

01 Природа тонкой структуры вращательных уровней основного $X^2\Sigma^+$ -состояния радикала CN

© В.А. Терашкевич, Е.А. Пазюк

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991 Москва, Россия

e-mail: verak1993@mail.ru, pazyuk@phys.chem.msu.ru

Поступила в редакцию 04.08.2020 г.

В окончательной редакции 27.09.2020 г.

Принята к публикации 29.09.2020 г.

На основании неэмпирических высокоуровневых квантово-химических расчетов недиагональных матричных элементов спин-орбитального и электронно-вращательного связывания между основным $X^2\Sigma^+$ - и возбужденными $(1-4)^2\Pi$ -состояниями установлено, что наблюдаемый регулярный эффект γ -удвоения вращательных уровней состояния $X^2\Sigma^+$ в основном определяется внутримолекулярными взаимодействиями с удаленными состояниями $(2-4)^2\Pi$. В рамках неадиабатической модели эффективного радиального гамильтониана изолированного электронного состояния удалось построить аналитический потенциал состояния $X^2\Sigma^+$ и соответствующую функцию $\gamma(R)$, которые воспроизводят частоты вращательных и колебательно-вращательных переходов (для низших колебательных уровней $\nu \leq 3$) молекулы CN на экспериментальном (спектроскопическом) уровне точности.

Ключевые слова: радикал CN, неадиабатические взаимодействия, тонкая структура, γ -удвоение, межатомный потенциал, неэмпирические расчеты.

DOI: 10.21883/OS.2021.01.50433.210-20

Введение

Двухатомный радикал CN уже более ста лет всесторонне изучается как экспериментальными, так и теоретическими методами молекулярной спектроскопии вследствие его широкого распространения в межзвездной и околозвездной среде [1–5] и, следовательно, важности и активного использования этой молекулы для решения разнообразных астрофизических и астрохимических задач, а также для бесконтактной диагностики газоплазменных процессов [6,7], происходящих с углеродсодержащими молекулярными компонентами естественного и искусственного происхождения в условиях земной атмосферы.

Тонкая и сверхтонкая структуры вращательных уровней, принадлежащих различным изотопомерам молекулы CN, были детально изучены современными высокочувствительными методами молекулярной спектроскопии с использованием широкого диапазона электромагнитного излучения: от микроволнового до ультрафиолетового. Соответствующие лабораторные спектры высокого и сверхвысокого разрешения были получены методом лазерной модуляционной спектроскопии [8], двойного оптического резонанса [9,10], разрешенной во времени фурье-спектроскопии [11], а также субдуплерской лазерно-диодной спектроскопии [12].

Наиболее подробно исследованы так называемые „красная“ $A^2\Pi-X^2\Sigma(+)$ - и „фиолетовая“ $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ -системы [2,13–17], соответствующие электронно-колебательно-вращательным (ровибронным) переходам между тремя низколежащими электронными

состояниями радикала CN (рис. 1). Исчерпывающий обзор спектроскопических данных по ним представлен в работах [18,19].

Внутримолекулярная природа наблюдаемого расщепления вращательных уровней мультиплетных состояний определяется вкладом трех типов неадиабатических взаимодействий: спин-вращательного, спин-орбитального и электронно-вращательного, которые игнорируются в полном гамильтониане молекулы [20] в случае тради-

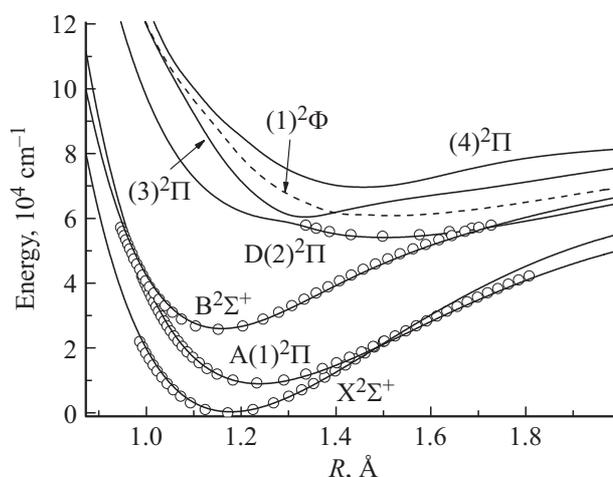


Рис. 1. Потенциальные кривые молекулы CN в основном $X^2\Sigma^+$ - и возбужденных $(1-4)^2\Pi$ -электронных состояниях. Сплошные линии — квантово-химические результаты данной работы, кружки — высокоточные эмпирические потенциалы PKP, полученные в работах [13,19,45].

ционного для молекулярной спектроскопии адиабатического приближения. Наблюдаемая тонкая структура разрешенных по спину ровибронных переходов A–X и B–X была проанализирована в рамках метода эффективного гамильтониана с учетом удвоения вращательных уровней дублетных электронных состояний. Для исследуемого в экспериментах [2,13,14,18] диапазона колебательных квантовых чисел состояний $V^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$ и $X^2\Sigma^+$ были определены наборы эффективных колебательно-вращательных молекулярных постоянных, включая так называемые константы γ - и Λ -удвоения, характерные для состояний $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ соответственно. Полученные молекулярные постоянные, которые являются параметрическими функциями колебательных (ν) и вращательных (J) квантовых чисел, позволяют воспроизвести энергии наблюдаемых ровибронных переходов на экспериментальном уровне точности, но не дают возможности прогнозировать спектральные свойства молекулы за рамками наблюдаемого интервала ν и J .

Имеющиеся квантово-химические расчеты электронной структуры [21–28] позволили получить надежные межатомные потенциалы для ряда низколежащих дублетных и квартетных электронных состояний CN-радикала в широком интервале межъядерных расстояний. В работах [23,25–28] также были рассчитаны функции собственных дипольных моментов и моментов разрешенных по спину электронных переходов. Однако информация о матричных элементах (МЭ) неадиабатического взаимодействия между электронными состояниями молекулы CN [29] в литературе практически отсутствует, хотя очевидна их необходимость для расчета тонкой структуры соответствующих ровибронных термов.

В связи с этим в настоящей работе был выполнен квантово-химический расчет электронных МЭ спин-орбитального и электронно-вращательного взаимодействий между возбужденными $(1-4)^2\Pi$ -состояниями и основным $X^2\Sigma^+$ -состоянием молекулы CN с целью количественного описания эффекта γ -удвоения вращательных уровней основного электронного состояния. Полученная неэмпирическая функция γ -удвоения $\gamma(R)$ была оптимизирована совместно с аналитической функцией потенциальной энергии $U(R)$ с целью воспроизведения высокоточных частот вращательных и колебательно-вращательных переходов $X^2\Sigma^+$ -состояния молекулы CN на экспериментальном (спектроскопическом) уровне точности.

Ровибронная структура состояния $X^2\Sigma^+$

Описание тонкой структуры вращательных уровней энергий мультиплетных (в частности, дублетных) электронных состояний требует обязательного учета во вращательной части молекулярного гамильтониана $\mathbf{H}_{\text{rot}} = B(R)(\mathbf{J} - \mathbf{L} - \mathbf{S})^2$ взаимодействий спинового \mathbf{S} и орбитального \mathbf{L} угловых моментов электронов с полным

вращательным угловым моментом молекулы \mathbf{J} [20,30]. Здесь и далее

$$B(R) = \hbar^2/2\mu R^2,$$

где R — межатомное расстояние, μ — приведенная масса молекулы.

Для изолированного состояния $^2\Sigma^+$ учет скалярного $\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}$ взаимодействия (который смешивает различные Ω -компоненты мультиплетта) приводит к так называемому „b“-случаю связи по Гунду, когда „хорошее“ (в отсутствие внешнего электромагнитного поля) квантовое число J заменяют на „почти хорошее“ $N = J \pm 1/2$ („+“ для e-уровней и „-“ для f-уровней соответственно). В этом представлении дважды вырожденные ровибронные уровни энергии молекулы $E_{\nu N}$ являются решением радиального уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + U(R) + B(R)N(N+1) \right] \Psi_{\nu N}(r) = E_{\nu N} \Psi_{\nu N}(R), \quad (1)$$

где $U(R)$ — межатомный потенциал, $\Psi_{\nu N}(R)$ — радиальная волновая функция.

Вырождение вращательных уровней с одинаковым значением N снимается уже в первом порядке теории возмущений из-за наличия в полном гамильтониане молекулы оператора спин-вращательного взаимодействия $\mathbf{H}_{SR} = \gamma^{SR}(R)\mathbf{N} \cdot \mathbf{S}$ [24], где $\gamma^{SR} = B(R)\gamma^{(0)}(R)$, $\gamma^{(0)}$ — слабо зависящий от R безразмерный электронный параметр порядка 10^{-5} [23]. Для чистого „b“-случая связи по Гунду диагональный МЭ оператора \mathbf{H}_{SR} имеет [24] вид

$$\gamma^{SR}(R)[J(J+1) - N(N+1) - S(S+1)]/2.$$

На расщепление e- и f-подуровней состояния $^2\Sigma^+$ также влияют регулярные неадиабатические взаимодействия с удаленными состояниями $^2\Pi$, вызванные ненулевыми МЭ оператора спин-орбитального \mathbf{H}_{SO} и $\mathbf{L} \cdot \mathbf{J}$ -связывания. С помощью контактных преобразований Ван-Флека [31] можно показать, что в этом случае эффективный параметр спин-вращательного взаимодействия уровней состояния $^2\Sigma^+$ приобретает вид $\gamma^{SR}(R) = B(R)\gamma^{(1)}(R)$, где

$$\gamma^{(1)} = 4 \sum_{\Pi} \frac{\xi_{\Pi \sim \Sigma}^{SO} L_{\Pi \sim \Sigma}^{\pm}}{U_{\Sigma} - U_{\Pi}}, \quad (2)$$

$\xi_{\Pi \sim \Sigma}^{SO}$ — электронный МЭ спин-орбитального взаимодействия, а $L_{\Pi \sim \Sigma}^{\pm}(L_x + iL_y)/\sqrt{2}$ — электронный МЭ электронно-вращательного взаимодействия, U_{Σ} и U_{Π} — адиабатические потенциалы взаимодействующих состояний.

Нетрудно заметить, что разделить вклады величин $\gamma^{(0)}$ и $\gamma^{(1)}$ в суммарный эффект γ -удвоения: $\gamma^{\text{eff}} = \gamma^{(0)} + \gamma^{(1)}$, практически невозможно, так как наблюдаемое значение расщепления имеет одинаковую зависимость от

вращательных квантовых чисел и приведенной массы молекулы. Однако обычно предполагают, что $\gamma^{(0)} \ll \gamma^{(1)}$, и тогда можно считать, что тонкая структура вращательных уровней состояния ${}^2\Sigma^+$ определяется исключительно неадиабатическим взаимодействием с состояниями ${}^2\Pi$. Соответствующее регулярное расщепление e - и f -подуровней вращательного уровня N в этом случае может быть определено из решения радиального уравнения (1) с эффективным добавочным членом [32] вида

$$H_{\text{eff}}^{SR}(R) = \begin{cases} B(R)\gamma^{(1)}N/2 & \text{для } e\text{-уровней,} \\ -B(R)\gamma^{(1)}(N+1)/2 & \text{для } f\text{-уровней.} \end{cases} \quad (3)$$

Расчет электронной структуры

Неэмпирический расчет электронной структуры радикала CN включал помимо кривых потенциальной энергии также недиагональные МЭ спин-орбитального и электронно-вращательного взаимодействий между основным $X^2\Sigma^+$ - и первыми возбужденными $(1-4)^2\Pi$ -электронными состояниями в интервале межъядерных расстояний $R \in [0.8, 2.2] \text{ \AA}$ с шагом $\sim 0.05 \text{ \AA}$. Для обоих атомов использовался полноэлектронный базис aug-cc-pCVQZ-DK [33–36]. Скалярный релятивистский эффект учитывался в рамках эффективного гамильтониана Дугласа–Крола [37–39]. Оптимизированные молекулярные орбитали были получены с помощью усредненного по состояниям мультиконфигурационного метода самосогласованного поля (SA-CASSCF) [40] в активном пространстве, состоящем из одиннадцати орбиталей ($7a_1, 2b_1, 2b_2$), соответствующих точечной группе C_{2v} . Последующий учет динамической корреляции методом конфигурационного взаимодействия [41,42] включал только одно- и двукратные электронные возбуждения (MR-CISD) и был реализован в том же активном пространстве, что и SA-CASSCF, но при этом две низшие основные орбитали ($2a_1$) всегда оставались дважды занятыми. Влияние многократных возбуждений на энергию рассматриваемых состояний учитывалось с помощью поправки Давидсона [43]. Все электронные расчеты были выполнены средствами программного пакета MOLPRO [44].

Адиабатические потенциалы электронных состояний $X^2\Sigma^+$, $(1-4)^2\Pi$, полученные из *ab initio* расчетов электронной структуры, представлены на рис. 1 (сплошные линии). Для состояний $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $D^2\Pi$ также приведены высокоточные эмпирические потенциалы Ридберга–Клейна–Риса (РКР), полученные в работах [13,19,45] на основании спектроскопических данных (отмечены кружками).

На рис. 2 представлены результаты неэмпирических расчетов МЭ спин-орбитального (рис. 2, *a*) и электронно-вращательного (рис. 2, *b*) взаимодействий между основным электронным состоянием $X^2\Sigma^+$ и первыми возбужденными состояниями $(1-4)^2\Pi$, а также

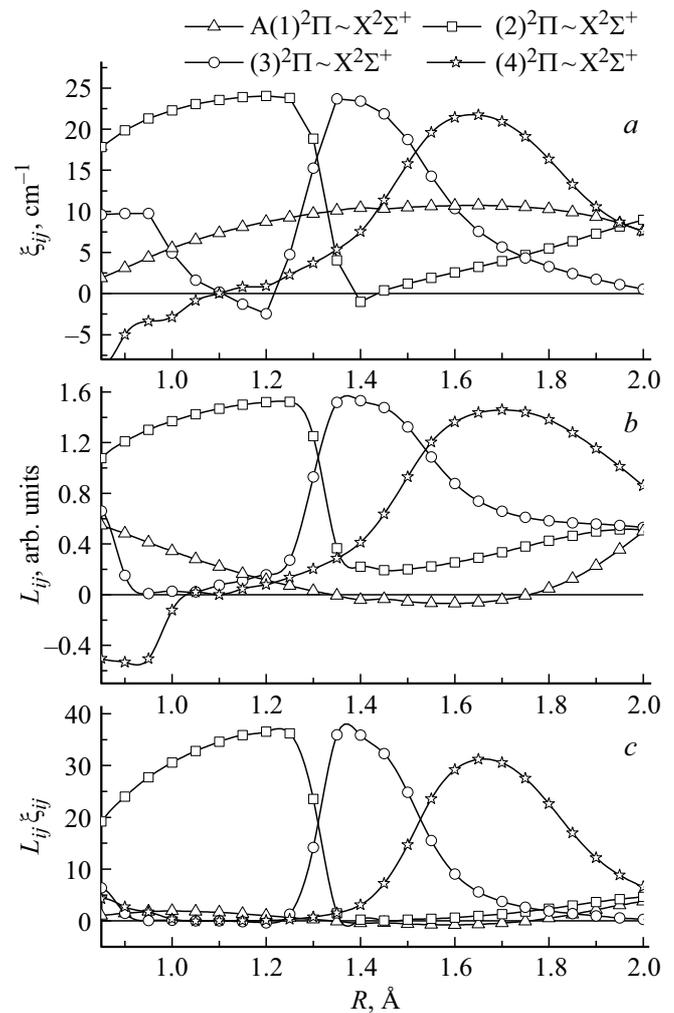


Рис. 2. Неадиабатические матричные элементы: (а) спин-орбитального взаимодействия ξ_{ij} , (б) электронно-вращательного взаимодействия L_{ij} , (с) произведение матричных элементов $L_{ij}\xi_{ij}$.

произведение соответствующих МЭ (рис. 2, *c*). Несмотря на то, что наиболее ожидаемым результатом казалось формирование тонкой структуры за счет взаимодействия состояния $X^2\Sigma^+$ с ближайшим по энергии первым возбужденным состоянием $A^2\Pi$, из рис. 2 ясно видно, что удаленные состояния $(2-4)^2\Pi$ вносят гораздо более существенный вклад в величину $\gamma^{(1)}$, определяющую регулярный характер расщепления колебательно-вращательных уровней состояния $X^2\Sigma^+$. При этом для межъядерных расстояний до $\sim 1.3 \text{ \AA}$ „доминирующее“ влияние оказывает состояние $(2)^2\Pi$, далее вплоть до $\sim 1.6 \text{ \AA}$ — состояние $(3)^2\Pi$, а при больших межъядерных расстояниях — уже $(4)^2\Pi$ -состояние. Следует отметить, что две области межъядерных расстояний ($\sim 1.3 \text{ \AA}$ и $\sim 1.6 \text{ \AA}$), где наблюдается резкое изменение спин-орбитального и электронно-вращательного взаимодействий в зависимости от R , соответствуют областям

попарного квазипересечения потенциальных кривых состояний $(2-3)^2\Pi$ и $(3-4)^2\Pi$ соответственно (рис. 1).

Оптимизация межатомного потенциала и параметра γ -удвоения

Функции потенциальной энергии и параметра спин-вращательного взаимодействия основного состояния $X^2\Sigma^+$ были оптимизированы с целью описания наблюдаемых уровней энергии на экспериментальном (спектроскопическом) уровне точности. Для этого эффективный межатомный потенциал был задан аналитической функцией в форме расширенного осциллятора Морзе (expanded Morse oscillator, EMO) [46]:

$$U_{\text{EMO}} = D_e(1 - e^{-\beta_{\text{EMO}}(R-R_e)})^2. \quad (4)$$

Здесь D_e — энергия диссоциации, R_e — равновесное межъядерное расстояние [13], β_{EMO} — полиномиальная функция приведенной радиальной координаты y^i и безразмерных параметров β_i :

$$\beta_{\text{EMO}} = \sum_{i=0}^N \beta_i y^i, \quad (5)$$

$$Y = \frac{(R^q - R_{\text{ref}}^q)}{(R^q + R_{\text{ref}}^q)}. \quad (6)$$

Для фиксированных параметров R_{ref} и q были приняты следующие значения: $R_{\text{ref}} = 1.4 \text{ \AA}$, $q = 3$.

Функция спин-вращательного взаимодействия $\gamma^{\text{eff}}(R)$, входящая в эффективный гамильтониан, была масштабирована следующим образом:

$$\gamma^{\text{eff}}(R) = a\gamma^{(ab)}(R), \quad (7)$$

где a — варьируемый параметр, а функция $\gamma^{(ab)}(R)$ получена по (2) на основании проведенных квантово-химических расчетов.

Поиск оптимальных параметров осуществлялся путем минимизации величины

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{v_{\text{exp}}^i - v_{PW}^i}{\sigma_{\text{exp}}} \right)^2, \quad (8)$$

где v_{exp}^i — экспериментальная частота перехода, v_{PW}^i — частота перехода, рассчитанная по (1) с потенциалом U_{EMO} (4), σ_{exp} — погрешность в определении экспериментальной частоты.

Особенностью электронной структуры молекулы CN, как уже отмечалось, является близость низколежащих электронных состояний в валентных областях межъядерных расстояний. Так, основное состояние $X^2\Sigma^+$ пересекается с потенциальной кривой электронного состояния $A^2\Pi$ при 1.5 \AA (рис. 1), что накладывает существенные ограничения на экспериментальные данные, которые могут быть использованы для процедуры минимизации (по уравнению (8)) в рамках используемой модели

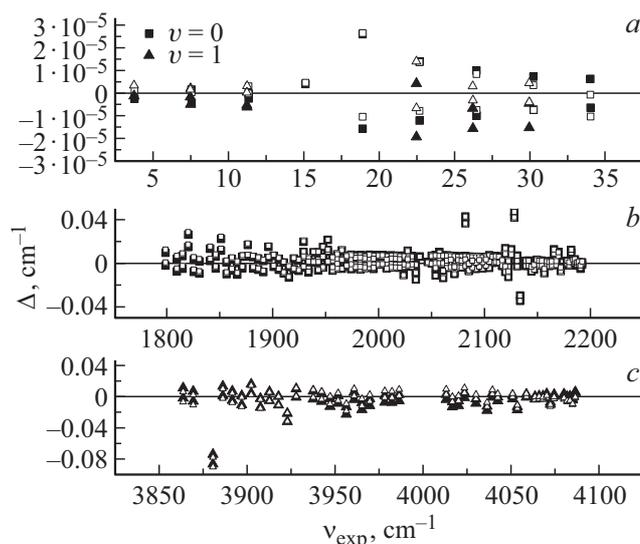


Рис. 3. Абсолютные ошибки определения частот колебательно-вращательных и чисто вращательных переходов $\Delta = v_{\text{exp}} - v_{\text{calc}}$, полученные в данной работе (темные символы) и в работе [13] (светлые символы) для основного изотопомера $^{12}\text{C}^{14}\text{N}$: (a) вращательные переходы для колебательных уровней $v = 0, v = 1$; (b) колебательно-вращательные переходы полосы 0–1; (c) колебательно-вращательные переходы полосы 1–3.

изолированного электронного состояния. Обоснованным является привлечение экспериментальных частот переходов в достаточно узком энергетическом интервале до $\sim 9115 \text{ cm}^{-1}$ [13]. Всего данному условию удовлетворяет 987 экспериментальных частот, включающих колебательно-вращательные переходы полос 0–1, 1–2, 2–3, 0–2, 1–3, а также микроволновые чисто вращательные переходы для колебательных уровней $v = 0$ и $v = 1$, которые и были включены в процедуру минимизации. В качестве начального приближения были использованы результаты настоящих неэмпирических расчетов.

Частоты переходов, рассчитанные с оптимизированными функциями потенциальной энергии и спин-вращательного взаимодействия, демонстрируют очень хорошее согласие с экспериментальными данными (рис. 3). Ошибки в определении частоты перехода ($\Delta = v_{\text{exp}} - v_{\text{calc}}$) для подавляющего большинства использованных экспериментальных данных по абсолютному значению не превышают аналогичные величины, рассчитанные в работе [13] на основании набора эффективных молекулярных постоянных. Средняя погрешность при определении колебательно-вращательных частот составляет $\sim 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, а при определении частот микроволновых переходов достигает $\sim 10^{-6} - 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$. Параметры аналитического потенциала EMO и масштабирующего множителя спин-вращательного взаимодействия представлены в табл. 1.

Сравнение рассчитанных величин $\gamma_v = \langle v | \gamma(R) | v \rangle$ для первых четырех колебательных уровней состояния $X^2\Sigma^+$

Таблица 1. Параметры аналитического потенциала ЕМО (4), построенного для основного состояния $X^2\Sigma^+$ радикала CN, и соответствующий масштабирующий множитель (7) для неэмпирической функции спин-вращательного взаимодействия

D_e, cm^{-1}	62404.9
$R_{\text{ref}}, \text{Å}$	1.4
q	3
$R_e, \text{Å}$	1.17180
β_0	2.676
β_1	0.568
β_2	0.589
β_3	0.189
β_4	-0.167
β_5	$0.990 \cdot 10^{-1}$
β_6	$0.212 \cdot 10^{-1}$
β_7	$0.322 \cdot 10^{-2}$
a	0.962

Таблица 2. Экспериментальные значения спин-вращательной постоянной γ_v [13] и рассчитанные с неэмпирической $\gamma^{ab}(R)$ и оптимизированной $\gamma^{\text{eff}}(R)$ функциями, полученными в настоящей работе

v	γ_v [13]	γ_v^{ab}	γ_v^{eff}
0	0.00725	0.00752	0.00723
1	0.00717	0.00742	0.00713
2	0.00708	0.00733	0.00705
3	0.00698	0.00717	0.00690

с экспериментальными данными [13] приведено в табл. 2. Как видно, даже использование неэмпирической функции γ^{ab} воспроизводит зависимость γ -расщепления от колебательного квантового числа, хотя и демонстрирует систематическое завышение значений по сравнению с экспериментальным \sim на 4%, что, по-видимому, связано с погрешностью электронного расчета. Оптимизированная функция γ^{eff} позволяет получить величины γ_v , совпадающие с экспериментальными данными в пределах точности измерений.

Заключение

В работе получены электронные МЭ спин-орбитального и электронно-вращательного взаимодействий между основным и четырьмя возбужденными электронными состояниями симметрии $^2\Pi$, которые позволили впервые предсказать наблюдаемый эффект γ -удвоения вращательных уровней основного состояния $X^2\Sigma^+$ радикала CN на спектроскопическом уровне точности. Неэмпирические квантово-химические расчёты показали, что для

низших ($v \leq 3$) колебательных уровней состояния $X^2\Sigma^+$ абсолютное значение параметра тонкой структура γ формируется исключительно за счет взаимодействия с удаленным состоянием (2) $^2\Pi$, что подтверждается очень хорошим согласием между теоретической функцией спин-вращательного взаимодействия $\gamma(v)$ и аналогичной эмпирической функцией [13].

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), грант № 19-33-90131. Acknowledgments: The reported study was funded by RFBR, project number 19-33-90131.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Hobbs L.M., Thorburn J.A., Oka T., Barentine J., Snow T.P., York D.G. // *Astrophys. J.* 2004. V. 615. P. 947–957. doi 10.1086/424733
- [2] Ram R., Davis S., Wallace L., Engleman R., Appadoo D., Bernath P. // *J. Mol. Spectrosc.* 2006. V. 237. P. 225–231. doi 10.1016/j.jms.2006.03.016
- [3] Lambert D.L., Sheffer Y., Crane P. // *Astrophys. J.* 1990. V. 359. L19–L22. doi 10.1086/185786
- [4] Uitenbroek H., Tritschler A. // *Astronomy & Astrophysics.* 2007. V. 462. P. 1157–1163. doi 10.1051/0004-6361:20066286
- [5] Shinnaka Y., Kawakita H., Kondo S., Ikeda Y., Kobayashi N., Hamano S., Sameshima H., Fukue K., Matsunaga N., Yasui C., Izumi N., Mizumoto M., Otsubo S., Takenaka K., Watase A., Kawanishi T., Nakanishi K., Nakaoka T. // *Astronomical J.* 2017. V. 154. P. 45–60. doi 10.3847/1538-3881/aa7576
- [6] Nemes L., Mohai M., Donko Z., Berto?ti I. // *Spectrochim. Acta A.* 2000. V. 56. P. 761–767. doi 10.1016/S1386-1425(99)00159-6
- [7] Parigger C.G., Helstern C.M., Jordan B.S., Surmick D.M., Splinter R. // *Molecules.* 2020. V. 25. P. 615. doi 10.3390/molecules25030615
- [8] Liu Y., Duan C., Liu H., Gao H., Guo Y., Liu X., Lin J. // *J. Mol. Spectrosc.* 2001. V. 205. P. 16–19.
- [9] Yang X., Dagdigian P.J. // *Chem. Phys. Lett.* 1998. V. 297. P. 506–514.
- [10] Yang X., Dagdigian P.J., Alexander M.H. // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 112. P. 4474–4484.
- [11] Civiš S., Šedivcová-Uhlíková T., Kubelík P., Kawaguchi K. // *J. Mol. Spectrosc.* 2008. V. 250. P. 20–26. doi 10.1016/j.jms.2008.04.002
- [12] Huebner M., Castillo M., Davies P.B., Roepcke J. // *Spectrochim. Acta A.* 2005. V. 61. P. 57–60.
- [13] Ram R., Wallace L., Bernath P. // *J. Mol. Spectrosc.* 2010. V. 263. P. 82–88. doi 10.1016/j.jms.2010.07.002
- [14] Ram R., Bernath P. // *Astrophys. J. Suppl. Series.* 2011. V. 194. P. 34. doi 10.1088/0067-0049/194/2/34
- [15] Cerny D., Bacis R., Guelachvili G., Roux F. // *J. Mol. Spectrosc.* 1978. V. 73. P. 154–67.

- [16] Prasad C.V.V., Bernath P.F. // J. Mol. Spectrosc. 1992. V. 156. P. 327–340.
- [17] Rehfuß B.D., Suh M.-H., Müller T.A., Bondybey V.E. // J. Mol. Spectrosc. 1992. V. 151. P. 437–458.
- [18] Ram R., Bernath P. // J. Mol. Spectrosc. 2012. V. 274. P. 22–27. doi 10.1016/j.jms.2012.03.008
- [19] Brooke J.S.A., Ram R.S., Western C. M., Li G., Schwenke D.W., Bernath P.F. // Astrophys. J. Suppl. Series. 2014. V. 210. P. 23. doi 10.1088/0067-0049/210/2/23
- [20] Lefebvre-Brion H., Field R.W. The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules: Revised and Enlarged Edition. Academic Press, 2004. 766 p.
- [21] Shi D., Liu H., Zhang X., Sun J., Zhu Z., Liu Y. // J. Mol. Struct. Theochem. 2010. V. 956. P. 10. doi 10.1016/j.theochem.2010.06.015
- [22] Shi D.H., Li W.T., Sun J.F., Zhu Z.L. // JQSRT. 2011. V. 112. P. 2335–2346. doi 10.1016/j.jqsrt.2011.06.002
- [23] Yin Y., Shi D., Sun J., Zhu Z. // Astrophys. J. Suppl. Series. 2018. V. 235. P. 25–38. doi 10.3847/1538-4365/aab26b
- [24] Kalcher J. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2002. V. 4. P. 3311. doi 10.1039/b201498j
- [25] Kulik H.J., Steeves A.H., Field R.W. // J. Mol. Spectrosc. 2009. V. 258. P. 6–12. doi 10.1016/j.jms.2009.08.008
- [26] Ajitha D., Hirao K. // Chem. Phys. Lett. 2001. V. 347. P. 121–126.
- [27] Meléndez F.J., Sandoval L., Palma A. // J. Mol. Struct. Theochem. 2002. V. 580. P. 91. doi 10.1016/S0166-1280(01)00599-1
- [28] Reddy R. R., Ahammed Y.N., Gopal K.R., Basha D.B. // Astrophys. Space Sci. 2003. V. 286. P. 419–436. doi 10.1023/A:1026373811975
- [29] Antipov S.V., Gustafsson M., Nyman G. // J. Chem. Phys. 2011. V. 135. P. 184302. doi 10.1063/1.3562125
- [30] Amiot C., Maillard J.-P., Chauville J. // J. Mol. Spectrosc. 1981. V. 87. P. 196–218. doi 10.1016/0022-2852(81)90089-8
- [31] Van Vleck J.H. // Phys. Rev. 1929. V. 33. P. 467.
- [32] Douay M., Rogers S.A., Bernath P.F. // Mol. Phys. 1988. V. 64. N 3. P. 425–436. doi 10.1080/00268978800100313
- [33] Dunning T.H. // J. Chem. Phys. 1989. V. 90. P. 1007–1023. doi 10.1063/1.456153
- [34] Jong W.A., Harrison R.J., Dixon D.A. // J. Chem. Phys. 2001. V. 114. P. 48. doi 10.1063/1.1329891
- [35] Kendall R.A., Dunning T.H., Harrison R.J. // J. Chem. Phys. 1992. V. 96. P. 6796–6806. doi 10.1063/1.462569
- [36] Woon D.E., Dunning T.H. // J. Chem. Phys. 1995. V. 103. P. 4572–4585. doi 10.1063/1.470645
- [37] Reiher M., Wolf A. // J. Chem. Phys. 2004. V. 121. P. 2037–2047.
- [38] Reiher M., Wolf A. // J. Chem. Phys. 2004. V. 121. P. 10945–10956.
- [39] Wolf A., Reiher M., Hess B.A. // J. Chem. Phys. 2002. V. 117. P. 9215–9226.
- [40] Werner H.-J., Meyer W. // J. Chem. Phys. 1981. V. 74. P. 5794.
- [41] Werner H.-J., Knowles P.J. // J. Chem. Phys. 1988. V. 89. P. 5803.
- [42] Knowles P.J., Werner H.-J. // Chem. Phys. Lett. 1988. V. 145. P. 514.
- [43] Langhoff S.R., Davidson E.R. // Int. J. Quant. Chem. 1974. V. 8. P. 61.
- [44] Werner H.-J., Knowles P.J., Knizia G., Manby F.R., Schutz M. et al. MOLPRO, version 2010.1, a package of ab initio programs, <http://www.molpro.net>
- [45] Fallon R.J., Vanderslice J.T., Cloney R.D. // J. Chem. Phys. 1962. V. 37. P. 1097–1100. doi 10.1063/1.1733220
- [46] Lee E.G., Seto J.Y., Hirao T., Bernath P.F., Le Roy R.J. // J. Mol. Spectrosc. 1999. V. 194. P. 197. doi 10.1006/jmsp.1998.7789