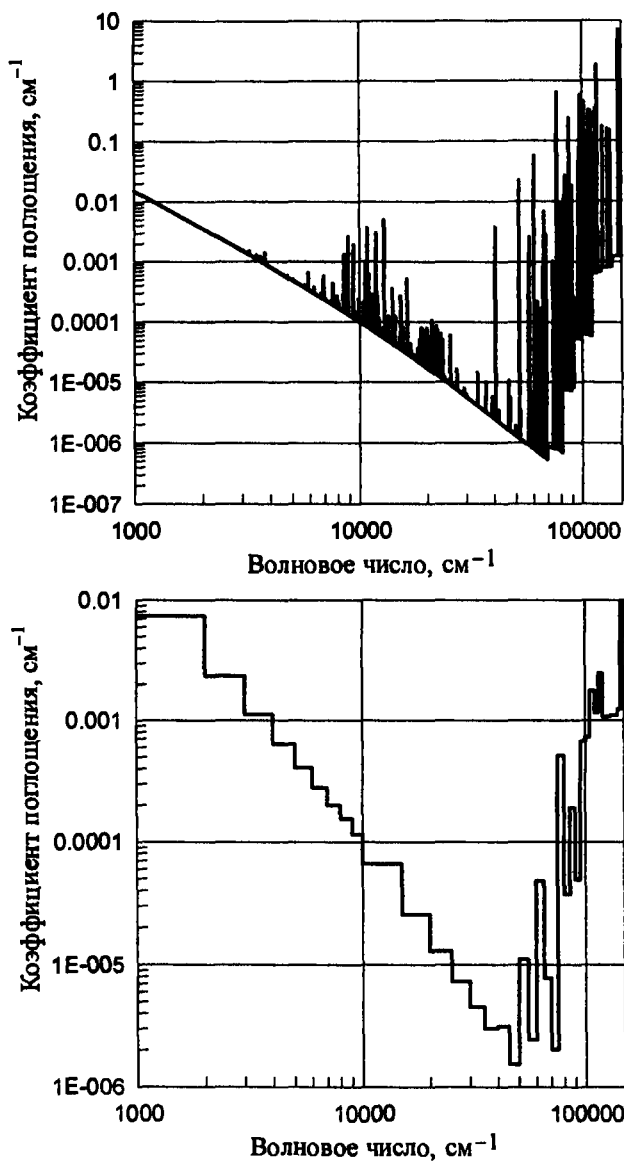


Рис. П.16.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 14000 \text{ K}$ и $p = 0.01 \text{ атм}$

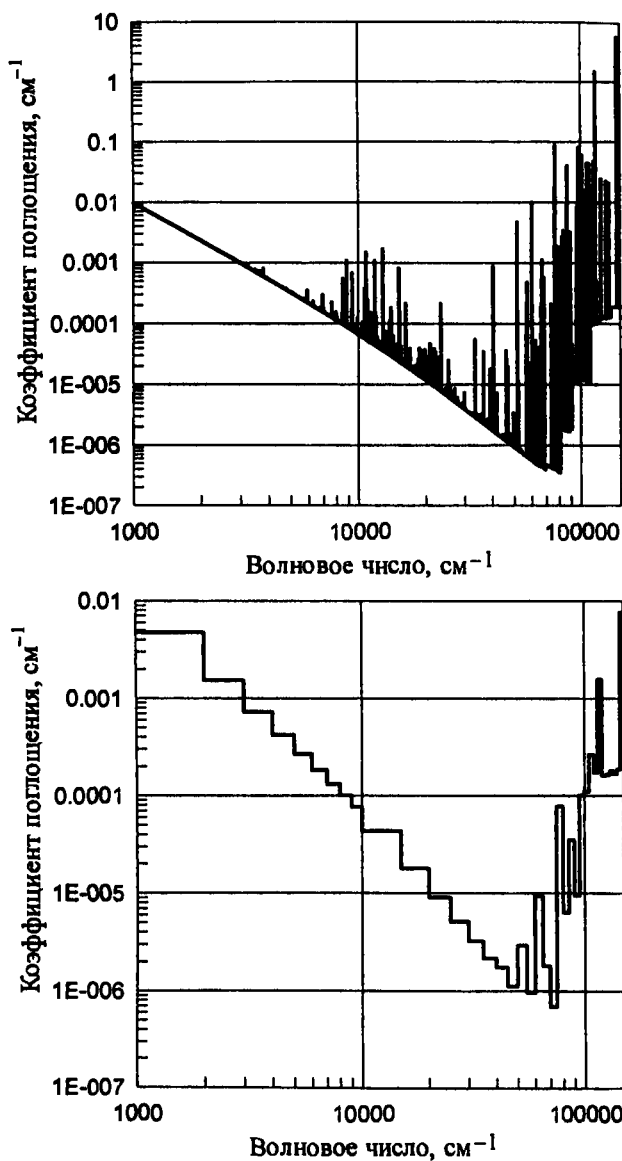


Рис. П.16.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 16000 \text{ K}$ и $p = 0.01 \text{ атм}$

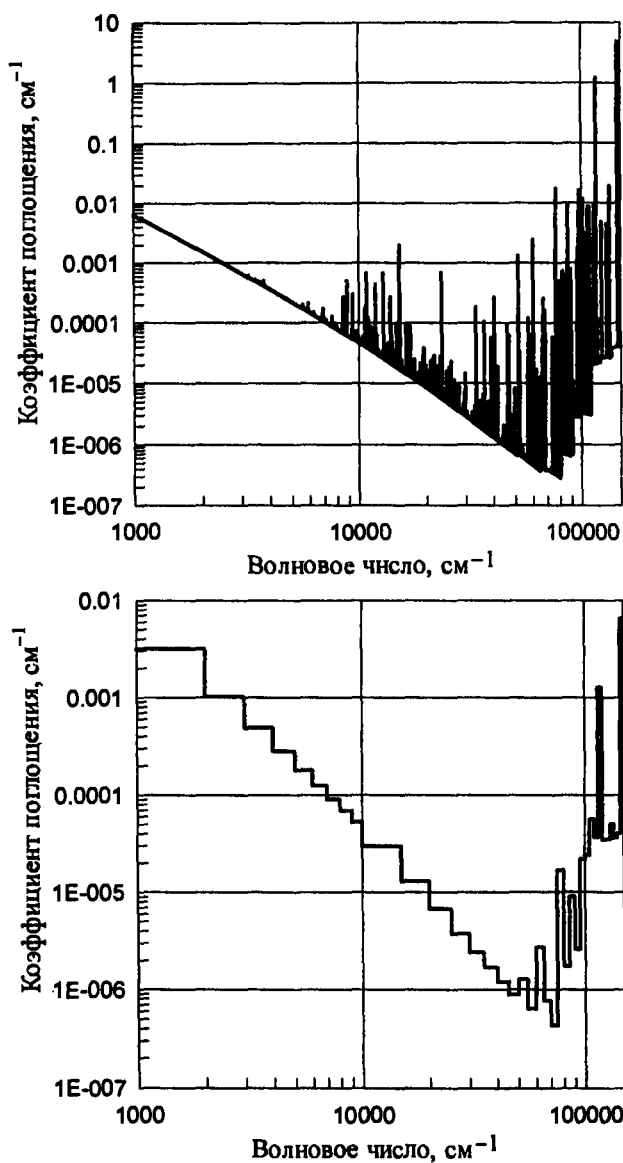


Рис. П.16.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси CO₂-N₂ при $T = 18000$ К и $p = 0.01$ атм

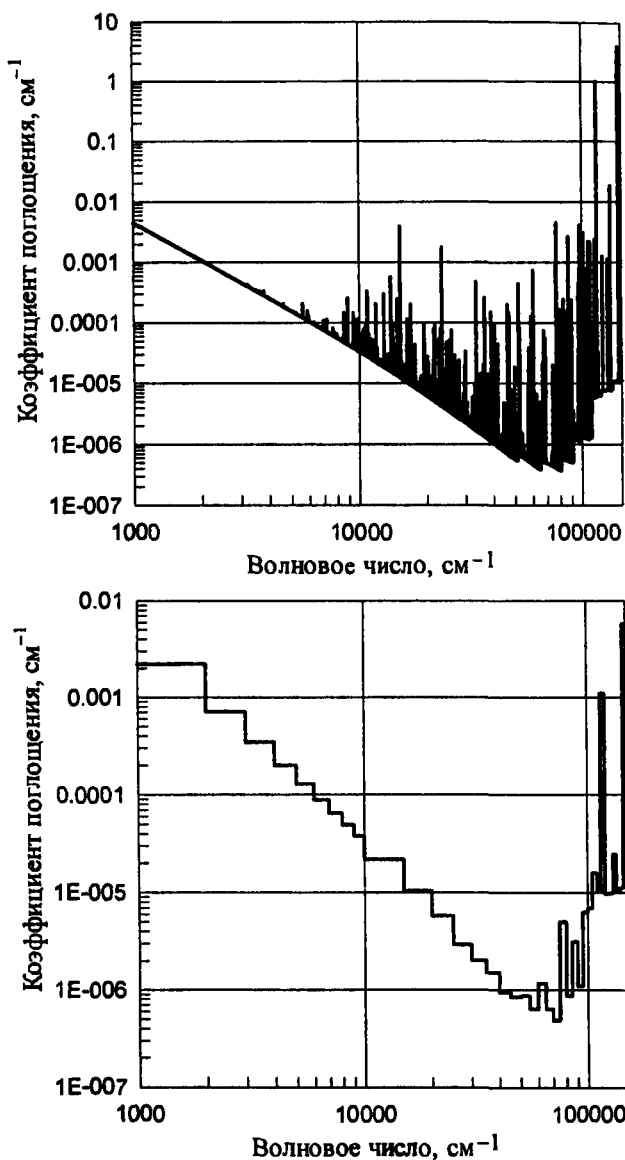


Рис. П.16.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 20000\text{ К}$ и $p = 0.01\text{ атм}$

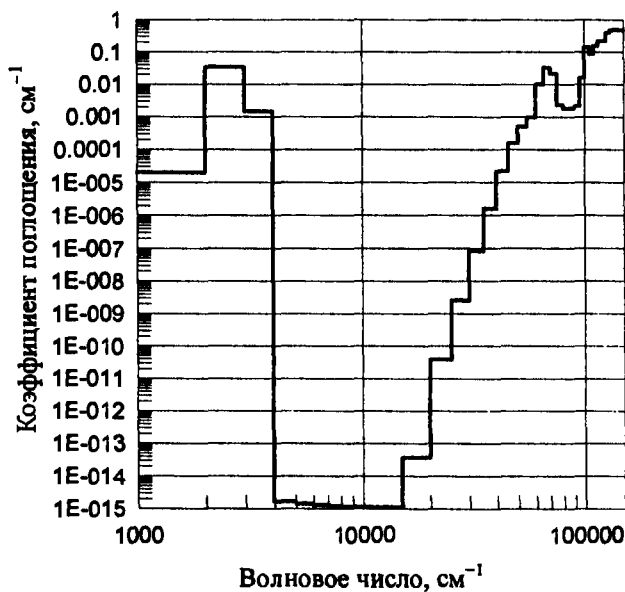
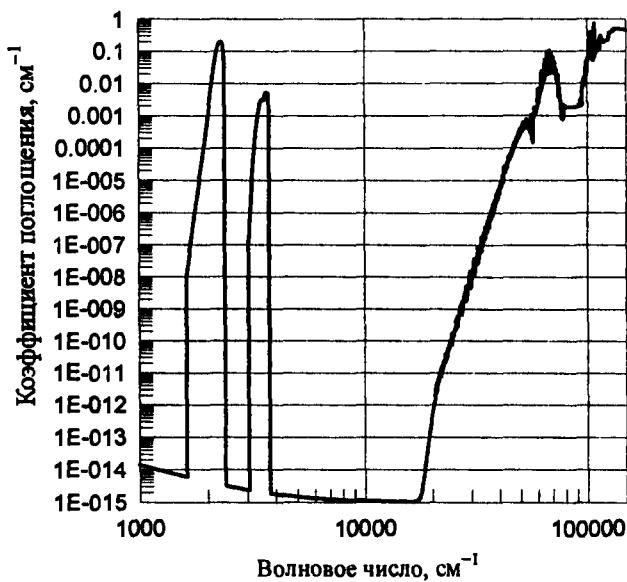


Рис. П.17.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 2000 \text{ K}$ и $p = 0.1 \text{ атм}$

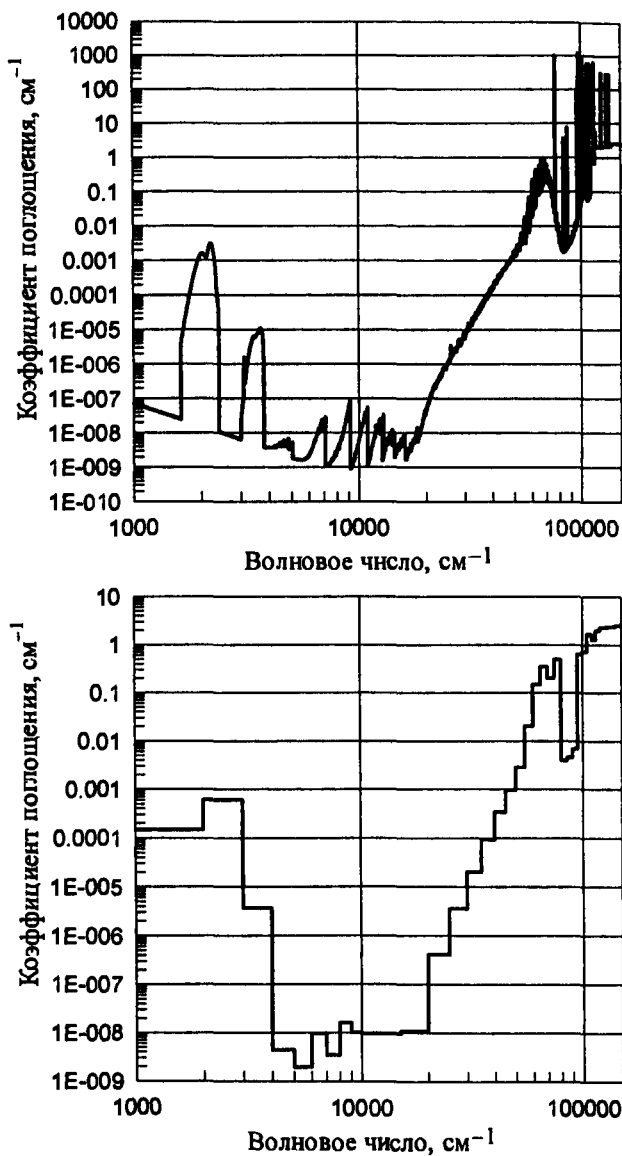


Рис. П.17.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 4000\text{ K}$ и $p = 0.1\text{ атм}$

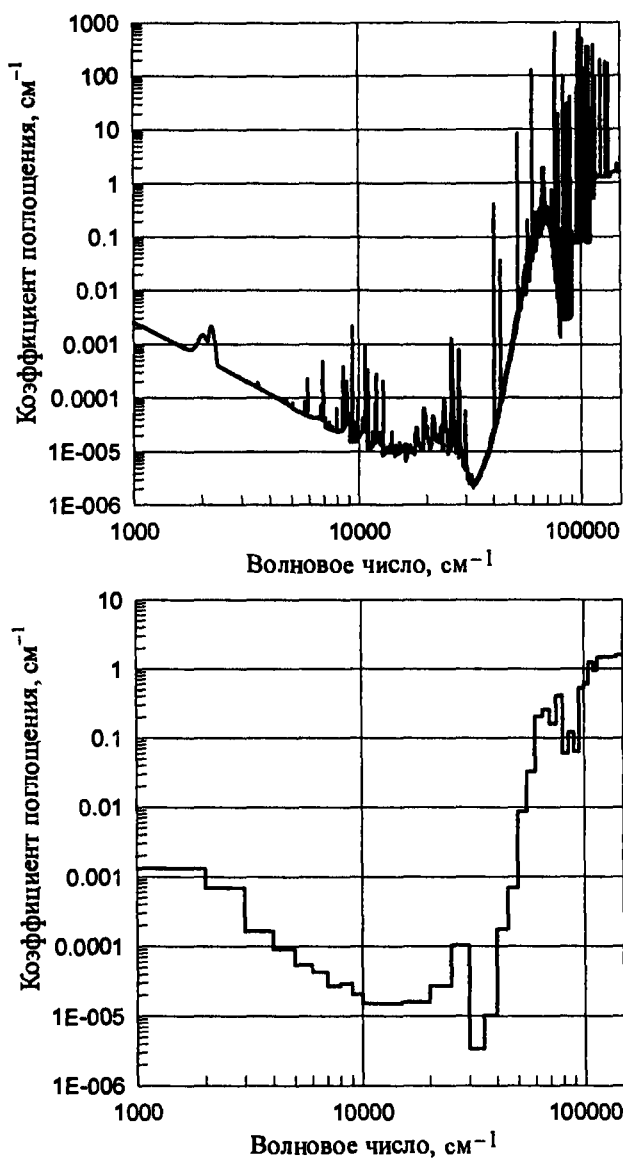


Рис. П.17.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси CO₂-N₂ при $T = 6000$ К и $p = 0.1$ атм

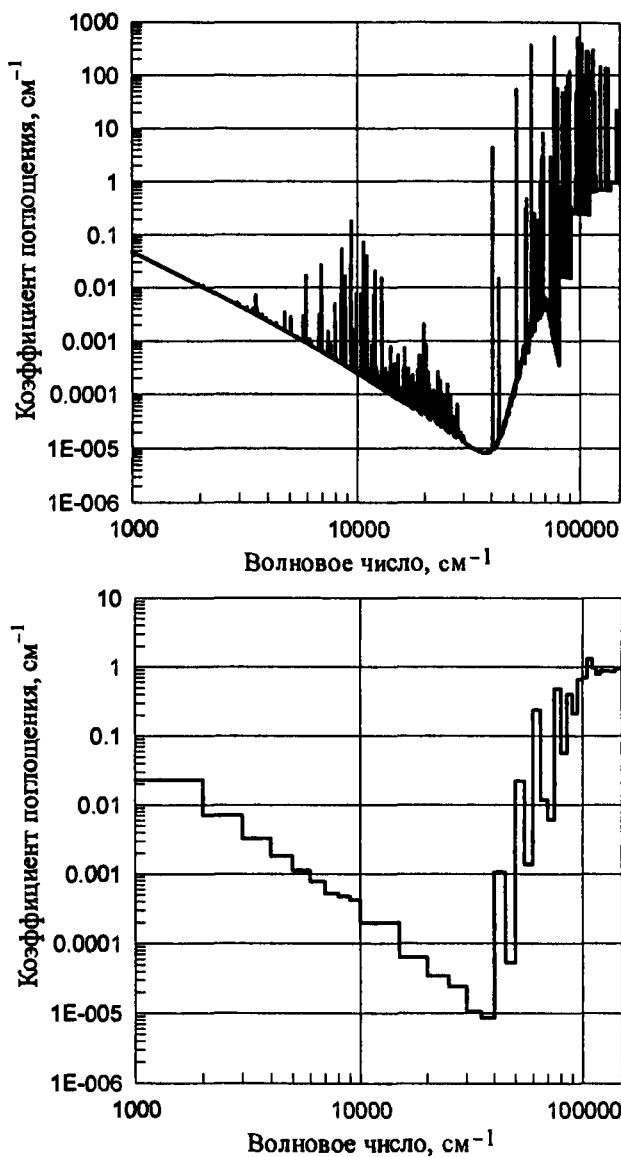


Рис. П.17.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 8000\text{ K}$ и $p = 0.1\text{ атм}$

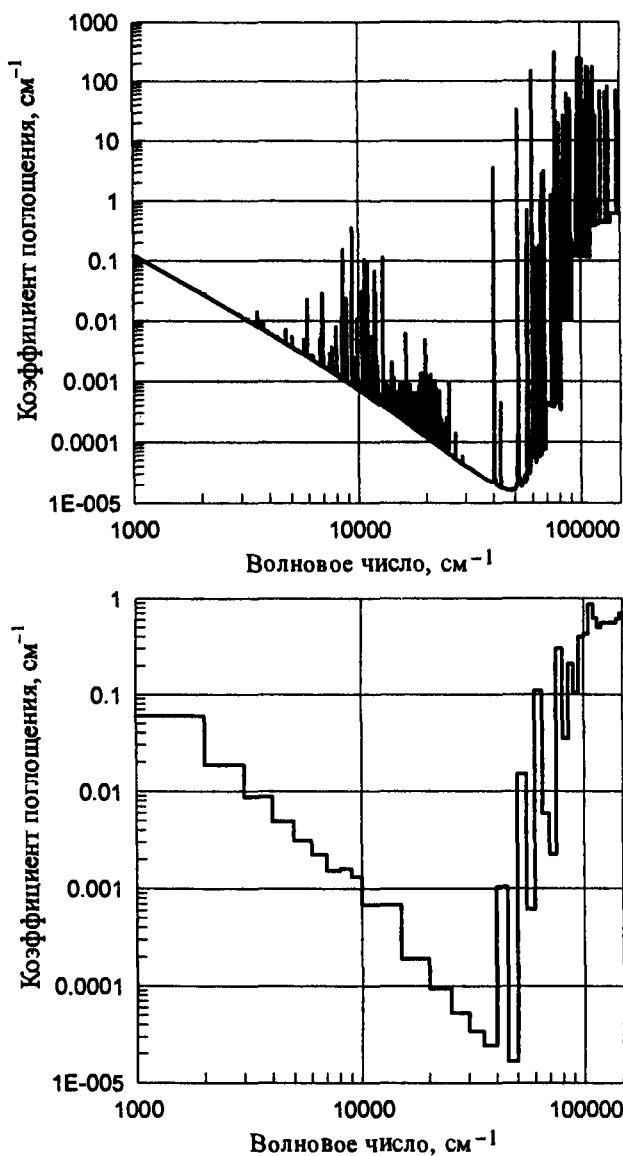


Рис. П.17.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси CO₂-N₂ при $T = 10000$ К и $p = 0.1$ атм

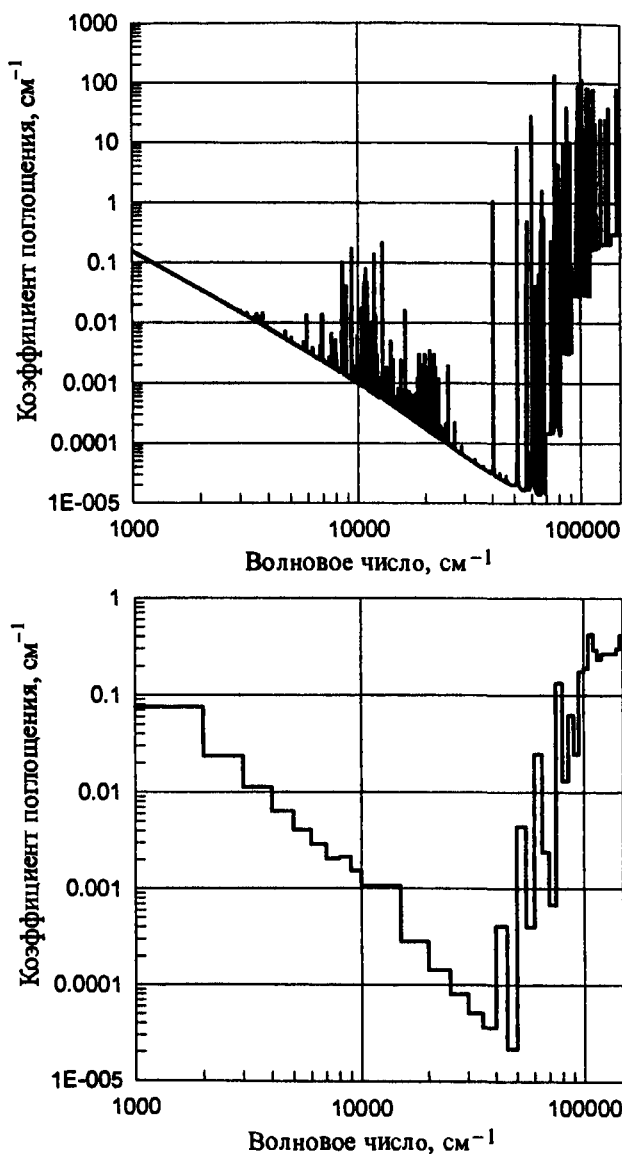


Рис. П.17.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 12000 \text{ K}$ и $p = 0.1 \text{ атм}$

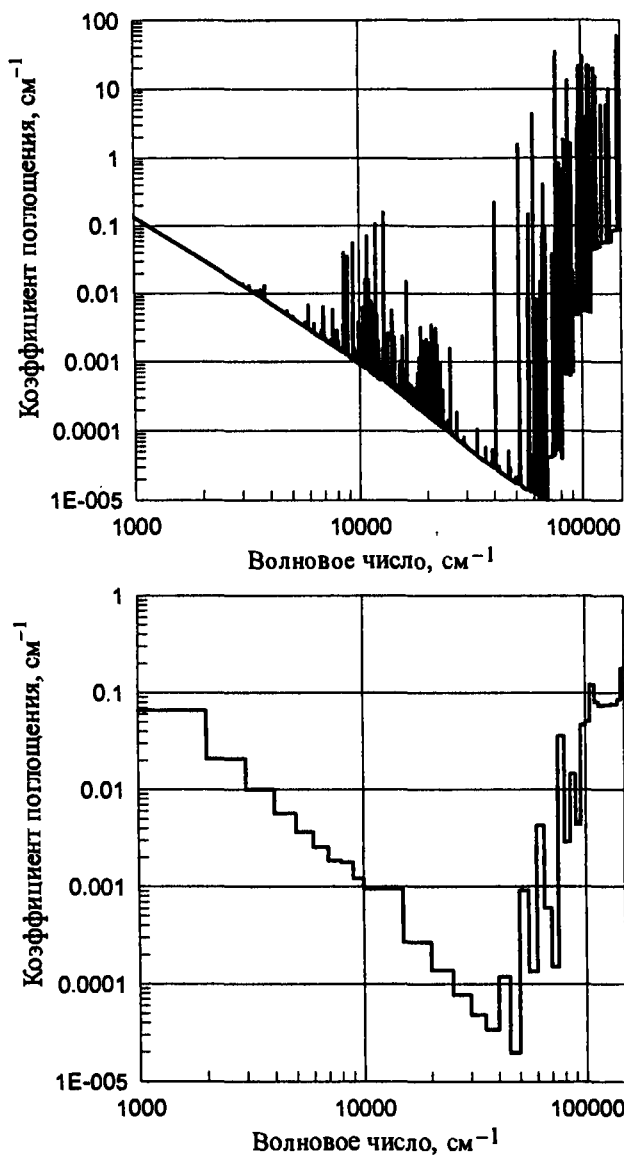


Рис. П.17.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси CO₂-N₂ при $T = 14000$ К и $p = 0.1$ атм

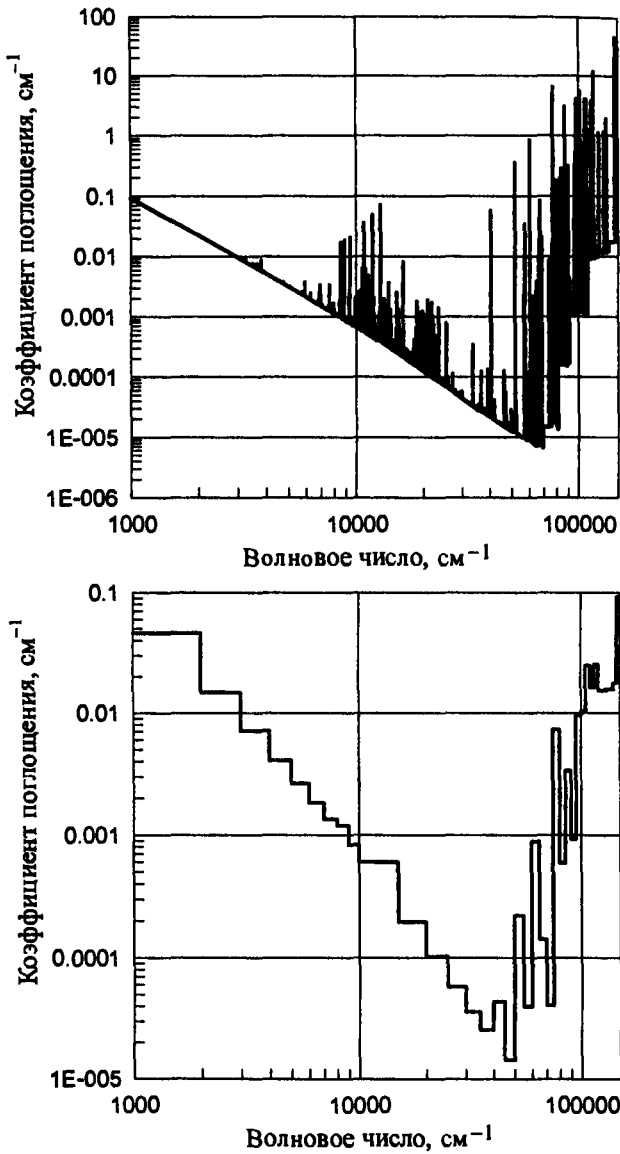


Рис. П.17.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 16000 \text{ K}$ и $p = 0.1 \text{ атм}$

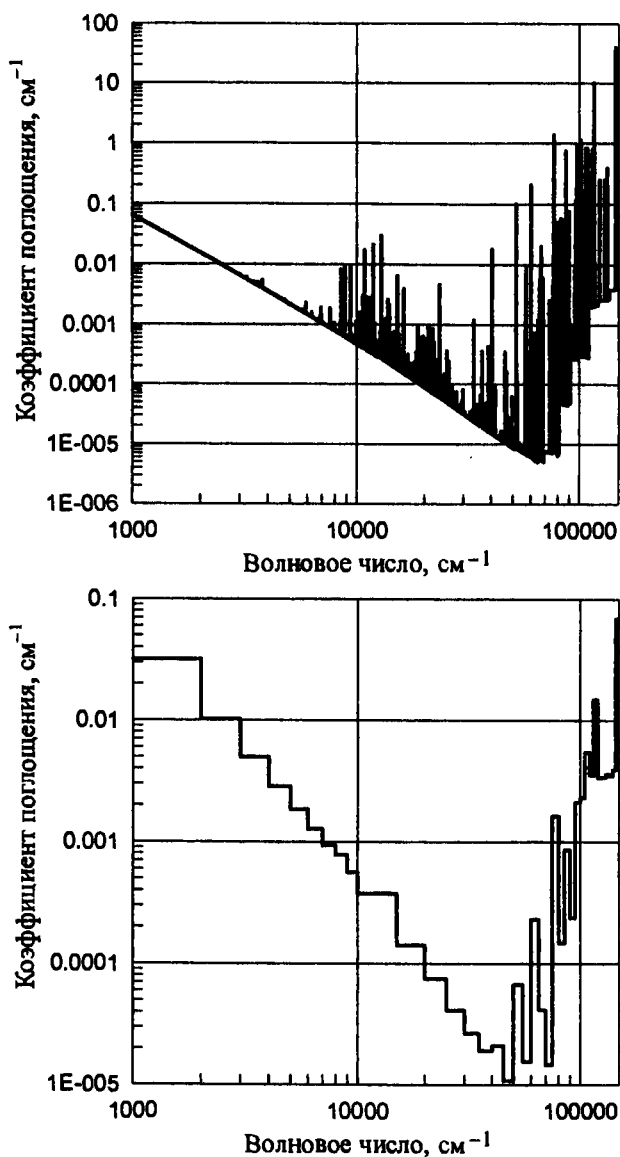


Рис. П.17.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T=18000\text{ K}$ и $p=0.1\text{ атм}$

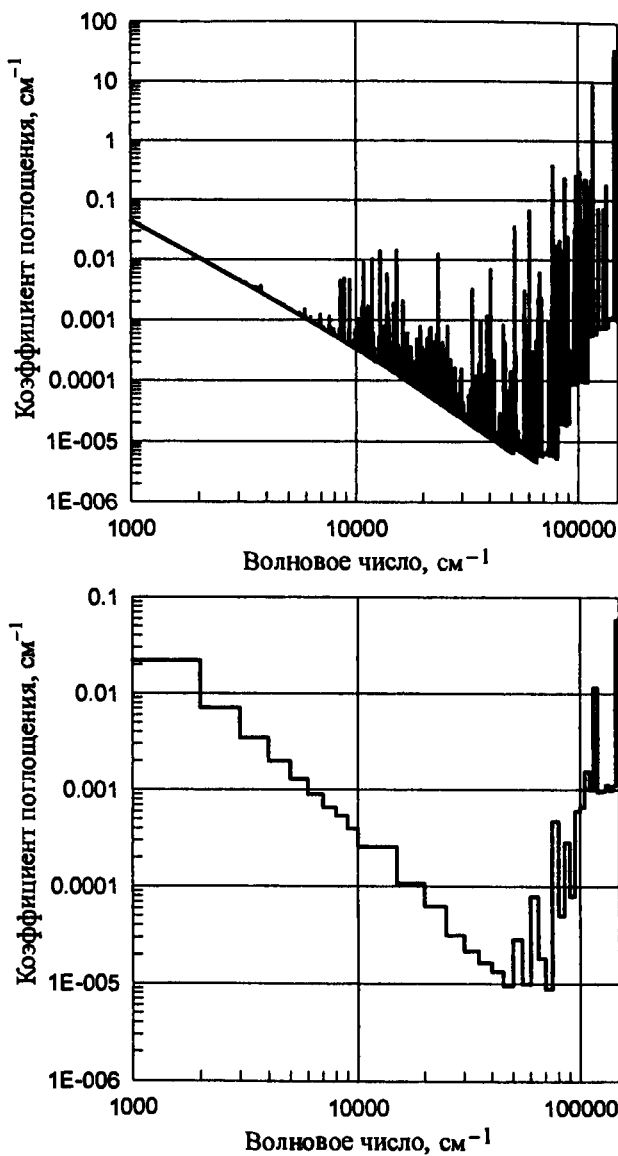


Рис. П.17.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 20000\text{ K}$ и $p = 0.1\text{ атм}$

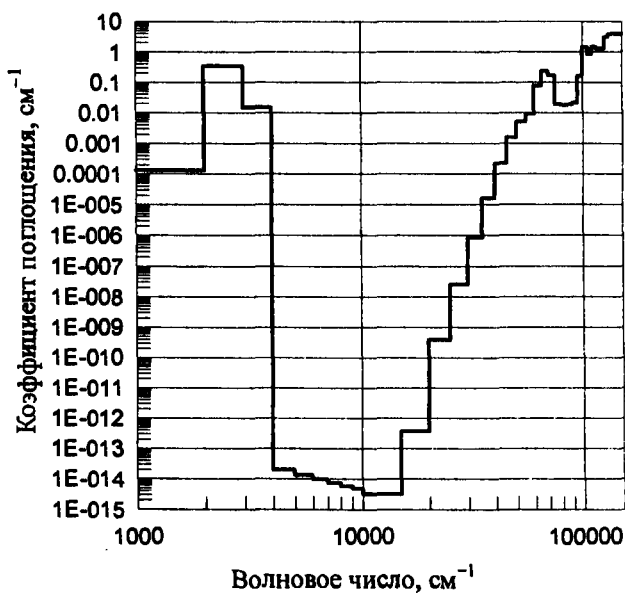
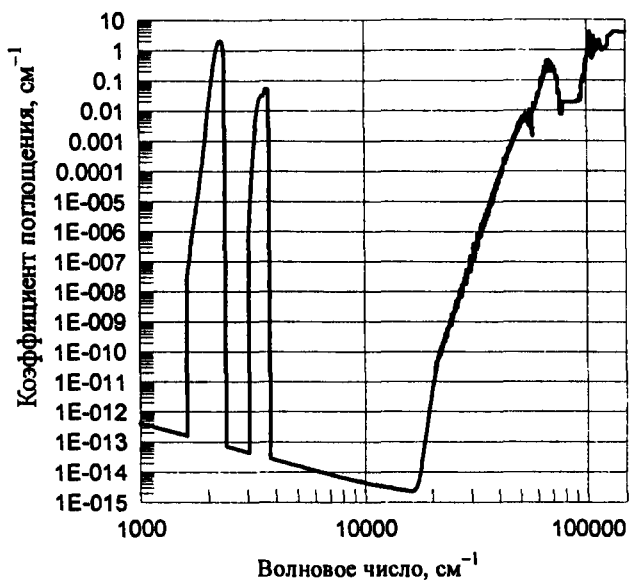


Рис. П.18.1. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 2000$ К и $p = 1$ атм

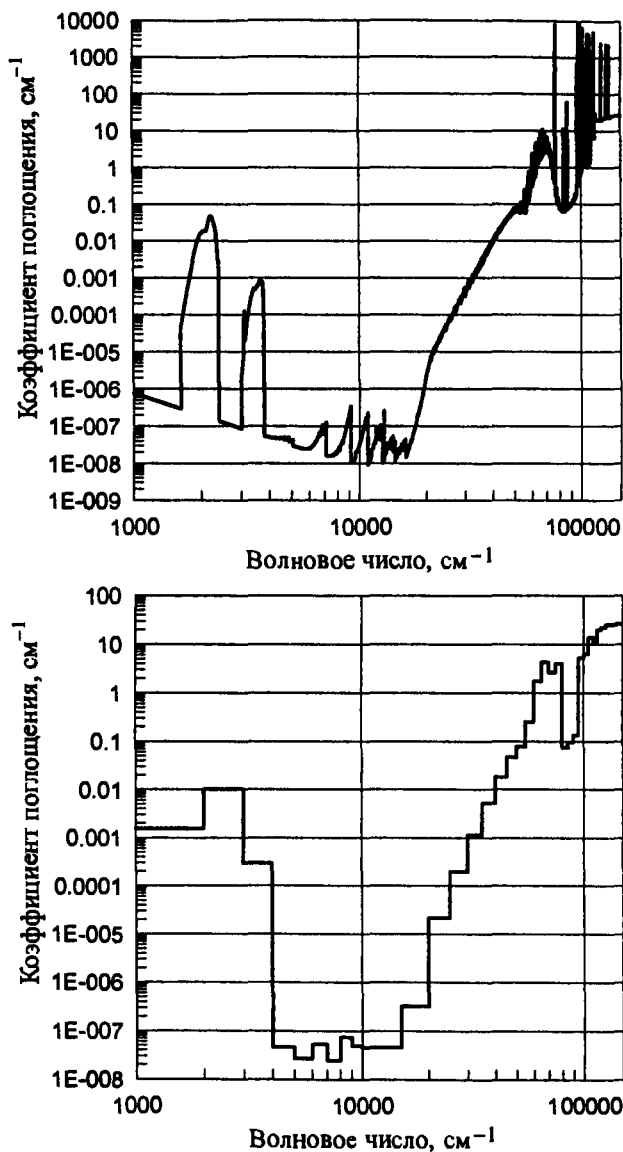


Рис. П.18.2. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 4000\text{ K}$ и $p = 1\text{ атм}$

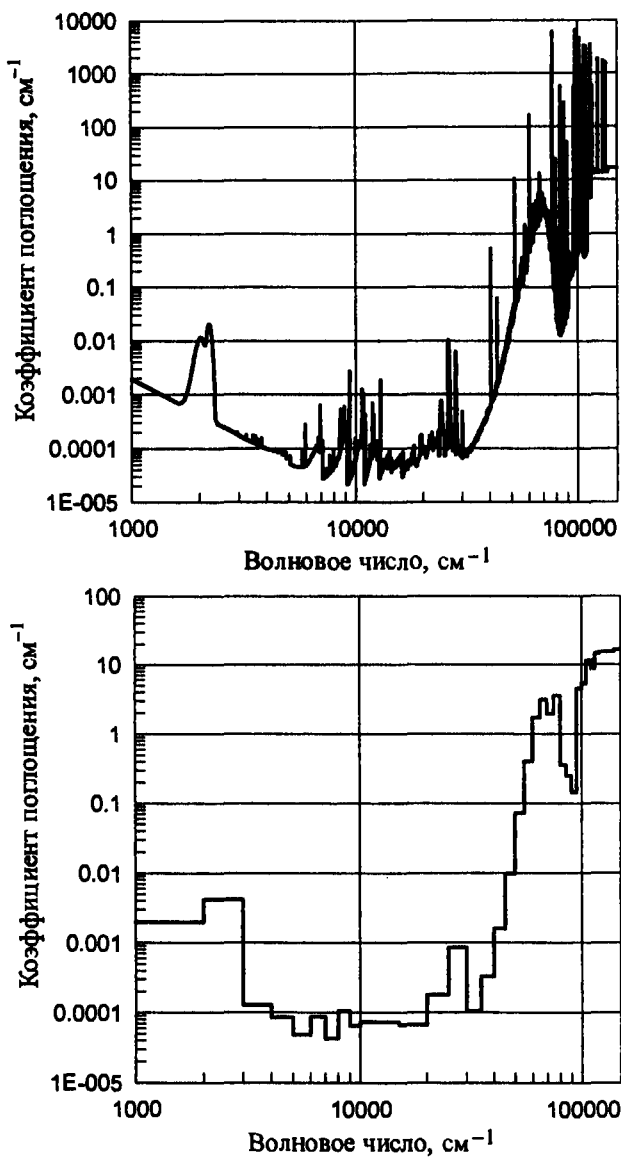


Рис. П.18.3. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси CO₂-N₂ при $T = 6000$ К и $p = 1$ атм

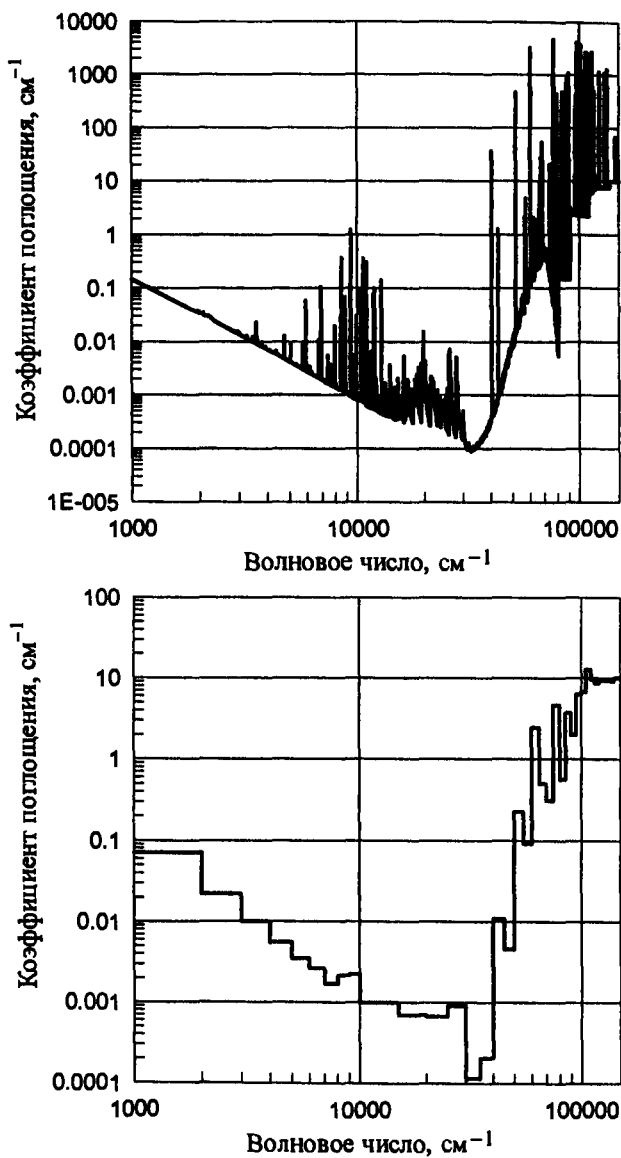


Рис. П.18.4. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 8000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

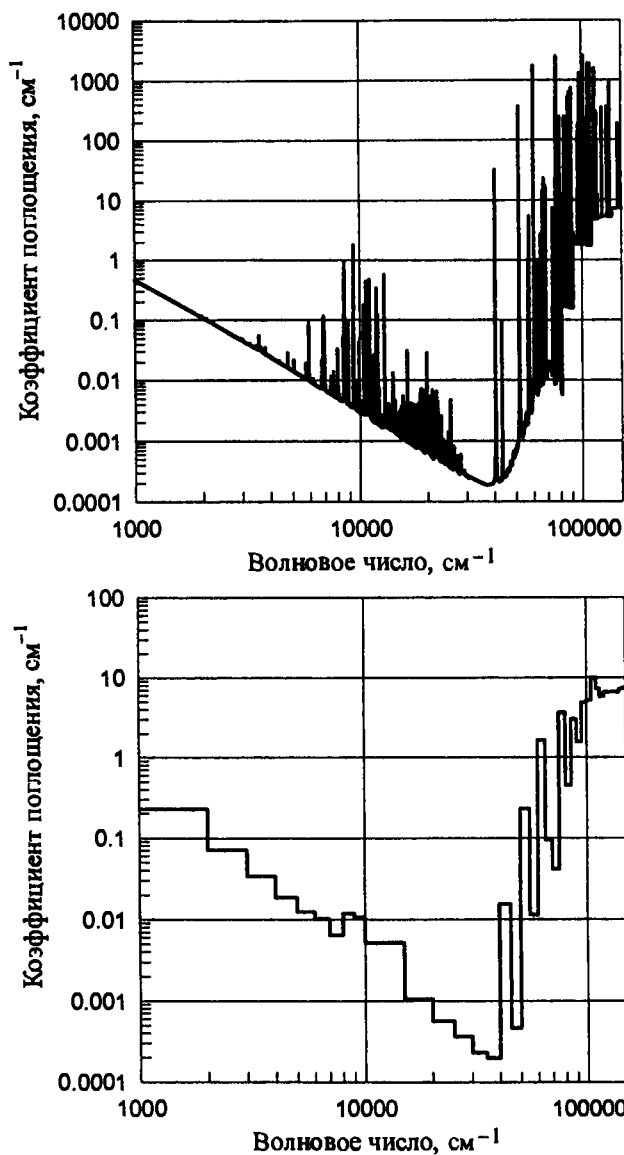


Рис. П.18.5. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси CO₂-N₂ при $T = 10000$ К и $p = 1$ атм

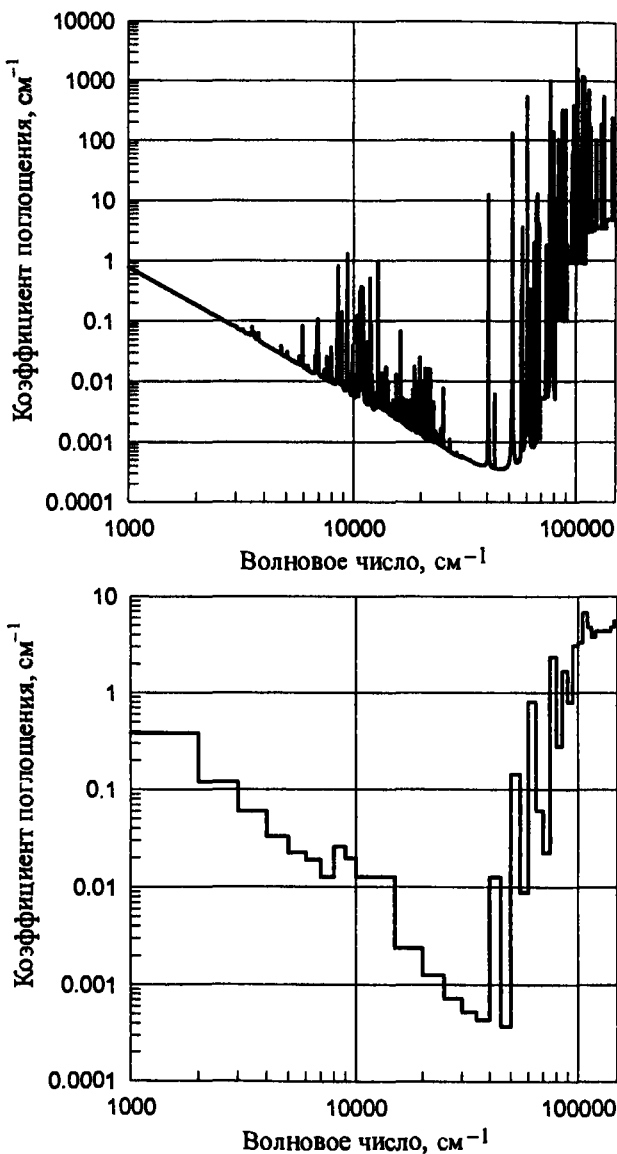


Рис. П.18.6. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 12000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

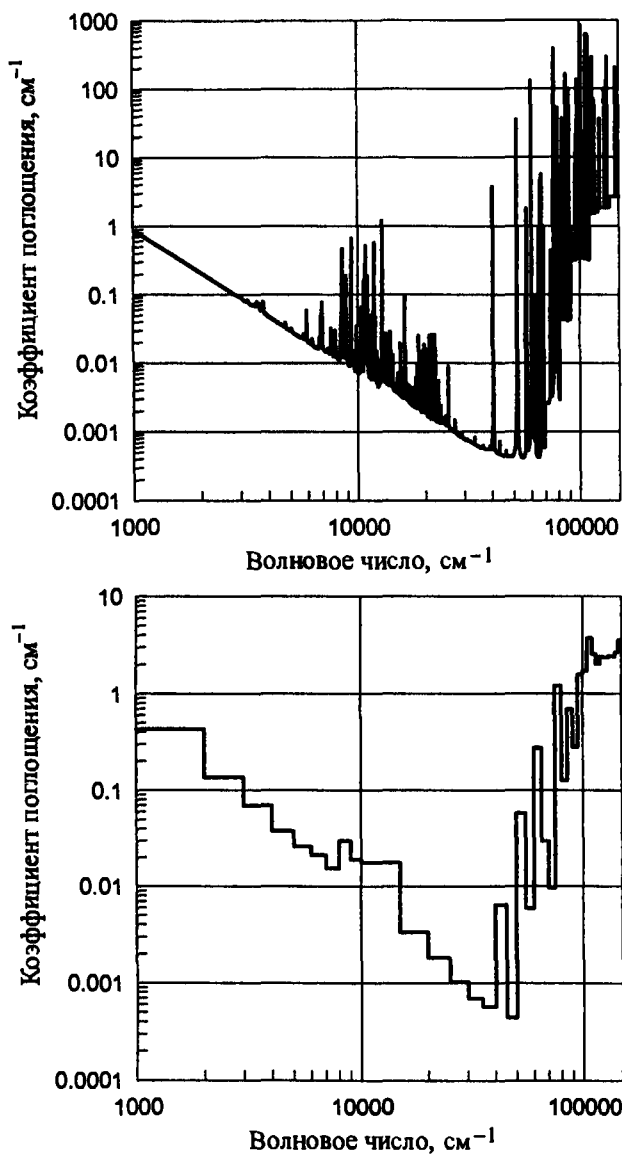


Рис. П.18.7. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси CO₂-N₂ при $T = 14000$ К и $p = 1$ атм

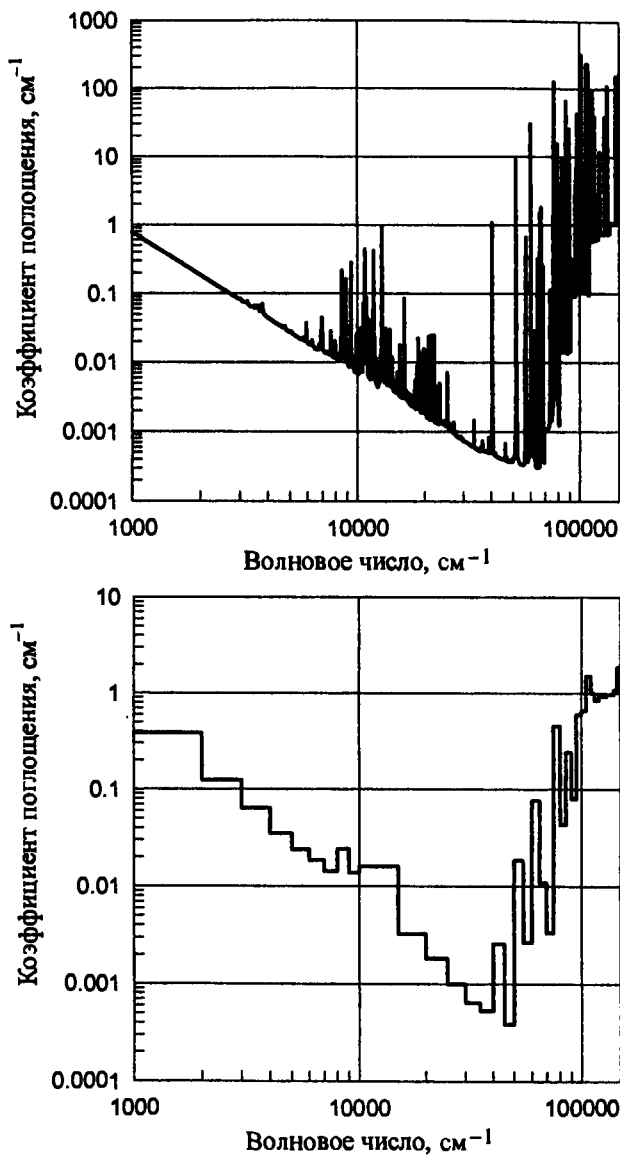


Рис. П.18.8. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 16000 \text{ K}$ и $p = 1 \text{ атм}$

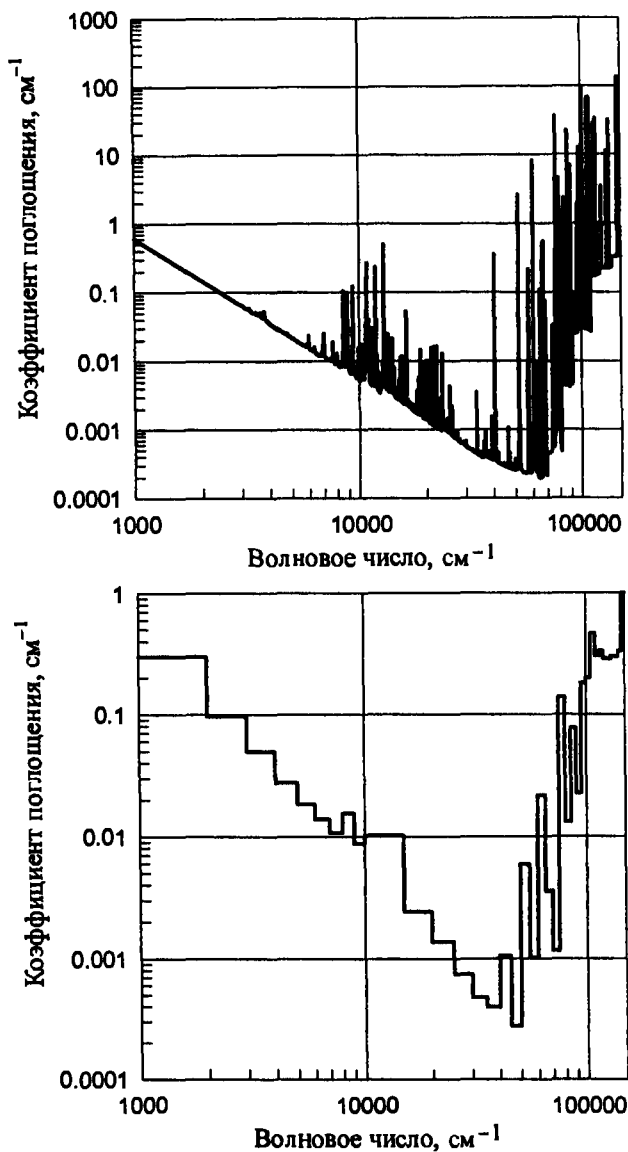


Рис. П.18.9. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси CO₂-N₂ при $T = 18000$ К и $p = 1$ атм

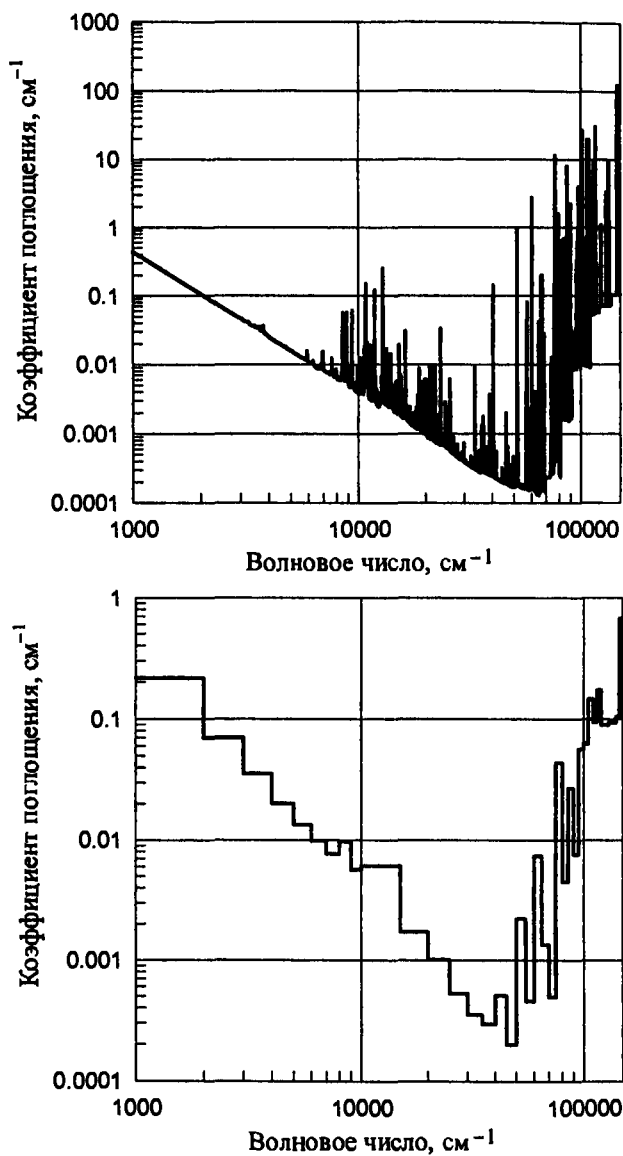


Рис. П.18.10. Спектральный и групповой коэффициенты поглощения смеси $\text{CO}_2\text{-N}_2$ при $T = 20000$ К и $p = 1$ атм

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ*

- Авилова И.В., Биберман Л.М., Воробьев В.С. и др.* Оптические свойства горячего воздуха. М.: Наука. 1970. 320 с.
- Авилова И.В., Биберман Л.М., Воробьев В.С. и др.* Оптические свойства горячих газов. Смеси $\text{CO}_2 - \text{N}_2$ // ТВТ. 1970. Т. 8. № 1. С. 1 – 11. (6).
- Агафонов В.П., Вертушкин В.К., Гладков А.А. и др.* Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике. М.: Машиностроение. 1972. 344 с.
- Адзерихо К.С., Ноготов Е.Ф., Трофимов В.П.* Радиационный теплообмен в двухфазных средах. Минск: Наука и техника. 1987. 166 с.
- Алехин Д.С., Климов Д.М., Суржиков С.Т.* RKR-потенциалы межъядерного взаимодействия двухатомных молекул атмосфер планет//ТВТ. 2005 (в печати)
- Амбарцумян В.А.* Курс астрофизики и звездной астрономии. Ч.1. ОНТИ. 1934.
- Амбарцумян В.А., Мустель Э.Р., Северный А.Б.* Теоретическая астрофизика. М.: Гостехиздат. 1952. 635 с.
- Амусья М.Я.* Атомный фотоэффект. М.: Наука. 1987. 272 с.
- Амусья М.Я., Чернышева Л.В.* Автоматизированная система исследования структуры атомов. Л.: Наука. 1983. 180 с.
- Ачасов О.В., Кудрявцев Н.Н., Новиков С.С. и др.* Диагностика неравновесных состояний в молекулярных лазерах. Минск: Наука и техника. 1985. 208 с.
- Бай Ши-и.* Динамика излучающего газа. М.: Мир. 1968. 323 с.
- Баранже М.* Уширение спектральных линий в плазме. В кн.: Атомные и молекулярные процессы. М.: Мир. 1964. С. 429 – 477.
- Барановский В.И., Братцев В.Ф., Панин А.И. и др.* Методы расчета электронной структуры атомов и молекул. Л.:Изд-во ЛГУ. 1976. 204 с.
- Батенин В.М., Климовский И.М., Лысов Г.В., Троицкий В.Н.* СВЧ-генераторы плазмы: Физика, техника, применение. М.: Энергоатомиздат. 1988. 224 с.
- Батенин В.М., Минаев П.В.* К вопросу об излучении плотной низкотемпературной плазмы инертных газов // ТВТ. 1977. Т. 15. № 3. С. 647 – 649.

* Список литературы оформлен не по ГОСТ 7.1-84, поскольку ссылки на литературу включают в себя фамилии авторов.

- Бекефи Дж.* Радиационные процессы в плазме. М.: Мир. 1971. 437 с.
- Белевцев А.А., Мнацаканян А.Х.* Приближенный метод вычисления сечений фотопоглощения двухатомных молекул // Оптика и спектроскопия. 1977. Т. 42. Вып. 1. С. 58 – 63.
- Биберман Л.М., Бронин С.Я., Лагарьков А.Н.* Радиационно-конвективный теплообмен при гиперзвуковом обтекании затупленного тела // Изв. АН СССР. МЖГ. 1972. № 5. С. 112 – 123.
- Биберман Л.М., Воробьев В.С., Лагарьков А.Н. и др.* Течение воздуха за фронтом сильной ударной волны с учетом неравновесной ионизации и излучения // Изв. АН СССР. МЖГ. 1967. № 6. С. 46 – 57.
- Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т.* Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука. 1982. 375 с.
- Биберман Л.М., Лагарьков А.Н.* Влияние спектральных линий на коэффициент лучистой теплопроводности // Оптика и спектроскопия. 1964. Т. 16. Вып. 2. С. 320 – 324.
- Биберман Л.М., Лагарьков А.Н.* О вычислении коэффициента лучистой теплопроводности при наличии молекулярного спектра // ТВТ. 1967 (а). Т. 5. № 5. С. 924 – 926.
- Биберман Л.М., Мнацаканян А.Х.* Оптические свойства воздуха в интервале температур 4000 + 10000 К // ТВТ. 1966. Т. 4. № 2. С. 148 – 158.
- Биберман Л.М., Норман Г.Э.* Непрерывные спектры атомарных газов и плазмы // Успехи физ. наук. 1967 (б). Т. 91. Вып. 2. С. 193 – 246.
- Биберман Л.М., Якубов И.Т.* Приближенный способ расчета факторов Франка – Кондона // Оптика и спектроскопия. 1960. Т. 8. Вып. 3. С. 294 – 299.
- Блох А.Г.* Теплообмен в топках паровых котлов. Л.: Энергоатомиздат. 1984. 240 с.
- Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики. М.: Наука. 1976. 664 с.
- Бойко Ю.В., Гришин Ю.М., Камруков А.С. и др.* Термодинамические и оптические свойства ионизованных газов при температурах до 100 эВ: Справочник. М.: Энергоатомиздат. 1988. 192 с.
- Борен К, Хафмен Д.* Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир. 1986. 660 с.
- Бор М., Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука. 1973. 719 с.
- Бронин С.Я., Брыкин М.В.* О применимости некоторых спектральных моделей // ТВТ. 1977. Т. 15. № 1. С. 137 – 142.
- Бронин С.Я., Брыкин М.В.* Приближенный метод расчета излучения спектральных линий // ТВТ. 1976. Т. 14. № 6. С. 1158 – 1165.

- Бронин С.Я., Лагарьков А.Н.* Перенос излучения в неоднородных слоях в спектральной линии ударного профиля // ТВТ. 1970. Т. 8. №4. С.741 – 748.
- Бутырская Е.В., Языкова С.М.* Расчет факторов Франка – Кондона высоких колебательных состояний двухатомных молекул // Ж. прикл. спектроскопии. 1980. Т. 33. Вып. 2. С. 356 – 360.
- Вайнштейн Л.А.* Вычисление волновых функций и сил осцилляторов сложных атомов // Труды ФИАН. М. 1961. Т. 15. С. 3 – 54.
- Вайнштейн Л.А., Собельман И.И.* Нестационарная теория штарковского уширения спектральных линий в плазме // Оптика и спектроскопия. 1959. Т. 6. Вып. 4. С. 440 – 446.
- Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А.* Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука. 1979. 320 с.
- Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А.* Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М.: Наука. 1973. 144 с.
- Вайнштейн Л.А., Шевелько В.П.* Структура и характеристики ионов в горячей плазме. М.: Наука. 1986. 216 с.
- Ватанабе К.* Процессы поглощения ультрафиолетового излучения в верхней атмосфере // Исследования верхней атмосферы с помощью ракет и спутников. М.: Изд-во Иностранной литературы. 1961. С. 280 – 358.
- Визе В.* Ширина спектральных линий. В кн.: Диагностика плазмы. М.: Мир. 1967. С. 218 – 262.
- Воробьев В.С., Норман Г.Э.* Энергия, излучаемая равновесной плазмой в спектральных линиях // Оптика и спектроскопия. 1964. Т. 17. Вып. 2. С. 180 – 188.
- Гайтлер В.* Квантовая теория излучения. М.: ИЛ. 1956.
- Герцберг Г.* Спектры и строение простых свободных радикалов. М.: Мир. 1974. 208 с.
- Годнев И.Н.* Вычисление термодинамических функций по молекулярным данным. М.: Гостехиздат. 1956.
- Головнев И.Ф., Замураев В.П., Кацнельсон С.С. и др.* Радиационный теплоперенос в высокотемпературных газах: Справочник. М.: Энергоатомиздат. 1984. 256 с.
- Головнев И.Ф., Севастьяненко В.Г., Солоухин Р.И.* Математическое моделирование оптических характеристик углекислого газа // Инж.-физ. ж. 1979. Т. 36. №2. С. 197 – 203.
- Градов В.М., Терентьев Ю.И., Щербаков А.А.* Расчет теплофизических свойств многокомпонентной плазмы на основе SiO_2 // Изв. СО АН СССР. Сер. технических наук. 1982. №3. Вып. 1. С. 86 – 95.

- Грибов Л.А.* Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука. 1976. 399 с.
- Грим Г.* Спектроскопия плазмы. М.: Атомиздат. 1969. 452 с.
- Грим Г.* Уширение спектральных линий в плазме. М.: Мир. 1978. 489 с.
- Груздев П.Ф.* Вероятности переходов и радиационные времена жизни уровней атомов и ионов. М.: Энергоатомиздат. 1990. 223 с.
- Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г. и др.* Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора. М.: Атомиздат. 1980. 303 с.
- Гуди Р.* Атмосферная радиация. М.: Мир. 1966. 522 с.
- Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др.* Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. 1, 2. М.: Наука. 1978.
- Давыдов А.С.* Квантовая механика. М.: Наука. 1973. 703 с.
- Даладова Л.А., Макиенко А.И., Суржиков С.Т. и др.* Вычислительная модель теплового излучения осесимметричных объемов рассеивающих двухфазных сред // Математ. Моделирование. 1990. Т. 2. № 4. С. 54.
- Дейрменджан Д.* Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами. М.: Мир. 1971. 265 с.
- Дирак П.* Лекции по квантовой механике. М.: ИЛ. 1964.
- Домбровский Л.А.* Рассеяние и поглощение света полыми сферическими частицами // Физ. атмосферы и океана. 1974. Т. 10. № 7. С. 720 – 727.
- Домбровский Л.А., Ивенских Н.Н.* Излучение однородного плоскопараллельного слоя сферических частиц // ТВТ. 1973. Т. 11. № 4. С. 818 – 822.
- Дорошенко В.М., Крючков С.И., Кудрявцев Н.Н. и др.* Об ИК-излучении CO и CO₂ содержащих смесей колебательно-неравновесных газов // ТВТ. 1981. Т. 19. № 4. С. 735 – 745.
- Ельяшевич М.А.* Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: УРСС. 2001. 894 с.
- Зайдель А.Н., Прокофьев В.К., Райский С.М. и др.* Таблицы спектральных линий. М.: Наука. 1977. 800с.
- Зар Р.* Теория углового момента. О пространственных эффектах в физике и химии. М.: Мир. 1993. 351 с.
- Зельдович Я.Б. и Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука. 1966. 686 с.
- Зигель Р., Хауэлл Дж.* Теплообмен излучением. М.: Мир. 1975. 934с.
- Зуев В.Е.* Распространение видимых и инфракрасных волн в атмосфере. М.: Советское радио. 1970. 496 с.
- Зуев В.Е., Креков Г.М.* Оптические модели атмосферы. Л.: Гидрометеоздат. 1986. 256 с.

- Иванова А.Н., Грязнов В.К.* Программа расчета атомов по методу Хартри – Фока. Черногоровка: Изд-во ин-та хим. физики ФН СССР. 1975.
- Каменищиков В.А., Пластинин Ю.А., Николаев В.М. и др.* Радиационные свойства газов при высоких температурах. М.: Машиностроение. 1971. 440 с.
- Камруков А.С., Козлов Н.П., Протасов Ю.С. и др.* О расчете спектров сечений фотоионизации неводородоподобных атомов и ионов // Оптика и спектроскопия. 1983. Т. 55. Вып. 1. С. 17–21.
- Касабов Г.А., Елисеев В.В.* Спектроскопические таблицы для низкотемпературной плазмы. М.: Атомиздат. 1979. 160 с.
- Касьянов В.А., Старостин А.Н.* К теории тормозного излучения медленных электронов на атоме // ЖЭТФ. 1965. Т. 48. Вып. 1. С. 295–302.
- Каули Ч.* Теория звездных спектров. М.: Мир. 1974. 255 с.
- Кацнельсон С.С., Ковальская Г.А.* Теплофизические и оптические свойства аргоновой плазмы. Новосибирск: Наука. 1985. 148 с.
- Кобзев Г.А.* Оптические свойства воздушной плазмы при высоких температурах // Препр. ИВТ АН СССР. № 1-112. М. 1983 (а). 73 с.
- Кобзев Г.А.* Уширение спектральных линий положительных ионов азота и кислорода // Препр. ИВТ АН СССР. № 1-101. М. 1983 (б). 49 с.
- Кобзев Г.А., Нужный В.А.* Оптические свойства воздушной плазмы с учетом спектральных линий, $T = 20000 \div 300000$ К // Препр. ИВТАН СССР. № 1-134. М. 1984 (а). 56с.
- Кобзев Г.А., Нужный В.А.* Спектральные и интегральные оптические характеристики непрерывного спектра воздушной плазмы при высоких температурах // Препр. ИВТ АН СССР. № 1-131. М. 1984 (а). 83 с.
- Кобзев Г.А., Сергеев В.М.* Приближенный метод расчета сечений фотоионизации атомов и ионов // Оптика и спектроскопия. 1972. Т. 33. Вып. 6. С. 1019–1027.
- Кондратьев В.Н.* Структура атомов и молекул. М.: ГИФМЛ. 1959. 524 с.
- Коньков А.А., Нейланд В.Я., Николаев В.М. и др.* Проблемы лучистого теплообмена в гиперзвуковой аэродинамике // ТВТ. 1969. Т. 7. № 1. С. 140–161.
- Корлисс Ч., Бозман У.* Вероятности переходов и силы осцилляторов 70 элементов. М.: Мир. 1968. 562 с.
- Косарев И.Б.* Расчеты оптических свойств плазмы с использованием волновых функций самосогласованного поля. В кн.: Труды 4 Всес. конф. по динамике излучающего газа. М.: Изд-во МГУ. 1981. Ч. 1. С. 119–128.
- Кузнецова Л.А., Кузьменко Н.Е., Кузяков Ю.Я. и др.* Вероятности оптических переходов двухатомных молекул. М.: Наука. 1980. 320с.

- Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т.* Атлас спектральных сечений поглощения электронных и колебательных систем полос двухатомных молекул. Версия 1. М.: ИПМех РАН. Препринт №603. 1997. 102 с.
- Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т.* Информационно-вычислительный комплекс «MSRT–RADEN» I. Основная модель коэффициентов поглощения электронных спектров двухатомных молекул // Матем. моделирование. 1998. Т. 10. №3. С. 15–28. (а).
- Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т.* Информационно-вычислительный комплекс «MSRT–RADEN» II. Модели коэффициентов поглощения электронных спектров двухатомных молекул // Матем. моделирование. 1998. Т. 10. №4. С. 30–40. (б).
- Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т.* Информационно-вычислительный комплекс «MSRT–RADEN» III. База данных коэффициентов поглощения электронных спектров двухатомных молекул // Матем. моделирование. 1998. Т. 10. №5. С. 21–34. (в).
- Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т.* Сечения поглощения двухатомных молекул для задач радиационного теплообмена в низкотемпературной плазме // ТВТ. 1999. Т. 37. №3. С. 374–385.
- Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т., Митрофанов Д.В.* Атлас спектральных сечений поглощения электронных и колебательных систем полос двухатомных молекул. М.: ИПМех РАН. Препринт №660. 1999. 49 с.
- Кузьменко Н.Е., Кузнецова Л.А., Кузяков Ю.Я.* Факторы Франка–Кондона двухатомных молекул. М.: Изд-во МГУ. 1984. 342 с.
- Кузьменко Н.Е., Кузнецова Л.А., Матвеев В.К.* Зависимости сил электронных переходов двухатомных молекул от длины волны // Оптика и спектроскопия. 1982. Т. 53. Вып. 2. С. 235–238.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.:Наука. 1974. 752 с.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. М.: Наука. 1988. 509 с.
- Латыев Л.Н., Петров В.А., Чеховской В.Я., Шестаков Е.Н.* Излучательные свойства твердых материалов. М.: Энергия. 1974. 471 с.
- Левинсон И.Б., Никитин А.А.* Руководство по теоретическому вычислению интенсивностей линий в атомных спектрах. Л.: Изд-во ЛГУ. 1962. 359 с.
- Лисица В.С.* Штарковское уширение линий водорода в плазме // Успехи физ. наук. 1977. Т. 122. Вып. 3. С. 449–496.
- Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др.* Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука. 1976. 216 с.

- Матвеев В.С.* Приближенные представления коэффициента поглощения и эквивалентных ширин линий с фойгтовским контуром // Ж. прикл. спектроскопии. 1972. Т. 16. Вып. 2. С. 228 – 233.
- Методические указания.* Модель излучения высокотемпературных газовых объемов для расчета теплообмена летательных аппаратов. РД 50-25646.14-84. М.: Изд-во Стандартов. 1984. 60 с.
- Михалас Д.* Звездные атмосферы. Ч. 1, 2. М.: Мир. 1982.
- Мнацаканян А.Х.* Фотодиссоциация и фотоионизация двухатомных молекул при высоких температурах // ТВТ. 1968. Т. 6. №2. С. 236 – 241.
- Мучник Г.Ф., Рубашов И.Б.* Методы теории теплообмена. Тепловое излучение. М.: Высшая школа. 1974. 270 с
- Нельсон Г.Ф., Тукер Е.О.* ИК-излучение выхлопной струи реактивного двигателя, работающего на боросодержащем суспензионном топливе // Аэрокосмическая техника. 1987. №6. С. 58 – 66.
- Нельсон Х.Ф.* Влияние частиц на ИК-излучение выхлопных струй тактической ракеты // Аэрокосмическая техника. 1986. №1. С. 119 –
- Никитин А.А., Рудзикас З.Б.* Основы теории спектров атомов и ионов. М.: Наука. 1983. 320 с.
- Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б.* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. М.: Физматлит. 2000. 399 с.
- Олтэд В.* Обтекание гладких симметричных тел потоком с селективным излучением // Ракетная техника и космонавтика. 1971. Т. 9. №1. С. 147 – 158.
- Оцисик М.Н.* Сложный теплообмен. М.: Мир. 1976. 616 с.
- Пеннер С.С.* Количественная молекулярная спектроскопия и излучательная способность газа. М.: Изд-во иностранной литературы. 1963. 330 с.
- Петров В.А., Марченко Н.В.* Перенос энергии в частично прозрачных твердых материалах. М.: Наука. 1985. 190 с.
- Пластинин Ю.А.* Излучательные способности и спектральные коэффициенты поглощения продуктов сгорания // Ж. прикл. мех. и техн. физ. 1969. №2. С. 86 – 92.
- Пластинин Ю.А., Суржиков С.Т., Хмелинин Б.А.* Исследование направленной излучательной способности полидисперсных газопылевых объемов методом Монте-Карло // В кн.: Гагаринские научные чтения по космонавтике и авиации 1983, 1984 г. М.: Наука. 1985. С. 185 – 186.
- Плучино А.Б., Мاستурцо Д.Е.* Излучательная способность частиц Al_2O_3 в факеле ракеты // Ракетная техника и космонавтика. 1981. Т. 19. №10. С. 164 – 168.
- Повинелли Л.А., Розенштейн Р.А.* Распределения по размерам частиц окиси алюминия, образующихся в процессе горения смесового твердо-

- го топлива при высоком давлении // Ракетная техника и космонавтика. 1964. Т. 2. № 10. С. 103 – 111.
- Пришивалко А.П.* Оптические и тепловые поля внутри светорассеивающих частиц. Минск: Наука и техника. 1983. 190 с.
- Пришивалко А.П., Бабенко В.А., Кузьмин В.А.* Рассеяние и поглощение света неоднородными и анизотропными сферическими частицами. Минск: Наука и техника. 1984. 263 с.
- Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Параметры атомов и атомных ионов. М.: Энергоатомиздат. 1986. 344 с.
- Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат. 1980. 240 с.
- Радюк И.М., Пришивалко А.П.* Метод блоков и его применение для расчета индикатрис и показателей рассеяния видимого света непоглощающей аккумулятивной фракцией атмосферного аэрозоля // Препр. ИФ АН БССР. №220. Минск. 1980. 62 с.
- Романов Г.С., Станкевич Ю.А., Станчиц Л.К. и др.* Термодинамические свойства, спектральные и средние коэффициенты поглощения многокомпонентных газов в широком диапазоне параметров. Минск: АНК ИТМО. Препринт №2. 1993.
- Романов Г.С., Степанов К.Л., Сыркин М.И.* Спектральные и средние коэффициенты поглощения углеродной плазмы // Оптика и спектроскопия. 1979. Т. 47. Вып. 5. С. 860 – 868.
- Росселанд С.* Астрофизика на основе теории атома. ОНТИ. 1936.
- Рубцов Н.А.* Теплообмен излучением в сплошных средах. Новосибирск: Наука. 1984. 277 с.
- Рудзикас З.Б., Никитин А.А., Холтыгин А.Ф.* Теоретическая атомная спектроскопия. Руководство для астрономов и физиков. Л.: Изд-во ЛГУ. 1990.
- Смирнов Б.М.* Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. М.: Атомиздат. 1968. 363 с.
- Смирнов Б.М., Шляпников Г.В.* Излучательные переходы в молекулярном газе // Химия плазмы. Вып. 3. М.: Атомиздат. 1976. С. 130 – 188.
- Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука. 1963. 640 с.
- Соболев В.В.* Курс теоретической астрофизики. М.: Наука. 1967. 528 с.
- Соболев В.В.* Перенос лучистой энергии в атмосферах звезд и планет. М.: Гостехиздат. 1956.
- Соболев В.В.* Рассеяние света в атмосферах планет. М.: Наука. 1972. 335 с.
- Степанов Н.Ф.* Квантовая механика и квантовая химия. М.: Изд-во МГУ. 2001. 519 с.

- Стриганов А.Р., Свентицкий Н.С.* Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М.: Атомиздат. 1966. 899 с.
- Стулов В.П., Мирский В.Н., Вислый А.И.* Аэродинамика болидов. М.: Наука. 1995. 236 с.
- Стулов В.П.* Об одной модели излучающей смеси газов // Научные труды Института механики МГУ. №30. М. 1973. С. 107–126.
- Суржиков С.Т.* Вычислительный эксперимент в построении радиационных моделей механики излучающего газа. М.: Наука. 1992. 157 с.
- Суржиков С.Т.* Модели линейчатого поглощения низкотемпературной плазмы в вычислительной системе MONSTR // Препринт №410. М. Институт проблем механики АН СССР. 1989.
- Суржиков С.Т.* Новые широкополосные модели излучения продуктов сгорания углеводородных топлив. Труды III Российской Национальной конференции по теплообмену. Т. 6. Радиационный и сложный теплообмен. М.: Изд-во МЭИ. 2002. С. 331–334.
- Суржиков С.Т.* Радиационно-конвективный теплообмен в камере оптического плазмотрона // ТВТ. 1990. Т. 28. № 6. С. 1205–1213.
- Суржиков С.Т.* Радиационно-конвективный теплообмен при медленном движении излучающего газа в области локального энерговыделения // Изв. АН СССР, МЖГ. 1997 (а). №3. С. 138–149.
- Суржиков С.Т.* Тепловое излучение крупномасштабных кислородно-водородных огневых шаров. Исследование вычислительных моделей // ТВТ. 1997 (б). Т. 35. № 4. С. 584.
- Суржиков С.Т.* Спектральные коэффициенты поглощения горячих атмосферных газов. Атмосферы Земли и Марса. М.: ИПМех РАН. 2004 (а). 170 с.
- Суржиков С.Т.* Тепловое излучение газов и плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана. 2004 (б). 546 с.
- Суржиков С.Т.* Теплообмен излучением с учетом атомных линий в слоях низкотемпературной лазерной плазмы // Матем. моделирование. 1993. Т. 5. № 10. С. 11–31.
- Суржиков С.Т.* Численный анализ радиационных лазерных волн медленного горения // Квантовая электроника. 2000 (а). Т. 30. №5. С. 416–420.
- Суржиков С.Т., Тенишев В.М., Чудов Л.А.* О расчете колебательных волновых функций двухатомных молекул // Матем. моделирование. 2000 (б). Т. 12. №2. С. 118–127.
- Тамонис М.* Радиационный и сложный теплообмен в каналах. Вильнюс: «Мокслас». 1981. 252 с.
- Татевский В.М.* Строение и физико-химические свойства молекул и веществ. М.: МГУ. 1993. 463 с.

- Термодинамические и оптические свойства ионизованных газов при температурах до 100 эВ. Справочник. Под ред. Ю.С.Протасова. М.: Энергоатомиздат. 1988. 192 с.
- Тьен К.Л. Радиационные свойства газов // Успехи теплопередачи. Т. 5. М.: Мир. 1975. С. 280 – 360.
- Фирсов О.Б., Чибисов М.И. Тормозное излучение медленных электронов на нейтральных атомах // ЖЭТФ. 1960. Т. 39. Вып. 6 (12). С. 1770 – 1776.
- Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука. 1976.
- Фортов В.Е., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. Черногоровка: Институт химической физики АН СССР. 1984. 263 с.
- Френч Е.П. Приближенные коэффициенты поглощения для электронно-колебательных систем полос // Ракетная техника и космонавтика. 1964. Т. 2. № 12. С. 213 – 215.
- Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. М., Л.: ГИФМЛ. 1963. 640 с.
- Хартри Д. Расчеты атомных структур. М.: Изд-во иностранной литературы. 1960. 271 с.
- Хмелинин Б.А., Пластинин Ю.А. Излучательные и поглощательные свойства молекул H_2O , CO_2 , CO и HCl при температурах 300 + 3000 К // Проблемы физической газовой динамики. Труды ЦАГИ. № 1656. М. 1975. С. 102 – 147.
- Хьюбер К.П., Герцберг Г. Константы двухатомных молекул. Т. 1, 2. М.: Мир. 1984.
- Чернышева Л.В., Черепков Н.А. Программы вфчисления атомных волиовых функций в приближении Хартри–Фока. Л.: Изд-во ФТИ АН СССР. 1971.
- Шкаровский И., Джонстон Т., Бачинский М. Кинетика частиц плазмы. М.: Атомиздат. 1969. 396 с.
- Эдвардс Д.К. Излучательные характеристики материалов // Теплопередача. Сер. С. 1969. Т. 91. № 2. С. 96 – 113.
- Эдвардс Д.К., Глэссен Л.К., Хаузер В.К. и др. Лучистый теплообмен в неизотермических несерых газах // Теплопередача. Сер. С. 1967. Т. 89. № 3. С. 26 – 39.
- Эдвардс Д.К., Нельсон К.Е. Ускоренный метод расчета лучистого теплообмена между несерыми стенками и газами H_2O и CO_2 в изотермических условиях // Теплопередача. Сер. С. 1962. Т. 84. № 4. С. 3 – 9.
- Эдвардс Р., Бобко Р. Лучистая теплопередача от изотермической дисперсной среды с изотропным рассеянием // Теплопередача. Сер. С. 1967. Т. 89. № 4. С. 23 – 33.
- Armstrong B.H., Nicholls R. Absorption and Transfer of Radiation in Heated Atmospheres. Pergamon Press. Oxford. 1972.

- Armstrong B.H., Sokoloff J., Nichols R.W., et al.* Radiative Properties of High Temperature Air // JQSRT. 1961. V. 1. № 2. P. 143–162.
- Bates D.R., Damgaard A.* The calculation of absolute strengths of spectral lines // Phil. Trans. Roy. Soc. 1949. V. 242. P. 101–111.
- Breene R.G., Jr.* Stark broadening in air molecule system // JQSRT. 1968. V. 8. № 3. P. 1013–1017.
- Brewer L., Endelke J.L.* Spektrum of C_3 // J. Chem. Phys. 1962. V. 36. № 4. P. 992–998.
- Burgess A., Seaton M.J.* A general formula for the calculation of atomic photo-ionization cross sections // Mon. Not. Roy. Astr. Soc. 1960. V. 120. P. 121–151.
- Chu C.M., Churchill S.W.* Representation of the angular distribution of radiation scattered by a spherical particle // J. Opt. Soc. Amer. 1955. V. 45. № 11. P. 958–962.
- Churchill D.R., Armstrong B.H., Jhonston R.R.* Absorption coefficients of heated air: a tabulation to 24000 K // JQSRT. 1966. V. 6. № 4. P. 371–442.
- Condon E.U. and Shortley G.H.* The Theory of Atomic Spectra. Cambridge. Athl. University Press. 1963. 441 p.
- Conrad R., Raizer Yu.P., Surzhikov S.T.* Continuous Optical Discharge Stabilized by Gas Flow in Weakly Focused Laser Beam // AIAA Journal. 1966. V. 34. № 8. P. 1584–1588.
- Dalgarno A., Lane N.F.* Free-free transitions of electrons in gases // The Astrophys. J. 1966. V. 145. № 2. P. 623–633.
- Dombrovsky L.A.* Radiation Heat Transfer in Disperse Systems. Begell House. Inc., publishers. 1996. 256 p.
- Edwards D.K.* Molecular Gas Band Radiation. Advances in Heat Transfer. 1976. V. 12. Ed. by Thomas F. Irvine, Jr., James P. Hartnett. Academic Press. New York. San Francisco. London.
- Edwards D.K., Balakrishnan A.* Thermal radiation of combustion gases // Int. J. Heat Mass Transfer. 1973. V. 16. № 1. P. 26–40.
- Edwards D.K., Glassen L.K., Hauser W.C., Tuchscher J.S.* Radiation Heat Transfer in Nonisothermal Nongray Gases // Transactions of ASME. 1967. V. 89. № 3.
- Edwards D.K., Menard W.A.* Comparison of models for correlation of total band absorption // Appl. Optics. 1964. V. 3. № 5. P. 621–625.
- Edwards D.K., Morizumi S.J.* Scaling of vibrational-rotation gas radiation // JQSRT. 1970. V. 10. № 3. P. 175–188.
- Fairbairn A.R.* Self-Absorption in Molecular Spectra: Curves of Growth for the C_2 and CN // JQSRT. 1966. V. 6. № 6. P. 787–798.

- Felske J.D., Tien C.L.* Infrared radiation from non-homogeneous gas mixtures having overlapping bands // JQSRT. 1974. V. 14. № 1. P. 35 – 48.
- Giordano D., Capitelli M., Colonna G., Gorse C.* Tables of Internal Partition Functions and Thermodynamic Properties of High-Temperature Air Species from 50 K to 100000 K. ESA STR-237. 1994.
- Gofden S.A.* Approximate Spectral Absorption Coefficients of Electronic Transitions in Diatomic Molecules // JQSRT. 1967. V. 7. № 1. P. 225 – 250.
- Gorelov V.A., Kireev A.Yu., Shilenkov S.V., Surzhikov S.T.* Prediction of Non-equilibrium Ionization and Emission at Superorbital Flight in Air // AIAA Paper 04-2480. 2004. 11p.
- Herzberg G.* The Spectra and Structures of Simple Free Radicals. Cornell University Press. Ithaca and London. 1971.
- Hougen J.T.* The Calculation of Rotational Energy Levels and Rotational Line Intensities in Diatomic Molecules // NBS Monograph 115. 1970.
- Keck J.C., Camm J.C., Kivel B. et al.* Radiation from hot air // Annals of Physics. 1959. V. 7. № 1. P. 1 – 38.
- Koonin S.E.* Computational Physics. Addison-Wesley Publishing Company. Inc. 1986.
- Kovacs I.* Rotational structure in spectra of diatomic molecules. Budapest: Akademiai Kiado. 1969. 320 p.
- Laux C.O.* Optical Diagnostics and Radiative Emission of Air Plasma. HTGL Report № T-288. August 1993. Stanford University. 232 p.
- Laux C.O., Gessman R.J., Hilbert B., Kruger C.H.* Experimental Study and Modeling of Infrared Air Plasma Radiation // AIAA Paper 95-2124. 30th AIAA Thermophysics Conference. June 19 – 22. 1995. San Diego. CA.
- Li W., Tong T.W., Dobranich D., et al.* A Combined Narrow- and Wide-Band Model for Computing the Spectral Absorption Coefficient of CO₂, CO, H₂O, CH₄, C₂H₂ and NO // JQSRT. 1995. V. 54. № 6. P. 961 – 970.
- Ludwig C.B.* Measurement of the curves-of-growth of hot water vapor // Applied Optics. 1971. V. 10. № 5. P. 1057 – 1073.
- Ludwig C.B., Malcmus W., Reardon J.E. et al.* Handbook of infrared radiation from combustion gases // NASA SP-3080. Washington: Marshal Space Flight Center. 1973.
- Ludwig C.B., Malkmus W. et al.,* The Standard Infrared Radiation Model // AIAA 81-1051. 1981.
- Lyons R.B., Wormhoudt J., Gruninger J.* Scattering of radiation by particles in low altitude plumes // J. of Spacecraft and Rockets. 1983. V. 20. № 2. P. 189 – 192.
- Moore C.E.* Atomic energy levels. NBS Circular 467. Washington D.C. V. 1.-1949; V. 2. 1952; V. 3. 1958.

- Nicholls R.W.* Model studies on the systematics and interpolation of Frank-Condon factors arrays // *JQSRT*. 1982. V. 28. № 6. P. 481–492.
- Park, Ch.* Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics. –Wiley-Interscience Publication. J. Wiley & Sons. New York. 1990.
- Partridge H., Schwenke D.W.* The Determination of an Accurate Isotope Dependent Potential Energy Surface for Water from Extensive ab-initio Calculations and Experimental Data // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 106(11). 15 March. P. 4618–4639.
- Peach G.A.* Continuous absorption coefficients for non-hydrogenic atoms // *Memoirs of the Royal Astronomical Society*. 1970. V. 73. Part.1. P. 1–123.
- Peach G.A.* Revised General Formula for the Calculation of Atomic Photoionization Cross Sections // *Mem. Roy. Astr. Soc.* 1967. V. 71. P. 13–27.
- Pearce B.E.* Radiative heat transfer within a solid-propellant rocketmotor // *J. of Spacecraft and Rockets*. 1978. V. 15. №2. P. 125–128.
- Pearse R.W.B., Gaydon A.G.* The Identification of Molecular Spectra. Chapman & Hall Ltd. London. 1963. 347 p.
- Plastinin Yu.A., Karabadzhak G., Khmelinin B., Baula G., Rodionov A.* Ultra-violet, Visible and Infrared Spectra Modeling for Solid and Liquid-Fuel Rocket Exhausts // *AIAA Paper №2001-0660*. 2001. 15 p.
- Rothman L.S., Gamache R.R., Barbe A. et al.* AFGL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation: 1982 edition // *Applied Optics*. 1983. V. 22. №15.
- Rothman L.S., Gamache R.R., Tipping R.H. et al.* The HITRAN Molecular Database: Editions of 1991 and 1992 // *JQSRT*. 1992. V. 48. № 5/6. P. 469.
- Schonemann A.T., Lago V., Dudeck M.* Investigation of CO₂ and CH₄ Containing Arcjet Plasma with Mass Spectrometry and Optical Emission Spectroscopy // *AIAA Paper 95-1959*. 26th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference. June 19–22. 1995. San Diego. CA.
- Seaton M.J.* Thermal inelastic collision process // *Reviews of Modern Physics*. 1958. V. 30. №3. P. 979–991.
- Semam M.L., Branscomb L.M.* Structure and photodetachment spectrum of the atomic carbon negative ion // *The Physycal Review*. 1962. V. 125. №5. P. 1602–1608.
- Staylor W.F.* Determination of stack plume properties from satellite imagery // *J. Spacecraft*. 1978. V. 15. №2. P. 92–99.
- Surzhikov S., Capitell M., Colonna G.* Spectral optical properties of nonequilibrium hydrogen plasma for radiation heat transfer // *AIAA 2002-3222*. 2002 (a). 11 p.
- Surzhikov S.T.* Database of Atomic Lines for Radiative Gas Dynamics // *AIAA Paper 2002-2898*. 2002 (6). 48 p.

- Surzhikov S.T.* Direct Simulation Monte-Carlo Algorithms for the Rocket Exhaust Plumes Emissivity Prediction // AIAA Paper 2002-0795. 2002 (B). 11 p.
- Surzhikov S.T.* Spectral and Narrow Band Directional Emissivity of Light-Scattering and Non-Scattering Volumes // AIAA Paper 2002-3324. 2002 (r). P.21.
- Surzhikov S.T.* Computational Radiation Models for Low-Temperature Plasma // AIAA 96-2313. 1996. 11 p.
- Surzhikov S.T.* Computing System for Mathematical Simulation of Selective Radiation Transfer // AIAA Paper 2000-2369. 2000. 11 p.
- Surzhikov S.T.* Computing System for Solving Radiative Gasdynamic Problems of Entry and Re-Entry Space Vehicles // Proc. of the 1st Int. Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. 8–10 October, 2003. Lisbon. Portugal. ESA-SP 533. December 2003.
- Surzhikov S.T., Gorelov V.A., Kireev A.Yu.* Determination of Trajectory Parameters and Some Parameters of Planetary Atmospheres by Means of Spectral Heat Radiation Generated by Entering Space Vehicle. Proc. Int. Workshop «Planetary Probe Atmospheric Entry and Descent Trajectory Analysis and Science». Lisbon. Portugal. 6–9 October. 2003. ESA SP-544. 2004. P. 93–100.
- Surzhikov S.T., Labourdette P.* Numerical simulation of large-scale oxygen-hydrogen fire balls. Semi-empirical model // AIAA Paper No.96-1901. 1996. 11 p.
- Torr M.R., Torr D.G., Ong R.A. et al.* Ionization frequencies for major thermospheric constituents as a function of solar cycle 21 // Geophys. Res. Lett. 1979. V. 6. P. 771.
- Whiting E.E.* Computer program for determining rotational line intensities factor for diatomic molecules // NASA TN D-7268. 1973.
- Whiting E.E., Peterson J.H., Kovacs I. et al.* Computer checking of rotational line Intensity Factors for diatomic transitions // J. of Molecular Spectroscopy. 1973. V. 47. № 1. P. 84–99.
- Whiting E.E., Schadee A., Tatum J.B., Hougen J.T., Nicholls R.W.* Recommended Conventions for Defining Transition Moments and Intensity Factors in Diatomic Molecular Spectra // J. Mol. Spectrosc. 1980. V. 80. P. 249–256.
- Wiese W.L., Smith M.W., Glennon B.M.* Atomic transition probabilities. National Standard Reference Data Series. National Bureau of Standards 4. 1966. V. 1; 1969. V. 2.
- Wilson K.H., Greif R.* The separability approximation in non-homogeneous gases // JQSRT. 1971. V. 11. № 8. P. 1245–1263.
- Wilson K.H., Nicolet W.E.* Spectral absorption coefficients of carbon, nitrogen and oxygen atoms // JQSRT. 1967. V. 7. № 6. P. 891–941.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Адиабатическое приближение 129
- Ван-дер-Ваальсово уширение линии 59
- Векторная модель атома 217
- Векторная связь Рассела – Саундерса (LS-связь) 212
- Вероятность вращательного квантового перехода 133
- Вероятность колебательного квантового перехода 133
- Вероятность электронного квантового перехода в молекуле 133
- Вращательная структура спектра 122
- Гармонический потенциал межъядерного взаимодействия 123
- Генеалогические коэффициенты 228
- Групповая модель коэффициента поглощения 16
- Доплеровская полуширина 54
- Естественная полуширина линии 59
- Индикатриса рассеяния Хенри – Гринштейна 200
- Индикатриса рассеяния 200
- Интегральная излучательная способность 22
- Интегральный коэффициент поглощения вращательной
линии 133
- Интегральный коэффициент поглощения линии 54
- Квазиспектральная модель коэффициента поглощения 16
- Квантовая плазма 40
- Квантовые числа двухатомной молекулы 129
- Квантовые числа электронной конфигурации атомных
частиц 209

- Классификация Гунда 130
Классическая плазма 40
Колебательно-вращательная структура спектра 122
Комбинированная оптическая модель 19
Комплексный показатель преломления 199
Коэффициент радиационной теплопроводности 22
Коэффициент Ракаха 88
Коэффициент Эйнштейна спонтанного квантового
перехода 133
- Локальное термодинамическое равновесие (ЛТР) 67
Лоренцевская полуширина 54, 66
- Метод квантового дефекта 87
Модель «серой» колебательной полосы 157
Модель *line-by-line* расчета 162, 166
Модель Q-ветви 149
Модель аналитического контура колебательной полосы 157
Модель перекрытых линий 149
Модель усреднения по колебательной структуре 180
Модель Френча 160
- Неидеальная плазма 40
- Оптимальные спектральные модели 27
Оптическая модель 15
Оптически толстая среда 50
Оптически тонкая среда 50
- Параметр дифракции 199
Плотность интегрального потока абсолютно черного тела 68
Пояная спектральная область 22
Потенциал Морзе межъядерного взаимодействия 123
Правила отбора 212
Приближение Борна – Оппенгеймера 129
Приближение центрального поля 209
Приведенная сила линий мультиплета 228

- Радиальный интеграл 224
Радиационная модель среды 21
Радиус Дебая 41
Резонансное уширение линии 59
РКР-потенциал межъядерного взаимодействия 124
- Свободно-свободные квантовые переходы 32
Свободно-связанные квантовые переходы 32
Связанно-свободные квантовые переходы 31
Связанно-связанные квантовые переходы 31
Сечение поглощения 72, 112
Сечение фотоионизации атомных частиц 72
Сила мультиплета 228
Спектральная модель коэффициента поглощения 16
Спин ядра 133
Среднепланковский коэффициент поглощения 21
Среднеросселандовская длина свободного пробега фотонов 22
Среднеросселандовский коэффициент поглощения 21
Средний косинус рассеяния 198
Средний коэффициент поглощения по Чандрасекху 50
Средний радиус частиц конденсированной фазы 202
«Стандартная» модель поглощения 186
Статистическая сумма 133
Степень черноты однородного плоского слоя 70
Степень черноты полусферического объема 69
- Узкополосные модели поглощения 189
Условие классичности плазмы 40
- Фактор Франка – Кондона 133
Фактор Хенля – Лондона 133
Факторы Рахаха 228
Фойгтовский контур линии 63
Фотодиссоциация молекул 117
Фотоионизация молекул 114
- Широкополосные модели поглощения 189
Штарковское уширение линий 55

- Эквивалентные электроны 210
Экстинкция 197
Электронная сила квантового перехода 133
Электронно-колебательно-вращательная структура спектра 122
- Ядерный статистический вес** 133
- Λ -удвоение** 130
- jj-связь** 219
jK-связь 220
- LK-связь** 220
LS-связь 219
- μ -центроида** 135

Научное издание

КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ ФИЗИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Суржиков Сергей Тимофеевич

**Оптические свойства
газов и плазмы**

В авторской редакции

Художник *Н.Г. Столярова*

Компьютерная верстка *Т.А. Суржиковой*

Подписано в печать 30.12.2004.

Формат 60 × 90 / 16. Печать офсетная. Бумага офсетная.

Усл. печ. л. 36. Уч.-изд. л. 35,5

Тираж 300 экз. Заказ № 273

Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана. 105005, Москва, 2-я Бауманская, 5.

Отпечатано с оригинал-макета в типографии ГП «Облиздат».
248640, Калуга, пл. Старый торг, 5.
