

ЭЛЕКТРОННАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ МОЛЕКУЛ В ТЕОРИИ КВАНТОВОГО ДЕФЕКТА

А. М. Бутырский, Б. А. Зон*

Воронежский государственный университет
394006, Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 16 марта 2006 г.

В рамках теории квантового дефекта предложен алгоритм расчета тензора электронной динамической поляризуемости молекул, в том числе и полярных. Алгоритм предполагает использование *ab initio* методов для основных и низколежащих электронных состояний. Результаты вычислений показателя преломления и коэффициента деполаризации света газообразной окиси азота NO находятся в хорошем согласии с экспериментом.

PACS: 33.15.Kr

1. ВВЕДЕНИЕ

Поляризуемость молекул является их важной характеристикой, определяющей большое число оптических, физико-химических и других процессов. Однако систематические методы вычисления молекулярных поляризуемостей в широких частотных диапазонах в настоящее время отсутствуют [1]. В недавних работах [2–4] был предложен способ расчета поляризуемостей атомов, основанный на использовании кулоноподобного приближения квантового дефекта для описания виртуальных возбужденных электронных состояний и состояний непрерывного спектра. В данной работе этот метод применяется для расчета поляризуемости простых молекул на примере основного состояния $X^2\Pi$ молекулы NO.

Напомним вначале основную идею метода. Для простых молекул возбужденные электронные состояния удовлетворительно описываются формулой Ридберга. Тензор поляризуемости таких молекул может быть представлен в виде суммы двух частей: «неридберговской», учитывающей вклад низколежащих состояний, и ридберговской, учитывающей вклад дискретных состояний, описываемых формулой Ридберга, а также непрерывного спектра. При этом к расчету ридберговской части тензора поляризуемости можно применить метод квантового дефекта, а основное и низколежащие состояния

учесть точными методами, например, используя волновые функции, полученные численным решением уравнения Шредингера. В настоящей работе для построения волновых функций основного и низколежащих состояний использовался пакет программ GAUSSIAN03. Поскольку молекула NO является полярной, необходима модификация метода вычислений ридберговской части поляризуемости для учета влияния постоянного дипольного момента на движение ридберговского электрона.

В работе используется атомная система единиц.

2. ОДНОЭЛЕКТРОННАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ

Одноэлектронная функция Грина оптического электрона в полярных молекулах в области $r, r' > r_c$, где r_c — радиус молекулярного остова, определяется уравнением Шредингера:

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{r} + \frac{d}{r^2} \cos \theta - E \right] G(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1)$$

Здесь Z и d — заряд и дипольный момент молекулярного остова, θ — угол между направлением дипольного момента и радиус-вектором оптического электрона.

Решение этого уравнения можно записать в виде разложения по диполь-сферическим функциям Z , являющимся решением уравнения:

*E-mail: zon@niif.vsu.ru

$$- \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial \varphi^2} \right] + 2d\mathcal{Z} \cos \theta = \eta \mathcal{Z}. \quad (2)$$

Собственные числа η удобно записать в виде

$$\eta = \mathcal{L}(\mathcal{L} + 1), \quad (3)$$

где \mathcal{L} — нецелочисленный аналог орбитального момента. Числа η и \mathcal{L} можно нумеровать целыми числами $L \geq |m|$, определяемыми из условий:

$$\eta_{Lm} \rightarrow L(L + 1), \quad \mathcal{L}_{Lm} \rightarrow L, \quad d \rightarrow 0. \quad (4)$$

Диполь-сферические функции $\mathcal{Z}_{Lm}(d; \mathbf{r})$ могут быть представлены в виде разложения по обычным сферическим функциям:

$$\mathcal{Z}_{Lm}(d; \mathbf{r}) = \sum_{l \geq |m|} a_{Ll} Y_{lm}(\mathbf{r}), \quad (5)$$

а коэффициенты разложения a_{Ll} находятся из рекуррентного соотношения:

$$2d \left(\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1} \right)^{1/2} a_{L, l-1} + [l(l+1) - \mathcal{L}(\mathcal{L}+1)] a_{Ll} + 2d \left[\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2} a_{L, l+1} = 0, \quad l \geq m \quad (6)$$

при $d \rightarrow 0$, $a_{Ll} \rightarrow \delta_{Ll}$. Отметим, что эффективный орбитальный момент может принимать отрицательные значения. Отрицательность \mathcal{L}_{Lm} означает, что притяжение электрона к диполю превышает центробежное отталкивание.

Записывая теперь G в виде

$$G(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{L \geq |m|} g_{Lm}(E; r, r') \mathcal{Z}_{Lm}(d; \mathbf{r}) \mathcal{Z}_{Lm}^*(d; \mathbf{r}'), \quad (7)$$

для радиальной функции Грина $g_{Lm}(E; r, r')$ можно получить следующее выражение (ср. [2]):

$$g_{Lm}(E; r, r') = \frac{\nu}{Z r r'} \frac{\Gamma(\mathcal{L}_{Lm} + 1 - \nu)}{\Gamma(\mathcal{L}_{Lm} + 1 + \nu)} \times W_{\nu, \mathcal{L}_{Lm} + 1/2} \left(\frac{2Zr_{>}}{\nu} \right) \times \left[\frac{\Gamma(\mathcal{L}_{Lm} + 1 + \nu)}{\Gamma(2\mathcal{L}_{Lm} + 2)} M_{\nu, \mathcal{L}_{Lm} + 1/2} \left(\frac{2Zr_{<}}{\nu} \right) + \frac{\sin(\pi \mu_{Lm})}{\sin[\pi(\mu_{Lm} + \nu - \mathcal{L}_{Lm})]} W_{\nu, \mathcal{L}_{Lm} + 1/2} \left(\frac{2Zr_{<}}{\nu} \right) \right]. \quad (8)$$

Здесь $M(x)$ — регулярная, а $W(x)$ — сингулярная при $x = 0$ функции Уиттекера; $r_{<} = \min(r, r')$, $r_{>} = \max(r, r')$, $\nu = Z/\sqrt{-2E}$.

Квантовый дефект μ_{Lm} для полярных молекул определяется следующим образом [5]. В отсутствие короткодействующего кора, при наличии только кулоновского поля и поля диполя спектр одноэлектронных собственных состояний определяется выражением

$$E_{nLm} = -\frac{Z^2}{2N_{nLm}^2}, \quad N_{nLm} = n + \mathcal{L}_{Lm} + 1, \quad (9)$$

где N_{nLm} — нецелое главное квантовое число, переходящее в целое главное квантовое число водородоподобного атома при $d \rightarrow 0$; $n = 0, 1, \dots$ — радиальное квантовое число. Отличие N_{nLm} от целого числа обусловлено отличием от целого числа эффективного орбитального момента \mathcal{L}_{Lm} . Наличие короткодействующего кора изменяет энергии состояний: $E_{nLm} \rightarrow \varepsilon_{nLm}$. Иными словами, электронному состоянию молекулы с энергией ε_{nLm} соответствует некоторое состояние в модельном потенциале «кулоновское поле + поле диполя». Поскольку в базисе объединенного атома имеется взаимно-однозначное соответствие между реальными электронными состояниями молекулы и электронными состояниями в потенциале «кулоновское поле + поле диполя», подобное соответствие будет и в любом ином базисе. Записав спектр реальных одноэлектронных состояний молекулы в виде, аналогичном (9):

$$\varepsilon_{nLm} = -\frac{Z^2}{2\nu_{nLm}^2}, \quad \nu_{nLm} \equiv \nu(\varepsilon_{nLm}), \quad (10)$$

выразим квантовый дефект в этих состояниях соотношением

$$\mu_{Lm}(\varepsilon_{nLm}) = N_{nLm} - \nu_{nLm}. \quad (11)$$

Формула (11), вообще говоря, однозначно определяет аналитическую функцию $\mu_{Lm}(E)$, поскольку $\varepsilon_{nLm} \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Однако, как хорошо известно, задача численного аналитического продолжения является неустойчивой. Поэтому при $E \neq \varepsilon_{nLm}$ квантовый дефект $\mu_{Lm}(E)$ следует определять обычной интерполяцией (при $E < 0$) или экстраполяцией (при $E > 0$) по своим значениям в связанных состояниях (11). При этом удобнее проводить интерполяцию и экстраполяцию не функции $\mu_{Lm}(E)$, а функции $\mu_{Lm}(\nu)$, учитывая, что E и ν однозначно связаны друг с другом. Неопределенность, обусловленная ошибкой экспериментально измеряемого спектра связанных состояний, как показывают вычисления, в большинстве случаев невелика.

Функция Грина (8) имеет полюсы при энергиях ε_{nLm} , определяемых формулами (9)–(11), в которых обращается в нуль синус в знаменателе во втором слагаемом в квадратных скобках (8). Однако формально полюсы возникают и в одночастичных состояниях, заполненных другими электронами, в которых рассматриваемый оптический электрон не может находиться вследствие принципа Паули. Кроме того, имеются ложные полюсы, в которых не выполняется условие

$$N_{nLm} \geq \mathcal{L}_{Lm} + 1, \quad (12)$$

следующее из формулы (9). Возникают нефизические состояния типа $1p$, $2d$ и т. п. в атомах. Для устранения подобных «лишних» полюсов вводится функция $\Pi(\nu)$, определяемая следующим образом:

$$\begin{aligned} \Pi_{Lm}(\nu) &= \\ &= \prod_{k=1}^{[\mathcal{L}_{Lm}]} [(k + \{\mathcal{L}_{Lm}\}) \text{sign} \mathcal{L}_{Lm} - \mu_{Lm}(\nu) - \nu], \quad (13) \end{aligned}$$

где $\{\mathcal{L}_{Lm}\}$ означает дробную часть числа $|\mathcal{L}_{Lm}|$, а $[\mathcal{L}_{Lm}]$ — его целую часть. Например, при $\mathcal{L}_{Lm} = 1.5$, $[\mathcal{L}_{Lm}] = 1$, и функция (13) позволяет устранить из функции Грина полюс с $N = 1.5$, не удовлетворяющий условию (12). Аналогично, при $\mathcal{L}_{Lm} = -1.5$, $[\mathcal{L}_{Lm}] = 1$ и из функции Грина устраняется полюс с $N = -1.5$. При отсутствии лишних полюсов ($[\mathcal{L}_{Lm}] = 0$), $\Pi(\nu) = 1$.

Функция $\Xi(E)$ совпадает с функцией (13) в собственных состояниях модельного потенциала «кулоновское поле + поле диполя»:

$$\Xi_{Lm}(E_{nlm}) = \Pi_{Lm}(N_{nLm}). \quad (14)$$

Соотношение (14) однозначно определяет целую¹⁾ функцию Ξ_{Lm} по бесконечному множеству точек E_{nLm} , поскольку эти точки сгущаются к нулю при $n \rightarrow \infty$. Но по тем же причинам, что и в случае квантового дефекта, эту функцию практически проще восстановить, рассматривая в качестве аргумента не энергию E , а величину ν .

Введение функции Ξ_{Lm} позволяет устранить из функции Грина полюсы модельного потенциала, которые связаны с полюсами гамма-функции $\Gamma(\mathcal{L}_{Lm} + 1 - \nu)$ в (8). В этом нетрудно убедиться

¹⁾ Напомним, что целой называется аналитическая функция, не имеющая особых точек нигде в комплексной плоскости, за исключением бесконечно удаленной точки. Функции Ξ и Π несколько отличаются от аналогичных функций, введенных в работе [2] и использовавшихся в работах [3, 4].

непосредственно, учитывая, что при $\nu \rightarrow N_{nLm}$ обе функции Уиттекера в квадратных скобках формулы (8) сводятся к полиномам Лагерра.

3. ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ МОЛЕКУЛЫ NO

Расчет тензора электронной статической поляризуемости основного состояния $|0\rangle$ молекулы NO осуществлялся по формуле

$$\alpha_{ik}(0) = 2\langle 0|D_i G(\varepsilon_0) D_k|0\rangle, \quad (15)$$

а тензора электронной динамической поляризуемости — по формуле

$$\alpha_{ik}(\omega) = \langle 0|D_i G(\varepsilon_0 + \omega) D_k + D_k G(\varepsilon_0 - \omega) D_i|0\rangle. \quad (16)$$

Здесь ε_0 — энергия основного состояния молекулы, $D_{i,k}$ — компоненты оператора дипольного момента, $G(E)$ — электронная функция Грина. На первом этапе в качестве $G(E)$ была выбрана функция Грина, построенная в рамках метода квантового дефекта для двухатомных полярных молекул и приведенная в предыдущем разделе. На втором этапе проведена корректировка вклада в тензор поляризуемости низколежащих электронных состояний методом «вычитания–добавления» [2]. Вклад колебательных и вращательных возбуждений в полную поляризуемость молекулы не учитывался. Вклад этих возбуждений важен либо для малых частот, когда существенны переходы только в основном электронном терме, либо для частот, резонансных некоторому электронному переходу. Обе эти области здесь не рассматриваются. Обзор результатов, относящихся к колебательной и вращательной поляризуемостям, можно найти в работе [6].

Значения орбитальных параметров \mathcal{L}_{Lm} , найденные из уравнений (6), приведены в табл. 1. Для дипольного момента остова молекулы NO было выбрано значение $d = 0.5D$, рекомендуемое в работе [7]. Как видно, эффективные орбитальные квантовые числа близки к целым значениям, что объясняется небольшой величиной дипольного момента остова. Данные табл. 1, условие нормировки и уравнение (6) использовались для получения значений коэффициентов разложения a_{Ll} .

Интегрирование в уравнениях (15), (16) выполнялось численно с использованием пакета программ Mathematica 5.0. Для корректного учета низколежащих состояний тензор поляризуемости записывался в виде (для краткости приводятся диагональные компоненты тензора)

Таблица 1. Орбитальные параметры \mathcal{L}_{Lm}

m = 0				m = 1				m = 2			
L = 0	L = 1	L = 2	L = 3	L = 1	L = 2	L = 3	L = 4	L = 2	L = 3	L = 4	L = 5
-0.0262846	0.996557	2.00325	2.9993	0.997417	1.99882	2.99934	3.99958	1.99926	2.99947	3.99963	4.99974

$$\alpha_{ii} = \alpha_{ii}^{(0)} - \left(\sum_{k=1}^K \frac{|\langle 0|D_i|\psi_k^{(0)}\rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_0 + \hbar\omega} + \frac{|\langle 0|D_i|\psi_k^{(0)}\rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_0 - \hbar\omega} \right) + \left(\sum_{k=1}^K \frac{|\langle 0|D_i|\psi_k\rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_0 + \hbar\omega} + \frac{|\langle 0|D_i|\psi_k\rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_0 - \hbar\omega} \right). \quad (17)$$

Здесь $\alpha^{(0)}$ — поляризуемость молекулы в теории квантового дефекта, $\psi_k^{(0)}$ — электронная молекулярная волновая функция в этой же теории; ψ_k — «точная» электронная молекулярная волновая функция, рассчитываемая методами *ab initio*, $\varepsilon_0, \varepsilon_k$ — электронные уровни энергии соответственно основного и возбужденных состояний, не описываемых формулой Ридберга. Число замещаемых состояний K определялось эмпирически сходимостью метода. Практически оказалось достаточным выбрать число $K = 2$ (см. ниже). В случае атомов благородных газов число K также было мало (не превышало $K = 4$ [2]).

Волновые функции ψ_0 основного состояния валентного электрона рассчитывались методом Меллера–Плессета MP5, учитывающим корреляционные поправки до пятого порядка. Использовался базисный набор 6-31G(d). Как известно, волновые функции, рассчитанные *ab initio*, являются достаточно точными для основного состояния, однако для возбужденных состояний эта точность не всегда удовлетворительна. Поэтому в качестве $\langle 0|D_i|\psi_k\rangle$ были взяты экспериментальные значения квадрата дипольного момента электронного перехода для равновесного межъядерного расстояния [8]. Такой подход, использовавшийся для расчетов динамической поляризуемости атомов в работе [4], применяется и здесь. В соответствии с формулой (17) экспериментальные значения сил осцилляторов использовались для учета вклада в тензор поляризуемости двух нижних электронных состояний $B^2\Pi, C^2\Pi$.

Средняя поляризуемость молекулы NO определяется известным выражением:

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{3}(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}). \quad (18)$$

Рассчитанные значения тензора динамической поляризуемости приведены в табл. 2.

Средняя динамическая поляризуемость определяет показатель преломления газа на частоте ω в соответствии с известной формулой:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} N \bar{\alpha}, \quad (19)$$

где $N = 2.6875 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ — число Лошмидта. Для желтой линии натрия (длина волны 589.3 нм) расчет дает значение

$$n = 1.000293.$$

Экспериментальное значение показателя преломления для этой длины волны [7] равно

$$n_{exp} = 1.000297.$$

Как видно, расчетное и экспериментальное значения хорошо согласуются.

Значения средней статической поляризуемости молекулы NO, приведенные в табл. 2, также хорошо совпадают с данными работ [9, 10], согласно которым $\bar{\alpha} = 11.53$ ат. ед.

При расчете поляризуемости молекул с помощью сил осцилляторов часто возникает вопрос об относительном вкладе в поляризуемость состояний дискретного и непрерывного спектров. Используемый в данной работе метод функции Грина, к сожалению, не позволяет ответить на него. Тем не менее представление об относительном вкладе в поляризуемость состояний дискретного спектра можно составить, рассматривая вклад добавленных состояний $B^2\Pi$ и $C^2\Pi$. В табл. 2 указан вклад соответствующих состояний в zz -компоненту тензора поляризуемости, поскольку в xx - и yy -компоненты они вкладов не дают. Как видно, этот вклад является небольшим. Например, в статическую поляризуемость вклад двух нижних возбужденных электронных состояний $B^2\Pi, C^2\Pi$ составляет соответственно 2.21 % и 8.73 %.

Таблица 2. Статическая и динамическая поляризуемости основного состояния молекулы NO

$h\omega$, ат. ед.	$\alpha_{xx,yy}$, ат. ед.	α_{zz} , ат. ед.	$B^2\Pi(zz)$, ат. ед.	$C^2\Pi(zz)$, ат. ед.	$\bar{\alpha}$, ат. ед.	$B^2\Pi$, ат. ед.	$C^2\Pi$, ат. ед.
0	9.65236	14.382	0.745235	2.947321	11.2259	0.248412	0.98244
0.015	9.66221	14.3876	0.72027	2.95912	11.2373	0.24009	0.986374
0.03	9.69224	14.4843	0.731598	2.99511	11.2896	0.243866	0.998369
0.045	9.74341	14.6428	0.751291	3.05706	11.3765	0.25043	1.01902
0.06	9.81805	14.8755	0.780712	3.14824	11.5039	0.260237	1.04941
0.0773212	9.93852	15.2581	0.829786	3.29673	11.7097	0.276529	1.09891
0.09	10.0546	15.6175	0.879069	3.44151	11.9089	0.293023	1.14717
0.105	10.2367	16.1728	0.957476	3.66332	12.2154	0.319159	1.22111
0.12	10.4843	16.9015	1.06732	3.95763	12.6234	0.355773	1.31921
0.135	10.8592	17.8659	1.22683	4.35409	13.1948	0.408943	1.45136
0.15	11.61	19.1758	1.47284	4.90303	14.1319	0.490946	1.63434
0.165	17.8015	21.0921	1.89221	5.69688	18.9008	0.630738	1.89896
0.167683	83.456	16.5606	1.99976	5.87659	61.1575	0.666588	1.95886
0.1685	-29.2011	16.6874	2.03537	5.9342	-13.9049	0.678457	1.97807
0.18	9.32538	24.0268	2.74975	6.92485	14.2259	0.916582	2.30828
0.195	10.7943	29.9942	5.41927	9.04376	17.1943	1.80642	3.01459
0.21	11.8171	-80.9199	-111.761	13.5075	-19.0952	-37.2538	4.50251
0.225	13.6839	45.9071	-4.61354	28.7478	24.0603	-1.53785	9.5825
0.2363	15.1298	326.338	-2.61257	291.437	118.866	-0.810855	97.1455
0.239127	16.0129	-116829	-2.34895	-231.596	-28.2678	-0.782984	-71.1987
0.24	16.4467	149.493	-2.27847	-139.491	60.7956	-0.75949	-46.4971
0.240965	16.8878	-294.066	2.20423	-100.394	-86.7635	-0.734744	-33.4647
0.255	13.7029	-14.9202	-1.48069	-192939	4.1619	-0.493564	-6.43131
0.27	37.2556	-3.44615	-1.07973	-10.0809	23.6883	-0.359909	-3.3603
0.283109	3.80992	-2.25654	-0.864248	-7.00234	1.78777	-0.288083	-2.33411
0.283427	12.201	-1.11818	-0.859983	-6.9496	7.76124	-0.286661	-2.31653
0.284172	141.389	13.868	-0.850137	-6.82888	98.8818	-0.283379	-2.27629
0.284327	-4525.72	55.5496	-0.848113	-6.80425	-2998.63	-0.282704	-2.26808
0.384366	-529.216	125.171	-0.84761	-6.79814	-311.087	-0.282537	-2.26605

Примечание. Столбцы $B^2\Pi(zz)$ и $C^2\Pi(zz)$ показывают вклад этих состояний в zz -компоненту тензора поляризуемости. Последние два столбца показывают соответственно вклад этих состояний в среднюю поляризуемость.

4. КОЭФФИЦИЕНТ ДЕПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТА

Расчет степени деполаризации света проводился по формуле, связывающей коэффициент деполаризации Δ с анизотропией молекулы [11]:

$$\frac{(\alpha_{zz} - \alpha_{xx})^2}{(\alpha_{zz} + 2\alpha_{xx})^2} = \frac{5\Delta}{6 - 7\Delta}. \quad (20)$$

При этом учитывалось, что в силу симметрии молекулы два из трех главных значений тензора поляризуемости совпадают: $\alpha_{xx} = \alpha_{yy}$.

Результаты расчета степени деполаризации Δ по формуле (20) представлены в табл. 3.

Для желтой линии натрия расчет дает значение

$$\Delta = 0.0265.$$

Экспериментальное значение коэффициента де-

Таблица 3. Коэффициент деполяризации света молекулой NO для различных частот внешнего поля

$\hbar\omega$, ат. ед.	Δ
0	0
0.015	0.0217059
0.03	0.0231413
0.045	0.0239389
0.06	0.0249645
0.0773212	0.0265704
0.09	0.0281143
0.105	0.0303534
0.12	0.0331117
0.135	0.0360071
0.15	0.03665779
0.165	0.00401168
0.167683	0.134499
0.1685	0.538981
0.18	0.1221046
0.195	0.13924
0.21	0.673559
0.225	0.191948
0.2363	0.44232
0.239137	0.66389
0.24	0.36594
0.240965	0.571241
0.255	0.754592
0.27	0.269758
0.283109	0.550091
0.283427	0.26313
0.284172	0.176175
0.284327	0.228318
0.284366	0.349453

поляризации для этой длины волны [12] равно

$$\Delta_{exp} = 0.026.$$

Как видно, рассчитанное в данной работе значение также хорошо согласуется с экспериментальным.

Авторы выражают глубокую благодарность И. Ю. Кретиному за полезные обсуждения. Работа выполнялась при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, CRDF (Award VZ 010-0) и РФФИ (грант № 05-02-16253).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Comp. Meth. Sci. Eng. **4** (2004), special issues 3 and 4.
2. V. E. Chernov, D. L. Dorofeev, I. Yu. Kretinin, and B. A. Zon, Phys. Rev. A **71**, 022505 (2005).
3. V. E. Chernov, D. L. Dorofeev, I. Yu. Kretinin, and B. A. Zon, J. Phys. B **38**, 2289 (2005).
4. Д. Л. Дорофеев, Б. А. Зон, И. Ю. Кретинин, В. Е. Чернов, Опт. и спектр. **99**, 537 (2005).
5. V. E. Chernov and B. A. Zon, J. Phys. B **29**, 4164 (1996).
6. D. M. Bishop, Rev. Mod. Phys. **62**, 343 (1990).
7. <http://spec.jpl.nasa.gov/ftp/pub/catalog/doc/d030011.pdf>.
8. Л. А. Кузнецова, Н. Е. Кузьменко, Ю. Я. Кузяков, Ю. А. Пластинин, *Вероятности оптических переходов двухатомных молекул*, Наука, Москва (1980).
9. M. Medved', M. Urban, V. Kello et al., J. Mol. Struct. (Theochem) **547**, 219 (2001).
10. C. G. Nielson, G. A. Parker, and R. T. Park, J. Chem. Phys. **64**, 2055 (1976).
11. М. В. Волькенштейн, *Молекулярная оптика*, ГИТТЛ, Москва (1951).
12. M. Born, *Optik*, Julius Springer, Berlin (1933), (перевод: М. Борн, *Оптика*, ОНТИ ДНТВУ НКТП, Киев (1937)).