

СЕЧЕНИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ МОЛЕКУЛ КИСЛОРОДА В УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Забелинский И.Е.*, Быкова Н.Г.*, Ибрагимова Л.Б.*, Кузнецова Л.А.***, Шаталов О.П.*

* *Институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова*

** *Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова*
li@imes.msu.ru

Поступила в редакцию 6 апреля 2004 г.

В экспериментах на ударной трубе определены сечения поглощения молекул O_2 в области длин волн $\lambda=190, 195, 210$ и 230 нм при температурах $1000-4000$ К. Измеренные сечения сравнены с другими экспериментальными данными и с вычисленными значениями сечений поглощения молекул O_2 , полученными с помощью баз спектроскопических данных и расчетных программ информационно-вычислительного комплекса «RADEN».

Введение

Целью работы являлось экспериментальное определение сечений поглощения молекул кислорода в ультрафиолетовой области спектра в широком температурном интервале и их сопоставление с результатами теоретических расчетов. Адекватность теоретической модели очень важна в задачах, когда температурная зависимость сечений используется как инструмент исследования кинетики какого-либо процесса за фронтом ударной волны, особенно в термически неравновесных условиях (при неравенстве поступательной T и колебательной температуры молекул T_v). Для молекул O_2 такая ситуация наступает уже при $T \geq 5000$ К. В настоящее время в экспериментах на ударной трубе практически невозможно измерить сечения поглощения в таких условиях, так как в этом случае требуется независимая, не всегда доступная, методика измерения колебательной и поступательной температуры. Поэтому при необходимости провести обработку эксперимента при $T \neq T_v$ с использованием данных по сечениям поглощения именно их вычисление является наиболее целесообразным. В то же время верификация используемой модели расчета сечений требует надежных экспериментальных данных, по крайней мере, в термически равновесных условиях.

Ранее в работах [1-5] уже были получены экспериментальные данные по сечениям поглощения. Измерения проводились за падающей и отраженной ударной волной и в охлаждающемся потоке газа в сопле. В данной работе в падающей ударной волне были выполнены измерения сечений поглощения молекул кислорода в системе Шумана-Рунге для $\lambda=190, 195, 210$ и 230 нм. Проведение этих исследований было вызвано необходимостью иметь достоверные и подробные значения сечений в заведомо термически равновесных условиях при температурах $1000-4000$ К.

Эксперимент

Эксперименты выполнены на ударной трубе с внутренним диаметром 50 мм. Камера высокого давления наполнялась стехиометрической смесью водорода с кислородом (30%), разбавленной инертным газом (70%), до давления 4.5 атм. Смесью поджигалась разрядом, в результате чего давление газа увеличивалось в $6-8$ раз, а температура газа увеличивалась до 1500 К. В камеру низкого давления напускался исследуемый газ - либо неразбавленный кислород, либо смесь O_2 и Ar.

После разрыва диафрагмы, разделяющей каналы высокого и низкого давления ударной трубы, по газу, наполняющему канал низкого давления, распространяется ударная

волна, скорость которой составляла 1.5-3 км/с. Скорость измерялась с помощью пьезодатчиков Сунцова [6], установленных в стенках трубы. Погрешность измерения скорости была не хуже 1-2%. Температура и давление газа определялись в стандартных расчетах течения газа за фронтом падающей ударной волны. В зависимости от скорости ударной волны температура газа менялась в интервале 1000-6000 К, а давление от 0.2 до 1.2 атм.

Излучение зондирующего источника просвечивало измерительную секцию ударной трубы (рис.1) и через оптические окна (с щелью шириной 1 мм) поступало на вакуумный монохроматор ВМ-1 с дифракционной решеткой 1200 штрихов/мм, выделявший узкий участок спектра ($\Delta\lambda=3.2$ нм) в области длин волн $\lambda_0=190, 195, 210$ и 230 нм в системе Шумана-Рунге O_2 (электронный переход $V^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$). С монохроматора излучение попадало на «слепой» фотоумножитель фирмы «Hamamatsu» с пропусканием в области $\lambda=120-300$ нм (рис.2), электрический сигнал с которого регистрировался многоканальным импульсным осциллографом Tektronix. При регистрации излучения частотные характеристики канала «фотоумножитель + осциллограф» с учетом интегрирующего действия оптических щелей на окнах измерительной секции обеспечивали временное разрешение не хуже 0.7 мкс.

Источником света служила дейтериевая лампа, излучающая в области $\lambda=120 - 400$ нм и работающая в непрерывном режиме. При $\lambda>170$ нм дейтериевая лампа излучает сплошной спектр. Типичная осциллограмма излучения лампы с наложенным сигналом поглощения приведена на рис.3. На этой же осциллограмме показан сигнал пьезоэлектрического датчика, дающего информацию о приходе фронта ударной волны и установленного в одном сечении с оптическими окнами.

В момент прихода фронта сигнал лампы, просвечивающей измерительную секцию, начинает меняться вследствие поглощения света нагретым газом. Доля поглощения сначала увеличивается, затем достигает максимума и выходит либо на стационарный уровень, либо уменьшается, если имеет место диссоциация молекул, как на осциллограмме рис.3.

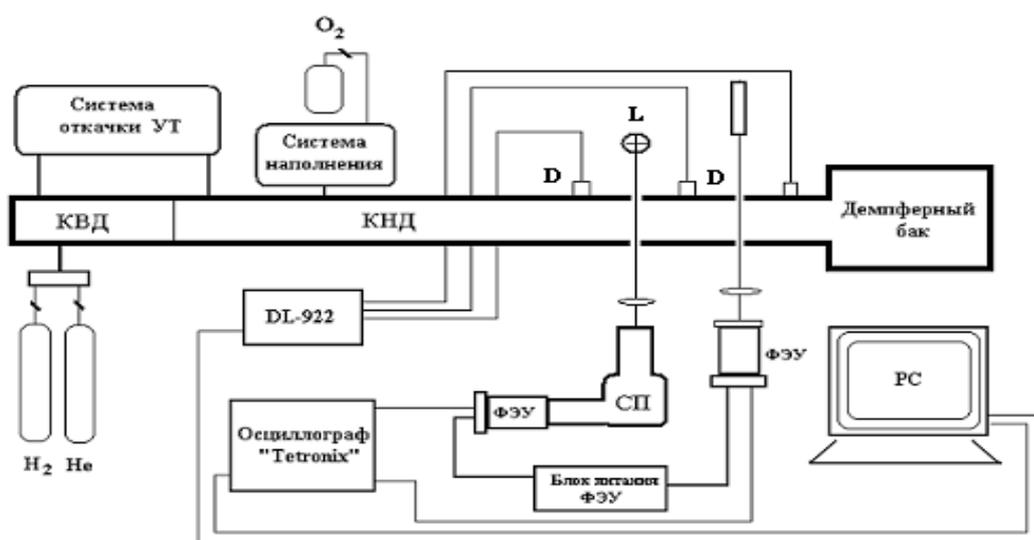
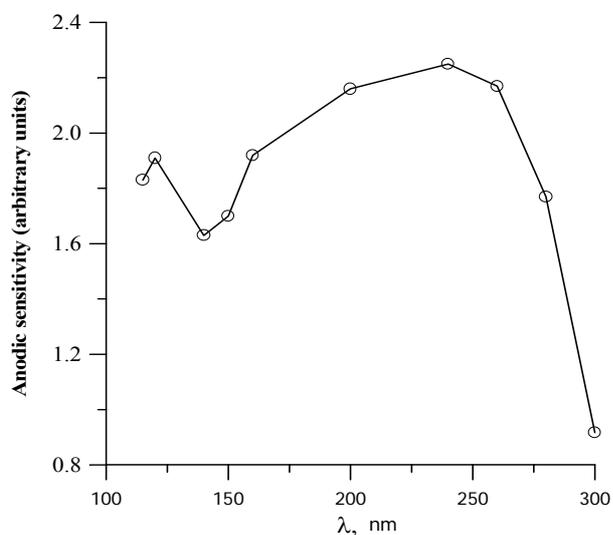


Рис.1. Блок-схема установки. КВД и КНД – камеры высокого и низкого давления ударной трубы; СП – спектральный прибор; D – пьезодатчики; L – дейтериевая лампа.

Поглощательная способность газа в каждый момент времени t определяется из осциллограммы по формуле:

$$A_{\omega} = 1 - i_{\omega} / i_{\omega}^0, \quad (1)$$

где A_{ω} - поглощательная способность, фиксируемая системой регистрации, настроенной на частоту ω ; i_{ω}^0 и i_{ω} - сигналы, соответствующие зондирующему излучению, прошедшему



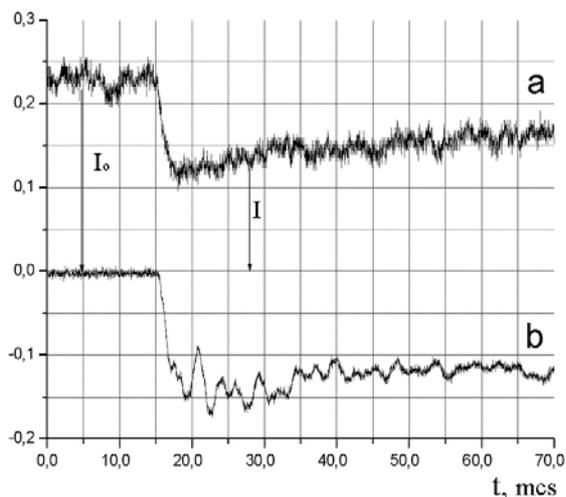
через измерительную секцию ударной трубы соответственно до и после прохождения через нее ударной волны. Поглощение света в этих условиях описывается законом Бэра:

$$A_{\omega} = 1 - \exp(-\sigma_{\omega} n l), \quad (2)$$

где σ_{ω} - спектральное сечение поглощения (см^2), l - длина оптического пути (внутренний диаметр ударной трубы). Сечение поглощения $\sigma_{\omega} = \sigma_{\omega}(T)$, соответствующее длине волны λ_i и интервалу длин волн $\Delta\lambda_i$, определялось с помощью (2) при известных значениях концентрации O_2 (n) и измеренной в эксперименте величины A_{ω} .

Рис.2. Анодная спектральная чувствительность «слепого» фотоумножителя R6836 «Hamamatsu».

Поглощение в области $\lambda=190-230$ нм обусловлено переходами в системе Шумана-Рунге $X^3\Sigma_g^- \rightarrow B^3\Sigma_u^-$ с возбужденных колебательных уровней основного электронного состояния $X^3\Sigma_g^-$ молекулы O_2 . За фронтом ударной волны происходит колебательное возбуждение молекул кислорода. По мере заселения возбужденных колебательных уровней начинается поглощение света и величина A_{ω} увеличивается от нулевого уровня до некоторого значения, определяемого параметрами газа и соответствующего установлению колебательного



равновесия при $T=T_v$. При наличии диссоциации после достижения максимального уровня поглощения наблюдается его уменьшение из-за дальнейшего общего уменьшения концентрации молекул. Если температура газа невысока и диссоциация практически отсутствует, после установления колебательного равновесия и достижения максимума поглощение остается стационарным (близким к равновесному уровню) в течение достаточно продолжительного времени.

Рис. 3. Осциллограмма поглощения света ($\lambda=230$ нм) молекулами O_2 за фронтом ударной волны (100% O_2), $V=3.16$ км /с, $P_1=5$ Торр, $T= 4500$ К. а) Верхняя кривая – сигнал излучения дейтериевой лампы, измененный поглощением в нагретом газе; I_0 – интенсивность излучения до прихода ударной волны, I – сигнал, прошедший через нагретый газ. б) Нижняя кривая – сигнал пьезодатчика, расположенного в одном сечении с оптическим окном. Ось x - время в лабораторной системе координат в микросекундах. По оси y – амплитуда сигнала в Вольтах.

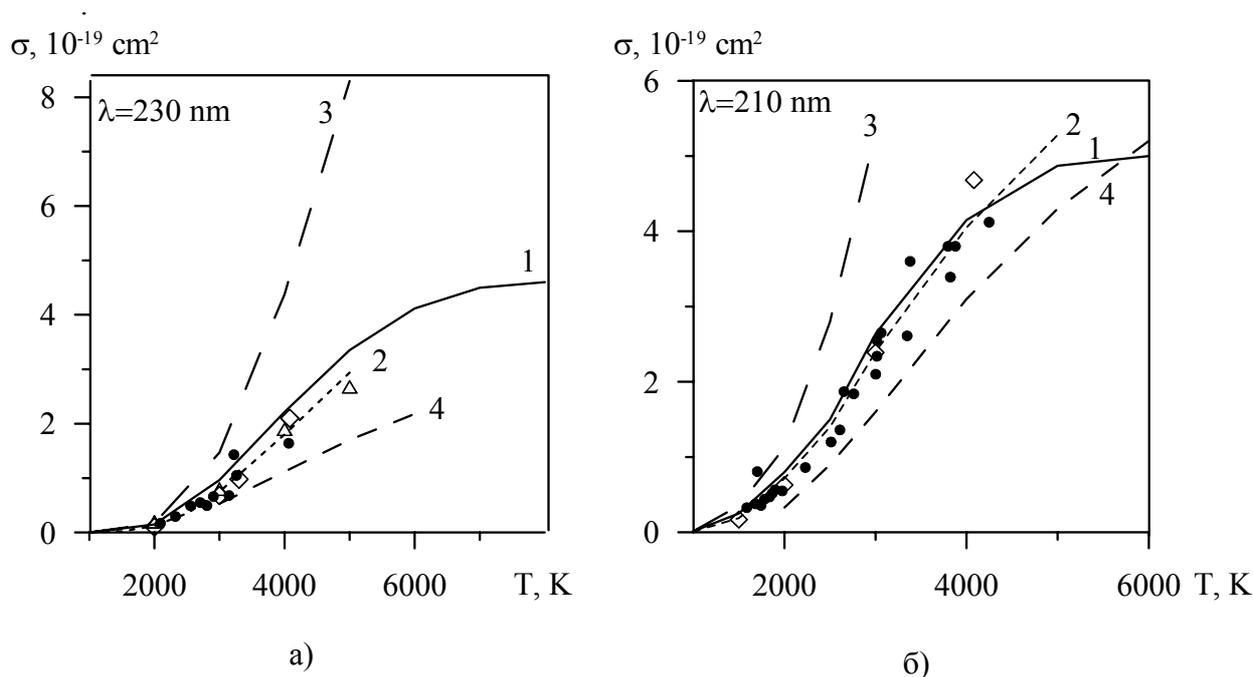


Рис. 4. Сечение поглощения молекул кислорода для $\lambda=230$ нм (а) и $\lambda=210$ нм (б). Экспериментальные данные: черные кружки – настоящая работа, ромбы – [5], треугольники – [1], кривая 4 – [2-4]. Кривые: 1 – расчетные сечения с учетом только связанно-связанных переходов; 2 – аппроксимация данных по формуле (7); 3 – значения сечений, рассчитанные с учетом связанно-связанных и связанно-несвязанных переходов.

Значения сечений определялись из осциллограмм двумя способами:

1. в области максимума поглощения, когда закончилась колебательная релаксация молекул O_2 и колебательная температура сравнялась с поступательной;

2. если температура в опыте была достаточно высока ($T > 3500$ К), сечение определялось также и на некотором удалении от фронта (через 20-40 микросекунд лабораторного времени) и относилось к параметрам газа (температуре и концентрации O_2), рассчитываемым для чистого кислорода или смеси газов O_2/Ar за фронтом ударной волны с помощью программы “Мираж” [7]. Химическая модель, которая использовалась в расчетах, включает реакцию диссоциации O_2 с участием нейтральных компонент O_2 , O и Ar . Константы скорости этих реакций были взяты из [8]. Расчеты параметров газа за фронтом ударной волны проводились в предположении термически равновесных условий, то есть при равенстве поступательной и колебательной температур в каждый момент времени.

Результаты измерений сечений поглощения молекул O_2 приведены на рис. 4, 5.

Расчеты сечений поглощения молекул O_2 в системе Шумана-Рунге

Сечения поглощения молекулярного кислорода рассчитывались для области вакуумного ультрафиолета. Среди электронных переходов между основным $X^3\Sigma_g^-$ и наиболее низколежащими электронными состояниями, единственным разрешенным является переход $V^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ (система Шумана-Рунге). Потенциальные кривые комбинирующих электронных состояний этой системы приведены на рис.6 [9, 10]. Видно, что потенциальная кривая состояния $V^3\Sigma_u^-$ значительно сдвинута относительно кривой $X^3\Sigma_g^-$ в сторону больших межъядерных расстояний. Это определяет специфические особенности системы Шумана-Рунге.

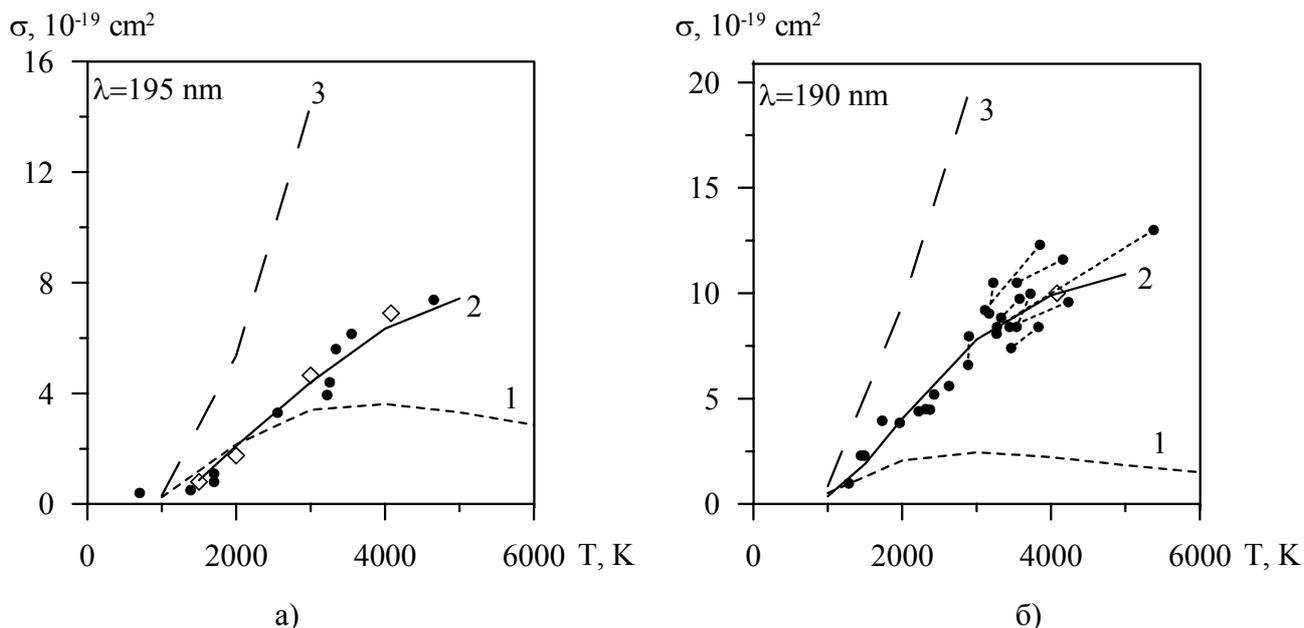
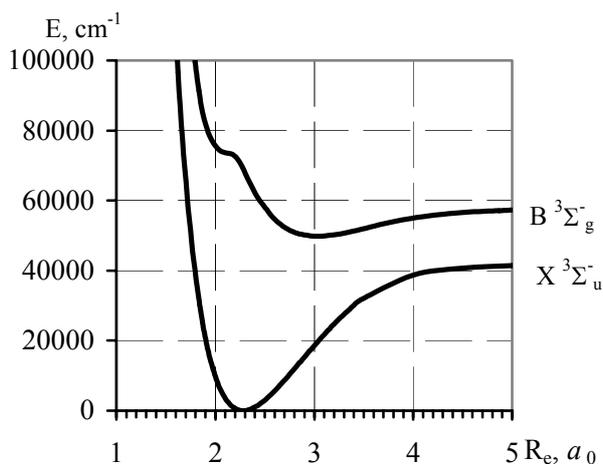


Рис. 5. Сечение поглощения молекул кислорода для $\lambda=195$ нм (а) и $\lambda=190$ нм (б). Обозначения и ссылки те же, что и на рис.4.

Одна из них состоит в том, что в спектре поглощения наряду с полосами, обусловленными переходами между колебательными уровнями основного и возбужденного состояний



(связанно-связанные переходы) в спектре присутствует диссоциационный континуум, возникающий за счет переходов с колебательных уровней основного состояния на отталкивательную ветвь возбужденного состояния, расположенную выше диссоциационного предела (связанно-несвязанные переходы). Вторая особенность состоит в сильно расставленной вращательной структуре, которая приводит к значительному перекрытию полос и, как следствие, к сглаженному характеру спектра.

Рис. 6. Потенциальные кривые $B^3\Sigma_u^-$ и $X^3\Sigma_g^-$ состояний молекулы O_2 по данным работы [9].

Расчеты сечения поглощения связанно-связанных переходов проводились по формуле:

$$\sigma_{bb}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{v'} \sum_{v''} \sum_{J'} \sum_{J''} F(\omega - \omega_{v'v''J'J''}) \alpha_{v'v''J'J''} \quad (3)$$

$$\alpha_{v'v''J'J''} = \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) N_{v''J''} \omega_{v'v''J'J''} \left| \langle v' | R_e(r) | v'' \rangle \right|^2 \frac{S_{JJ''}}{2J'' + 1} \quad (4)$$

Здесь $\sigma(\omega)$ – спектральное сечение поглощения в cm^2 , N – объемная концентрация поглощающих молекул, $N_{v''J''}$ – заселенность колебательно-вращательного уровня, $\omega_{v'v''J'J''}$ – волновое число вращательной линии, $\alpha_{v'v''J'J''}$ – интегральный коэффициент поглощения

вращательной линии, $\left| \langle v' | R_e(r) | v'' \rangle \right|$ - матричный элемент электронно-колебательного перехода, $S_{J'J''}$ – фактор Хенля-Лондона, $F(\omega)$ – аппаратная функция спектрального прибора, нормированная на единицу площади.

При расчетах сечений поглощения все спектроскопические величины были взяты из информационно-вычислительной системы “RADEN” [11]. Матричные элементы электронно-колебательных переходов также рассчитывались по программам “RADEN”.

В условиях данных экспериментов для каждой из исследуемых длин волн монохроматор выделял участок спектра $\Delta\lambda=3.2$ нм, на котором вклад в поглощение дают переходы с 1500-2000 вращательных уровней, относящихся к нескольким возбужденным колебательным состояниям. Сечения поглощения суммировались по вращательным линиям, попадающим в соответствующий спектральный интервал, и свертывались с аппаратной функцией спектрального прибора.

В предположении больцмановского распределения молекул по электронным, колебательным и вращательным уровням энергии заселенность вращательного уровня с квантовыми числами v'' и J'' определяется выражением:

$$N_{v''J''} = \frac{N(2J'' + 1)}{Q(T_e, T_v, T_J)} \exp\left\{-\frac{E_e''}{kT_e}\right\} \exp\left\{-\frac{E_v(v'')}{kT_v}\right\} \exp\left\{-\frac{E_J(J'')}{kT_J}\right\}, \quad (5)$$

где E_e'' , $E_v(v'')$, $E_J(J'')$ – электронная, колебательная и вращательная энергии нижнего состояния вращательной линии, $Q(T_e, T_v, T_J)$ – статистическая сумма по внутренним состояниям молекулы, T_e, T_v, T_J – электронная, колебательная, вращательная температуры.

Расчеты сечения поглощения связанно-несвязанных переходов проводились по формуле:

$$\sigma_{bu}(\omega) = \frac{1}{N} \int_{D'_e} \sum_{v''} \sum_{J''} \left(\frac{8\pi^3}{3hc} \right) N_{v''J''} \omega_{\varepsilon'v''J''} \left| \langle \varepsilon' | R_e(r) | v'' \rangle \right|^2 d\varepsilon' \quad (6)$$

где ε' – энергия несвязанного уровня, отсчитываемая от диссоциационного предела верхнего электронного состояния (D'_e), $\left| \langle \varepsilon' | R_e(r) | v'' \rangle \right|$ - матричный элемент связанно-несвязанного перехода. Для расчета матричных элементов необходимо знание момента электронного перехода $R_e(r)$ и соответствующих волновых функций $|\varepsilon'\rangle$, $|v'\rangle$, $|v''\rangle$. Момент электронного перехода определяется либо экспериментально, либо путем квантово-химических расчетов. Колебательные волновые функции вычисляются при решении радиального уравнения Шредингера, что в свою очередь требует знания потенциальных кривых соответствующих электронных состояний. Отсюда следует, что достоверность рассчитываемых сечений поглощения определяется надежностью используемых данных о моментах электронных переходов и функциях потенциальных кривых. В настоящих расчетах колебательные волновые функции вычислялись для невращающихся молекул. Потенциалы для $V^3\Sigma_u^-$ и $X^3\Sigma_g^-$ состояний и функция момента перехода были взяты из работы [9], в которой связанные части обеих потенциальных кривых построены методом RKR, а отталкивательная часть потенциальной кривой для состояния V взята из [10]. В [9] функция дипольного момента для $V^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ перехода, взятая из расчета [12], была сдвинута на $0.049a_0$ в сторону меньших межъядерных расстояний, т.к. электронная волновая функция возбужденного состояния, использованная в [12] для расчета момента перехода, соответствовала электронному потенциалу V -состояния с равновесным межъядерным расстоянием на $0.049a_0$ большим его экспериментального значения.

В данной работе расчеты сечений поглощения молекулы O_2 были выполнены для интервала длин волн 130 - 250 нм и диапазона температур 300 – 9000 К. Результаты расчетов для равновесного случая ($T_e = T_v = T_J = T$) приведены на рис. 7.

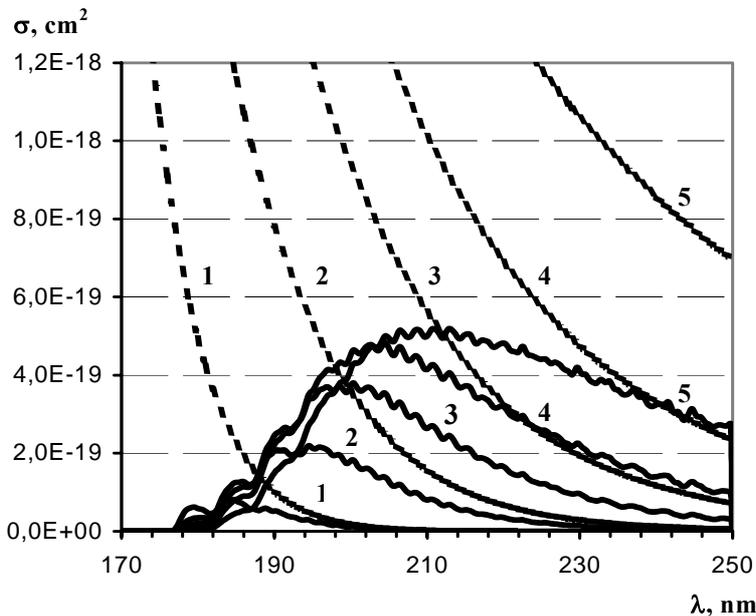


Рис. 7. Спектральные зависимости сечений поглощения системы Шумана-Рунге молекулы O_2 для связанно-связанных (сплошные линии) и связанно-несвязанных (пунктирные линии) переходов для значений температуры $T = 1000$ К (1), $T = 2000$ К (2), $T = 3000$ К (3), $T = 4000$ К (4).

Сопоставление расчетных значений суммарного сечения поглощения с экспериментальными данными нельзя назвать удовлетворительным (рис. 4, 5). К причинам, способным объяснить наблюдаемое расхождение данных можно отнести следующие:

- а) неучет колебательно-вращательного взаимодействия при расчете колебательных волновых функций;
- б) неточное знание формы отталкивательной части потенциальной кривой возбужденного электронного состояния В.

Для выяснения роли колебательно-вращательного взаимодействия для системы

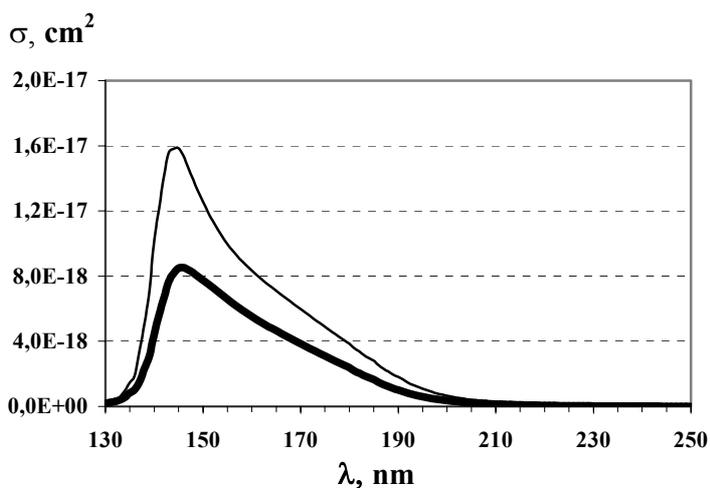


Рис. 8. Спектры поглощения системы Шумана-Рунге для связанно-несвязанных переходов при $T=3000$ К, рассчитанные для колебательных волновых функций при $J=0$ (пунктирная кривая) и при $J=50$ (сплошная кривая).

Шумана-Рунге были выполнены расчеты сечений поглощения в континууме для колебательных волновых функций, вычисленных для невращающейся ($J = 0$) и вращающейся ($J = 50$) молекулы. Сравнение результатов расчета, представленных на рис. 8, показывает, что для корректного расчета сечения поглощения в системе Шумана-Рунге необходим последовательный учет колебательно-вращательного взаимодействия.

Трудности расчета отталкивательной части потенциальной кривой состояния В связаны с необходимостью учета его взаимодействия с несколькими ридберговскими и валентными состояниями в области малых межъядерных расстояний. Это взаимодействие приводит к сильному искажению формы потенциальной кривой состояния В и может существенно повлиять на величины рассчитываемых сечений связанно-несвязанных переходов. Существующие расчеты верифицировались по экспериментальным сечениям поглощения, полученным в области вакуумного ультрафиолета ($\lambda=130-160$ нм) при невысоких температурах (300-550 К) [12]. Неясно, насколько правомерно использование формы потенциальной кривой, полученной при такой верификации, при вычислении сечений поглощения для более длинноволнового диапазона.

Сравнение измерений с расчетами

Сечения поглощения измерены для $\lambda_0=190, 195, 210$ и 230 нм. При этом для каждой из длин волн монохроматор выделял область спектра $\Delta\lambda=3.2$ нм с треугольной аппаратной функцией (функцией щелей спектрального прибора). Диапазоны температур и давлений газа за фронтом ударной волны (в O_2 или в смеси O_2 с Ar) составили, соответственно, 1000-5500К и 0.2-1.3 атм. На рис.4 и 5 приведены как измеренные в работе сечения поглощения и другие экспериментальные данные, так и сечения, вычисленные для двух вариантов: суммарные с учетом связанно-связанных и связанно-несвязанных переходов и с учетом только связанно-связанных переходов.

Сравнение между собой полученных в эксперименте сечений для всех исследованных длин волн свидетельствует о достаточно большом различии в их значениях, увеличивающемся с ростом температуры. Наибольшие значения наблюдаются для длины волны $\lambda_0=190$ нм.

Случайные погрешности измеренных сечений поглощения, определенные с помощью метода наименьших квадратов, составляют 15-20% для середины температурного диапазона с увеличением до 50-70% на концах диапазона.

Длина волны 230 и 210 нм. Экспериментальные значения сечений и их сравнение с другими данными и настоящими расчетами представлены на рис. 4. Кривые 1 получены в расчетах сечений поглощения с учетом только переходов в полосах Шумана-Рунге (связанно-связанных переходов). Видно, что экспериментальные точки хорошо описываются этой кривой до $T \leq 4000$ К. Экспериментальные данные работы [5] для этих же длин волн, полученные при выделяемых в эксперименте участках спектра, близких значениям $\Delta\lambda$ настоящей работы, попадают в одну и ту же группу данных. Приведенные на рис.4 экспериментальные данные [1] получены для длины волны $\lambda=2245\text{Å}$ ⁰. До 4000К все данные хорошо описываются аппроксимационной зависимостью (кривая 2):

$$\sigma(\lambda, T) = \sigma_0(\lambda)(1 - \exp(-\theta/T))\exp(-n_{eff}\theta/T), \quad (7)$$

предложенной в [2] и использованной в [5]. Для определения эффективного колебательного уровня n_{eff} в соотношении (7), в [5] приведена эмпирическая формула $n_{eff} = 7.74 \cdot 10^{-2} \lambda - 12.31$ (λ - в нм). Кривые 2 на рис.4 и 5 построены с использованием значений $n_{eff}=5.47$ ($\lambda=230$ нм), 3.9 ($\lambda=210$ нм), 2.8 ($\lambda=195$ нм), 2.4 ($\lambda=190$ нм). Для всех длин волн на рис.4 и 5 кривые 2 хорошо описывают экспериментальные значения сечений и результаты работы [5].

Кривая 3 представляет сечения, рассчитанные с учетом вкладов как связанно-связанных, так и связанно-несвязанных переходов в континууме Шумана-Рунге. Суммарные рассчитанные сечения превышают экспериментальные значения, особенно с повышением температуры. Данные по сечениям, полученные в [2-4] (кривые 4), систематически лежат

ниже настоящих экспериментальных сечений и кривых 1. Это может быть связано с другой аппаратной функцией в экспериментах [2-4], отличающейся от используемой в настоящей работе.

Длина волны 195 и 190 нм. При сравнении между собой измеренных значений сечений для этих длин волн обращает на себя внимание тот факт, что, несмотря на небольшую разницу в длине волн в 5 нм, различие между этими сечениями выше, чем для длин волн 195 и 210 нм.

При сравнении с вычисленными сечениями для $\lambda=195$ нм уже при $T\sim 3000\text{K}$ (рис.5а) наблюдается отклонение экспериментальных сечений от кривой 1, что может указывать на увеличение вклада связанно-несвязанных переходов с ростом температуры. Однако расчетное суммарное сечение располагается существенно выше (кривая 3). На рис.5(б) ($\lambda=190$ нм) пары экспериментальных точек, соединенных пунктирной линией, относятся к одному и тому же эксперименту и получены при обработке осциллограммы как в области максимума поглощения, так и в зоне химической реакции. Все экспериментальные значения сечений для $\lambda=190$ нм лежат выше кривой 1, но ниже кривой 3, что также может указывать на существенный вклад в сечения на этой длине волны связанно-несвязанных переходов с ростом температуры по сравнению с длинами волн $\lambda=230$ и 210 нм и даже 195 нм.

Заключение

Измеренные сечения поглощения для всех четырех длин волн хорошо аппроксимируются зависимостью (7) с подбором для каждой из длин волн эффективного возбужденного колебательного уровня от $n_{\text{eff}} = 5.5$ для $\lambda=230$ нм до $n_{\text{eff}} = 2.4$ для $\lambda=190$ нм. Температурные зависимости измеренных сечений для $\lambda=210$ и 230 нм при $T \leq 4000\text{K}$ хорошо описываются рассчитанными кривыми, полученными с учетом только связанно-связанных переходов, тогда как для более коротких длин волн ($\lambda=195$ и 190 нм) экспериментальные значения оказались существенно выше рассчитанных с учетом только этих переходов уже при $T=2500-3000\text{K}$. Дополнительный учет вкладов в поглощение связанно-несвязанных переходов в континууме Шумана-Рунге (с тех же колебательных уровней молекулы O_2) привел к превышению расчетных суммарных значений сечений над экспериментальными в 2-3 раза и более, особенно с ростом температуры.

Для проведения расчетов сечений поглощения в системе Шумана-Рунге, адекватных экспериментальным, необходим учет колебательно-вращательного взаимодействия в молекуле O_2 при определении колебательных волновых функций и уточнение данных об отталкивательной части потенциальной кривой состояния $V^3\Sigma_u^-$ в области малых межъядерных расстояний.

Сечения поглощения, измеренные при высоких температурах, дают возможность уточнить данные о форме отталкивательной части потенциальной кривой состояния $V^3\Sigma_u^-$ при малых межъядерных расстояниях.

Авторы очень признательны Ю.В. Акимову за активное участие в проведении экспериментов.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Взаимодействие плазмы с высокоскоростными потоками газа», 2003г.

Литература

1. Н.А. Генералов, С.А. Лосев. Возбуждение и распад молекул кислорода и углекислого газа за фронтом ударной волны. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1966. V.6. P.101-125.

2. С.А. Лосев, О.П. Шаталов, М.С. Яловик. Эффективные сечения поглощения ультрафиолетового излучения молекулярным кислородом при температурах от 3000 до 10000 К. // Ж. прикл. спектр. 1969. Т.10 (2). С.229-232.
3. В.К. Душин, И.Е. Забелинский, О.П. Шаталов. Эффективные сечения поглощения УФ излучения молекулами O_2 в широком интервале температур. // Ж. прикл. спектр. 1983. Т.39 (3). С.440-444.
4. В.К. Душин, И.Е. Забелинский, О.П. Шаталов. Рекомбинация кислорода в сверхзвуковом охлаждающемся потоке. // Изв. АН СССР. МЖГ. 1987. № 4. С.160-165.
5. А.П. Зуев, А.Ю. Стариковский. Сечения поглощения молекул O_2 , NO, N_2O , CO_2 , H_2O , NO_2 в УФ диапазоне спектра. // Ж. прикл. спектр. 1990. Т.52 (3). С.455-465.
6. Н.Н.Баулин, Г.Н. Сунцов, С.Ю. Чернявский. Баллистическая установка для исследования горения и детонации. – В кн. «Гиперзвуковые течения при обтекании тел и в следах», под ред. Г.Г. Черного, Г.А. Тирского. – М.: Изд-во МГУ. 1983. С.114-119.
7. Ибрагимова Л.Б., Смехов Г.Д., Диковская Г.С. Определение константы скорости диссоциации молекул CN за фронтом сильных ударных волн. – Хим. физика. 2000. Т.19. № 8. С.57-67.
8. О.Э. Кривоносова, С.А. Лосев, В.П. Наливайко, Ю.К. Мукосеев, О.П. Шаталов. Рекомендуемые данные о константах скорости химических реакций между молекулами, состоящими из атомов N-O - в кн. «Химия плазмы». – под ред. Б.М. Смирнова. – М.: Энергоатомиздат. 1987. Вып. 14. С.3-31.
9. R.S. Freedman. Oscillator strengths of the Shumann-Runge bands of isotopic oxygen molecules. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1990. V.43. P.225-235.
10. J. Wang, D.G. McCoy, A.J. Blake, L. Torop. Effects of the close approach of potential curves in photoabsorption by diatomic molecules. – II. Temperature dependence of the O_2 cross section in the region 130-160 nm. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1987. V.38 (1). P.19-27.
11. Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т. Информационно-вычислительный комплекс «MSRT-RADEN». Ч.1-3. // Математ. моделирование. 1998. Т.10. № 3-5.
12. A.C. Allison, S.L. Guberman, A. Dalgarno. A model of the Shumann-Runge continuum of O_2 . // J. Geophys. Research. 1986. V.91. P.10193-10198.