

Treatment of the Thermal Nonequilibrium and Ionization Effects on the Refractive Index of a Reacting Gas: Atmospheric Air and Combustion Products

Boris Loukhovitski, Ilya Kadochnikov, Ilya Arsentiev, Alexander Sharipov

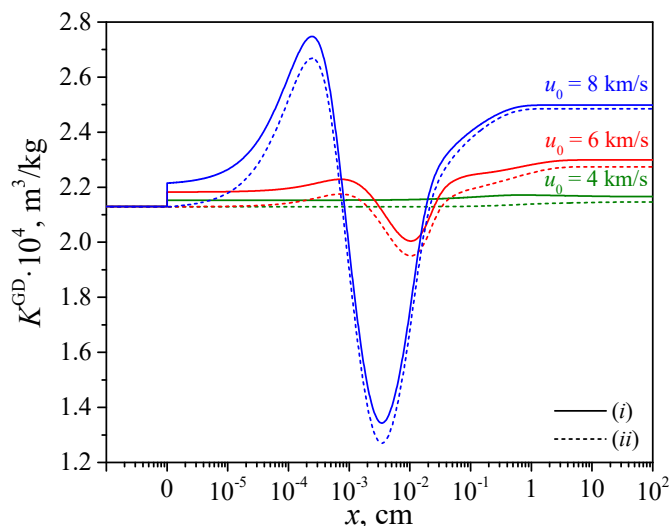
Central Institute of Aviation Motors, Moscow, 111116, Russia

biloukhovitski@ciam.ru

Abstract

Using thermal nonequilibrium physicochemical kinetics models, making it possible to numerically study the reacting gas flows with allowance for the processes of vibrational and electronic-translational relaxation and exchange as well as chemical and plasmachemical reactions, the profiles of the Gladstone – Dale constant and refractive index are calculated for two model problems: relaxation of air behind the shock wave front and expansion of hydrogen and syngas combustion products in a supersonic nozzle. The required data on electrical properties (polarizability, dipole moment) of neutral and charged gaseous species in their ground and excited electronic states are taken from the literature or evaluated using recently developed analytical models. For each of the problems, the analysis of accuracy of different approximations in calculation of the gas optical properties is carried out.

Keywords: refractive index, Gladstone–Dale constant, vibrational nonequilibrium, electronic excitation, ionization



The profiles of the Gladstone–Dale constant (for the radiation wavelength $\lambda = 532$ nm) when allowing for (i) and ignoring (ii) the dependence of the electrical properties of molecules on their vibrational and rotational quantum numbers for different shock wave velocities (temperature and pressure before the shock are $T_0 = 293$ K and $P_0 = 1$ torr, respectively)

УДК 533.9+535.3+539.1

Учет влияния термической неравновесности и ионизации на показатель преломления реагирующего газа: атмосферный воздух и продукты сгорания

Б. И. Луховицкий, И. Н. Кадочников, И. В. Арсентьев, А. С. Шарипов

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова, Россия,
Москва, 111116, ул. Авиамоторная, д. 2

biloukhovitski@ciam.ru

Аннотация

С использованием термически-неравновесных моделей физико-химической кинетики, позволяющих численно исследовать течения реагирующего газа с учетом процессов колебательно- и электронно-поступательной релаксации и обмена, а также химических и плазмохимических реакций, рассчитаны профили константы Гладстона – Дейла и показателя преломления для двух модельных задач: релаксация воздуха за фронтом ударной волны и расширение продуктов сгорания водорода и синтез-газа в сверхзвуковом сопле. Необходимые для этого данные об электрических свойствах (поляризуемость, дипольный момент) нейтральных и заряженных компонентов газа в основном и возбужденных состояниях были взяты из литературы или оценены с помощью недавно разработанных аналитических моделей. Для каждой из модельных газодинамических задач проведен анализ точности различных приближений при расчете оптических свойств газа.

Ключевые слова: показатель преломления, константа Гладстона – Дейла, колебательная неравновесность, электронное возбуждение, ионизация

1. Введение

Как известно, показатель преломления n газа определяется не только его плотностью ρ , но и составом [1], а также тем, в каких вращательных, колебательных и электронных состояниях находятся атомы и молекулы, составляющие газовую смесь [2–4]. В частности, в пределе разреженного газа (когда $n \approx 1$) уравнение Лоренца – Лоренца для показателя преломления переходит в следующее простое выражение:

$$n - 1 = \rho K^{\text{GD}}, \quad (1)$$

где коэффициент пропорциональности между $n - 1$ и плотностью – это так называемая «константа» Гладстона – Дейла K^{GD} . Эта величина обычно измеряется и табулируется для газа при стандартной температуре, однако может варьироваться при изменении его компонентного состава (в результате химических превращений) [1] и при перераспределении его компонентов по квантовым уровням (например, при изменении температуры) [2, 5].

Действительно, преломляющая способность газа n , а также его диэлектрическая проницаемость ε (для немагнитных сред $\varepsilon = n^2$), по своей сути, обусловлены электрическими свойствами входящих в его состав компонентов, в основном изотропной поляризуемостью α и дипольным моментом μ , которые, в свою очередь, могут существенным образом зависеть от того, в каких вращательных, колебательных и электронных состояниях они находятся [3–9]. Следовательно, возбуждение внутренних степеней свободы молекул может существенно

влиять на наблюдаемые электрические и оптические свойства газа. При этом возбуждение внутренних степеней свободы компонентов газа может протекать как равновесно (термический нагрев газа), так и неравновесно, что имеет место, в частности, за сильными ударными волнами (УВ), при резком расширении нагретого газа, при интенсивном протекании экзотермических химических реакций, в активных средах газовых лазеров, в верхних слоях атмосферы различных планет, в неравновесной плазме электрического разряда и при поглощении газом мощного лазерного излучения [2, 5, 10–18].

Поэтому, с одной стороны, правильный учет влияния уровней возбуждения внутренних степеней свободы на электрические свойства молекул газа необходим для повышения точности традиционных методов оптической диагностики газодинамических процессов, основанных на регистрации оптической плотности (теневой и шпирен-методы визуализации газовых потоков, а также интерферометрия) [1, 19, 20], как и просто при повышенных температурах [1], так и в отсутствие термодинамического равновесия между внутренними и поступательными степенями свободы молекул [8, 21–23].

С другой стороны, при достижении в экспериментальной установке достаточно высокой точности регистрации показателя преломления газа появляется возможность для диагностики как кинетики элементарных химических процессов (прежде всего, диссоциации [24–27] и образования радикалов [28, 29]), так и динамики собственно неравновесных процессов [22], в частности, кинетики колебательной релаксации [26, 30–32] и ионизации [33].

Кроме того, учет влияния возбуждения и ионизации атомов и молекул на электрические и оптические свойства газовой среды необходим для правильного моделирования распространения в ней электромагнитных волн [34–38] и лазерного излучения [2, 39–41].

Отдельно стоит упомянуть развивающуюся в настоящее время прецизионную лазерную баро- и термометрию [42–44], необходимым элементом которой являются достоверные данные по влиянию температуры на электрические свойства молекул в газовой фазе.

Таким образом, актуальной задачей является построение исчерпывающих моделей для учета влияния уровней возбуждения внутренних степеней свободы молекул (вращательных, колебательных, электронных) и ионизации на показатель преломления (диэлектрическую проницаемость) реагирующего газа. При этом с учетом связи с возможными приложениями наиболее востребованными будут модели такого рода для атмосферного воздуха [36, 37] и для продуктов сгорания различных топлив [34, 38, 45, 46].

Отметим, что ранее уже предпринимались попытки разработки и использования термически равновесных и неравновесных моделей для описания оптических и электрических свойств химически реагирующих потоков, однако в большинстве случаев рассматривалось лишь влияние химических превращений и образования электронов [1, 27, 34, 36–38, 47, 48]. При этом лишь в немногих из указанных работ учитывалась специфика влияния колебательного и вращательного возбуждения на электрические свойства молекул [5, 8, 23], тогда как влияние электронного возбуждения до сих пор рассматривалось лишь для молекулярного азота и кислорода [5]. По всей видимости, подобный избирательный интерес к учету отдельных вкладов в оптические свойства газовой среды обусловлен недостатком либо почти отсутствием в литературе надежных данных по электрическим свойствам возбужденных и заряженных компонентов. Именно этим до сих пор в немалой степени сдерживался прогресс в использовании неравновесных моделей химической кинетики для описания оптической (диэлектрической) плотности газов.

При этом не так давно появились достаточно надежные данные теоретического происхождения, позволяющие учитывать влияние колебательно-вращательного возбуждения на электрические свойства ряда двухатомных [49] и многоатомных молекул [50]. Кроме того, совсем недавно были опубликованы базы данных по поляризуемости электронно-возбужденных [9] и заряженных компонентов [51], а также в работах [9, 51] были предложены теоретические модели, позволяющие в отсутствие надежных данных оценивать поляризуемость компонентов произвольных зарядов и степени электронного возбуждения. Наличие таких моделей

открывает возможность для комплексного учета влияния термической неравновесности и образования ионов на показатель преломления химически реагирующего газа произвольного состава.

В связи с вышесказанным, нашей целью было на основе термически-неравновесных моделей химической кинетики, разработанных авторами ранее [18, 52, 53], построить наиболее полную комплексную модель, позволяющую описывать изменение показателя преломления реагирующего газа при протекании в нём химических реакций с учетом термической неравновесности и ионизации применительно к двум модельным случаям, а именно к задаче о релаксации реального атмосферного воздуха за фронтом сильной УВ и к задаче о «закалке» продуктов сгорания в расширяющемся потоке. При этом необходимые данные по электрическим свойствам отдельных компонентов (атомов, молекул, ионов) мы заимствовали из надежных теоретических работ, указанных выше, либо оценили впервые. Наконец, с помощью построенной модели мы проанализировали, как оптические проявления неравновесных эффектов могут повлиять на интерпретацию результатов измерений показателя преломления в рассмотренных модельных случаях.

2. Методология

Как известно, при сравнительно низких температурах показатель преломления n (а также диэлектрическая проницаемость ϵ) молекулярного газа определяется в основном изотропной поляризуемостью и дипольным моментом молекул в нижних вращательных, колебательных и электронных состояниях. Эти данные известны достаточно хорошо, сравнительно легко могут быть рассчитаны с помощью методов квантовой химии и к настоящему моменту широко представлены в различных обзорах и базах данных (см., например, [54–59]). Однако электрические свойства молекул, находящихся на возбужденных колебательных и вращательных уровнях, $\alpha_{V,J}$ и $\mu_{V,J}$, могут существенно отличаться от свойств основных состояний [3–7]. Поэтому при высоких температурах и в случае неравновесного возбуждения колебательных и вращательных степеней свободы (когда заселены не только нижние уровни) наличие существенной зависимости $\alpha_{V,J}$ и $\mu_{V,J}$ от колебательных V и вращательных J квантовых чисел может оказаться значительным с точки зрения вклада в величину n или ϵ [2–6].

В данной работе значение константы Гладстона–Дейла для газовой смеси определялось согласно методологии [3] путем усреднения вкладов в наблюдаемый показатель преломления от молекул на каждом колебательно-вращательном уровне согласно имеющим место относительным заселённостям $N_{V,J}$ для отдельных компонентов смеси. Заселённости $N_{V,J}$, в свою очередь, определялись путем численного интегрирования системы уравнений для термически неравновесного газа в уровневом или модовом приближении в соответствии с термически-неравновесными моделями химической кинетики, разработанными ранее [18, 52, 53].

Необходимые данные по уровневым значениям статической поляризуемости $\alpha_{V,J}$ и дипольного момента $\mu_{V,J}$ для наиболее значимых двухатомных (N_2 , O_2 , H_2 , OH , NO , CO) и трехатомных (H_2O , CO_2) молекул были заимствованы из [49] и [50], соответственно. Требуемые значения статической поляризуемости и дипольного момента для других компонентов, для которых зависимость $\alpha_{V,J}$ и $\mu_{V,J}$ от чисел V и J не рассматривалась в работе, были взяты из [9, 50, 54, 55, 57–60]. Что касается ионов и электронно-возбужденных компонентов, их электрические свойства заимствовались из [1, 9, 15, 51, 61–66] либо оценивались с помощью теоретических моделей [9, 51]. Все использованные данные приведены в табл. 1.

Таблица 1

Электрические свойства компонентов, используемые в работе

№	Компонент	α , а.е.	Источник	μ , D	Источник
1	Ar	11.08	[58]	0	a
2	Ar ⁺	6.83	[64]	0	a
3	C	11.3	[58]	0	a
4	CH	15.2	[9]	1.46	[60]
5	CH ₂	14.2	[9]	0.61	[59]
6	CH ₂ O	19.32	[57]	2.33	[54]
7	CH ₃	14.1	[9]	0	b
8	CH ₃ O	21.33	[59]	1.49	[59]
9	CH ₄	17.27	[57]	0	b
10	CHO ₃ ⁻	35.34	[59]	2.62	[59]
11	CO	$\alpha_{V,J}$	[49]	$\mu_{V,J}$	[49]
12	CO(<i>a</i> ³)	16.54	[65]	1.4	[65]
13	CO ₂	α_V	[50]	μ_V	[50]
14	CO ₃ ⁻	39.84	[51]	0.00	[51]
15	H	4.5	[58]	0	a
16	H ₂	$\alpha_{V,J}$	[49]	0	b
17	H ₂ O	α_V	[50]	μ_V	[50]
18	H ₂ O ₂	15.02	[50]	1.57	[55]
19	H ₃ O ⁺	6.57	[59]	1.43	[59]
20	HCO	14.31	[50]	1.69	[59]
21	HCO ⁺	9.81	[51]	3.66	[59]
22	HCO ₂ ⁻	62.87	[51]	2.15	[59]
23	HNO	15.04	[59]	1.62	[56]
24	HNO ₂	21.46	[59]	1.42	[56]
25	HNO ₃	26.56	[59]	2.22	[59]
26	HO ₂	13.7	[9]	2.24	[65]
27	N	7.4	[58]	0	a
28	N(<i>2D</i>)	8.02	[9]	0	a
29	N(<i>2P</i>)	8.63	[62]	0	a
30	N ⁺	3.67	[63]	0	a
31	N ₂ (<i>A</i> ³)	14.7	[9]	0	b
32	N ₂ (<i>B</i> ³)	23.95	c	0	b
33	N ₂	$\alpha_{V,J}$	[49]	0	b
34	N ₂ ⁺	9.72	[1]	0	b
35	N ₂ ⁺ (<i>A</i> ²)	9.98	d	0	b
36	N ₂ ⁺ (<i>B</i> ²)	11.27	d	0	b
37	N ₂ H ₂	18.87	[59]	0	b
38	N ₂ H ₃	28.31	e	0	f
39	N ₂ H ₄	23.24	[59]	1.93	[59]
40	N ₂ O	19.7	[57]	0.17	[54]
41	N ₂ O ⁻	261.67	[51]	0.57	[51]
42	N ₂ O ⁺	101.09	[51]	0.12	[51]
43	NH	10.4	[9]	1.58	[59]
44	NH ₂	12.18	[59]	1.79	[59]
45	NH ₃	14.56	[57]	1.47	[54]
46	NNH	16.91	[59]	1.95	[59]

№	Компонент	α , а.е.	Источник	μ , D	Источник
47	NO	$\alpha_{V,J}$	[49]	$\mu_{V,J}$	[49]
48	NO ⁻	188.65	[51]	1.15	[51]
49	NO(<i>A</i> ²)	38.16	^c	0.38	^g
50	NO(<i>B</i> ²)	14.1	[9]	0.38	^h
51	NO ⁺	6.89	[51]	0.37	[9]
52	NO ₂	16.7	[9]	0.32	[54]
53	NO ₂ ⁻	211.79	[51]	0.38	[51]
54	NO ₂ ⁺	12.95	[51]	0	^b
55	NO ₃	27.73	[51]	0.00	[59]
56	O ⁻	229.17	[63]	0	^a
57	O	5.3	[58]	0	^a
58	O(¹ <i>D</i>)	5.44	[9]	0	^a
59	O ⁺	2.54	[63]	0	^a
60	O ₂	$\alpha_{V,J}$	[49]	0	^b
61	O ₂ ⁻	144.92	[51]	0	^b
62	O ₂ (<i>a</i> ¹)	10.4	[9]	0	^b
63	O ₂ (<i>b</i> ¹)	10.3	[9]	0	^b
64	O ₂ ⁺	6.47	[51]	0	^b
65	O ₃	19.18	[57]	0.53	[54]
66	O ₃ ⁻	209.82	[51]	1.09	[51]
67	OH	$\alpha_{V,J}$	[49]	$\mu_{V,J}$	[49]
68	OH ⁻	40.39	[66]	0.58	[61]

^a атомы обладают практически нулевым дипольным моментом

^b симметричные молекулы обладают практически нулевым дипольным моментом

^c оценка по модели [9]

^d оценка по моделям [9, 51]

^e взято значение суммы поляризуемостей атомов

^f принято равным нулю

^g принято, как для NO(*B*²)

^h рассчитано *ab initio* согласно методологии [9]

Для учета влияния частоты падающего излучения ω на поляризуемость атомов и молекул использовалось одночленное выражение Крамерса – Гейзенберга [67]

$$\alpha(\omega) = \alpha(\omega = 0) \frac{1}{1 - (\omega/\omega_0)^2}, \quad (2)$$

где $\alpha(\omega = 0)$ и $\alpha(\omega)$ – это поляризуемости рассматриваемого компонента в постоянном электрическом поле и для излучения с частотой ω , соответственно (разницу этих поляризуемостей называют динамической поляризуемостью), а опорная частота ω_0 фактически являлась параметром модели, характеризующим собственную частоту колебаний электронов в многоэлектронной системе [67]. Необходимые значения ω_0 для таких «макроскопических» компонентов как N₂, O₂, Ar, H₂, CH₄ и CO₂ мы заимствовали из [67], а для остальных компонентов влияние частоты излучения на поляризуемость принималось таким же, как было рекомендовано в [67] для реального воздуха.

Заметим, что динамическая часть поляризуемости, хотя формально неограниченно возрастает при $\omega \rightarrow \omega_0$, при не слишком высоких частотах составляет, как правило, весьма небольшую часть от полной поляризуемости молекул. В частности, для излучения с длиной волны $\lambda = 532$ нм (вторая гармоника распространенного Nd:YAG-лазера) поляризуемость

молекул воздуха в среднем всего на 0.05 % больше, чем в стационарном поле, и для компонентов Ar, N₂, CH₄ и CO₂ этот эффект имеет тот же порядок. В связи с этим мы предполагаем, что выбор значения ω_0 для остальных компонентов таким как для воздуха из [67] не приведет к заметным ошибкам при вычислении показателя преломления.

Что касается влияния на оптические свойства газовой среды свободных электронов, их отрицательный (так называемый *плазменный*) вклад в показатель преломления учитывался по известной формуле [39, 47]

$$(n-1)_e = -\frac{e^2 \lambda^2 N_e}{8\pi^2 \epsilon_0 m_e c_0^2}, \quad (3)$$

где λ – длина волны излучения; N_e – концентрация электронов; m_e – масса электрона; ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума; c_0 – скорость света в вакууме. Заметим, в частности, что для излучения с длиной волны, к примеру, $\lambda = 532$ нм вклад электронов эквивалентен поляризуемости одного свободного электрона, равной -20.18 \AA^3 .

Конкретный анализ влияния термической неравновесности и ионизации на показатель преломления реагирующего газа, как было указано во **Введении**, был проведен для двух модельных случаев, а именно для релаксации реального атмосферного воздуха за фронтом сильной УВ и для «закалки» продуктов сгорания в расширяющемся потоке.

В первом случае для нахождения термодинамических параметров непосредственно за УВ использовались известные соотношения Ренкина – Гюгонио в предположении, что химический состав газа и колебательные температуры остаются неизменными при переходе через фронт УВ [2], а дальнейшая эволюция температуры и компонентного состава релаксирующего воздуха проводилась в одномерном приближении с использованием уровневой термически неравновесной кинетической модели, построенной на основе разработанных ранее уровневых моделей для воздушной плазмы [52] и водородо-воздушной смеси [53]. При этом согласовано учитывались поуровневая колебательная кинетика молекул N₂, O₂, OH и NO и широкий набор химических и плазмохимических процессов с участием следующих независимых компонентов смеси: N₂(X¹Σ⁺_g), N₂(A³Σ⁺_u), N₂(B³Π_g), O₂(X³Σ⁻_g), O₂(a¹Δ_g), O₂(b¹Σ⁺_g), NO(X²Π_r), NO(A²Σ⁺), NO(B²Π_r), N(⁴S), N(²D), N(²P), O(³P), O(¹D), O₃, N₂O, NO₂, Ar, H, H₂, OH, H₂O, HO₂, H₂O₂, HNO, HNO₂, HNO₃, NH, NH₂, NH₃, NNH, N₂H₂, N₂H₃, N₂H₄, N₂⁺(X²Σ⁺_g), N₂⁺(A²Π_u), N₂⁺(B²Σ⁺_u), N⁺, O₂⁺, O⁺, NO⁺, N₂O⁺, NO₂⁺, O⁻, O₂⁻, O₃⁻, NO⁻, NO₂⁻, N₂O⁻, Ar⁺ и электронов. Уравнения поуровневой колебательной кинетики с учётом возбуждения электронных состояний молекул, химических и плазмохимических реакций, использованные в данной работе, а также методика определения поуровневых констант скорости описаны, например, в предыдущей работе [52].

Во втором случае, в качестве параметров торможения были взяты рассчитанные концентрации, температура и давление после адиабатического сжигания стехиометрической смеси синтез-газа (H₂/CO = 1/1) с воздухом при начальном давлении $P_0 = 30$ атм. Затем в предположении о термическом равновесии в одномерном приближении был проведен расчет потока в сужающейся части сопла до критического сечения. Полученные параметры использовались в качестве начальных для расчета течения в расширяющейся части уже в неравновесном приближении. Следуя работе [68], рассматривалось модельное коническое сопло с углом полураствора 21° и радиусом горла 0.1 см. В кинетической модели в соответствии с [18, 69] были учтены следующие нейтральные компоненты: O, O₂, O₃, H, H₂, OH, H₂O, HO₂, H₂O₂, CO, CO₂, CH, CH₂, CH₃, CH₄, HCO, CH₂O, N, N₂, NO, NO₂, N₂O, NO₃, HNO, HNO₂, HNO₃, NH, NH₂, NH₃, N₂H, а также ионы согласно [70, 71]: H₃O⁺, HCO⁺, O⁻, O₂⁻, OH⁻, CHO₂⁻, CHO₃⁻, CO₃⁻ и электроны. В отличие от случая УВ, при решении данной задачи использовалось модовое приближение, при этом неравновесно-возбужденными считались моды следующих молекул: H₂, O₂, OH, H₂O, CO, CO₂, N₂, NO. Так как в продуктах сгорания в большом количестве присутствуют многоатомные компоненты (в первую очередь, это H₂O и CO₂), для

учета взаимного влияния колебаний и химических реакций использовалась простая модель Кузнецова [72], применение которой оправдано в случае, когда колебательные температуры мод выше поступательной. Исчерпывающее описание системы уравнений, применяемой здесь модовой модели, а также использованных выражений для расчёта фактора неравновесности, приведено, в частности, в работе [73].

3. Результаты

3.1. Релаксация воздуха за фронтом сильной УВ

Для задачи о релаксации воздуха за фронтом УВ рассмотрим, какие процессы необходимо учитывать при расчете профилей показателя преломления и константы Гладстона–Дейла. На рис. 1 показаны профили поступательной температуры и плотности газа (рис. 1, а), а также мольные доли групп компонентов (рис. 1, б) для типичных параметров УВ (см. подпись к рисунку) для двух составов газа: синтетического воздуха (79 % N₂, 21 % O₂) и атмосферного воздуха (77 % N₂, 21 % O₂, 1 % Ar, 1 % H₂O). Как можно видеть, в обоих случаях все приведенные параметры практически одинаково изменяются в ходе релаксации этих смесей за фронтом УВ. При этом наибольшее отличие наблюдается для мольной доли электронно-возбужденных компонентов, которая на начальном этапе релаксационного процесса несколько больше для атмосферного воздуха (за счёт наличия дополнительных каналов образования электронно-возбужденных компонентов с участием Н-содержащих компонентов) нежели для синтетического.

Как можно видеть из приведенного рисунка, для заданной интенсивности УВ (поступательная температура сразу за фронтом составляет около 17500 К) в релаксационной зоне существенных концентраций, помимо радикалов и исходных компонентов смеси, достигают и электронно-возбужденные компоненты (около 3 % в максимуме), и ионы (около 1 %), и электроны (около 1 %). Таким образом, можно сделать вывод о том, что при расчете показателя преломления воздуха за УВ такой (и очевидно большей) интенсивности нельзя пренебрегать процессами релаксации электронных уровней и ионизации, поскольку данные процессы начинают играть важную роль при расчете величин, напрямую определяющих показатель преломления газа, а именно термодинамических параметров газа (температура и плотность) и его состава.

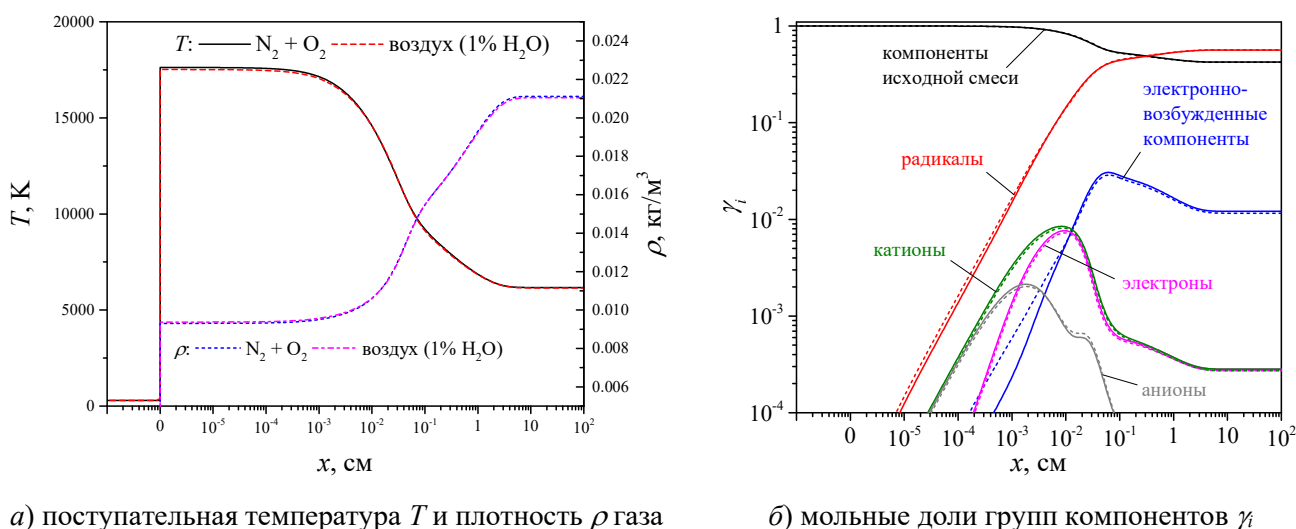


Рис. 1. Профили параметров газа при релаксации синтетического (сплошные кривые) и атмосферного (пунктир) воздуха за фронтом УВ со скоростью $u_0 = 6$ км/с (температура и давление перед УВ составляют $T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

Рассмотрим теперь, как изменяются оптические свойства газа за фронтом УВ при тех же условиях. На рис. 2 показаны профили константы Гладстона – Дейла и показателя преломления (рис. 2, а) и вкладов в константу Гладстона – Дейла от различных групп компонентов (рис. 2, б). Как видно из рис. 2, а, величины $n - 1$ и K^{GD} для синтетического и атмосферного воздуха принимают существенно различные значения уже перед УВ. Вызвано это наличием паров воды в атмосферном воздухе, молекулы которой являются полярными (обладают ненулевым дипольным моментом), однако при переходе через скачок данное отличие практически исчезает, поскольку вклад дипольного момента в константу Гладстона – Дейла обратно пропорционален температуре [3, 4]. В результате за фронтом УВ профили $n - 1$ (как и K^{GD}) отличаются уже не так существенно для двух рассматриваемых смесей.

Наибольшее отличие в K^{GD} наблюдается в сечении $x = 10^{-2}$ см. Данное отличие вызвано более быстрой диссоциацией молекул H_2O по сравнению с молекулами N_2 и O_2 и тем фактом, что константа Гладстона – Дейла для молекул, как правило [4], меньше, чем сумма соответствующих констант K^{GD} продуктов их диссоциации (поэтому диссоциация приводит к росту K^{GD}).

Отметим, что ярко выраженный локальный минимум на профиле K^{GD} обусловлен пиком концентрации электронов, обладающих, как было отмечено в **Разделе 2**, отрицательным значением константы Гладстона – Дейла (на рис. 2, б приведено абсолютное значение электронного вклада).

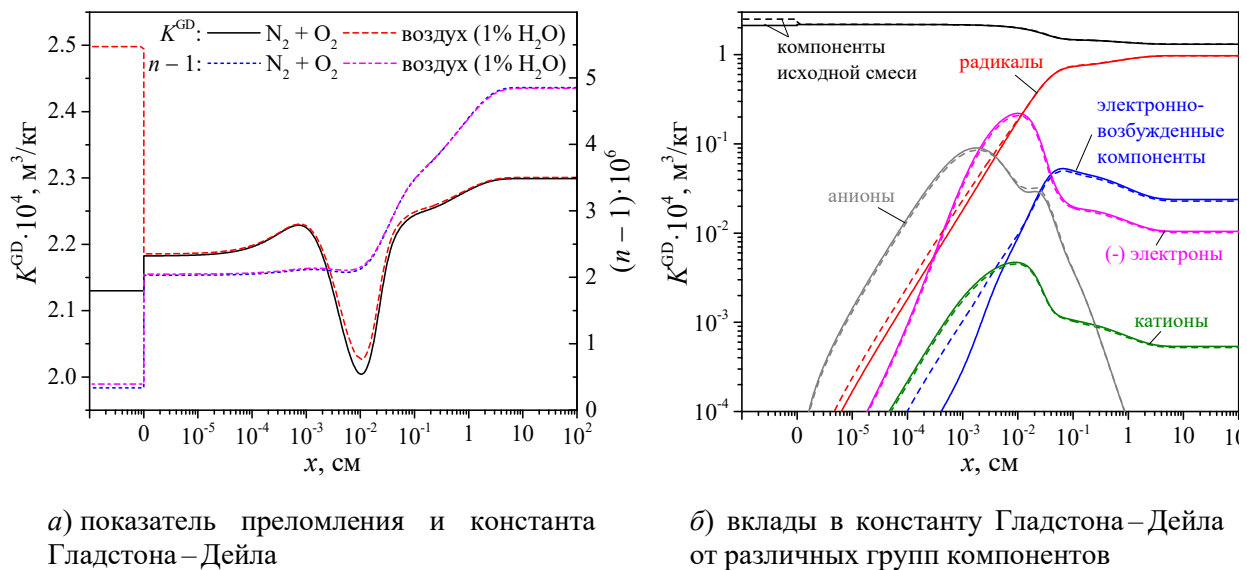


Рис. 2. Профили оптических свойств газа (для длины волны излучения $\lambda = 532$ нм) при релаксации синтетического (сплошные кривые) и реального (пунктир) воздуха за фронтом УВ со скоростью $u_0 = 6$ км/с ($T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

Если рассматривать вклады от различных групп компонентов в константу Гладстона – Дейла, то, помимо исходных компонентов смеси, относительные вклады в K^{GD} в сечении $x = 10^{-2}$ см выглядят следующим образом: электроны (–11 %), радикалы (9 %), анионы (1.7 %), электронно-возбужденные компоненты (0.5 %) и катионы (0.2 %). Если опять вернуться к рис. 1, б, то можно увидеть, что концентрация отрицательных ионов существенно ниже концентрации положительных, однако, поскольку первые обладают значительно большими значениями поляризуемости (для большинства компонентов поляризуемость отрицательного иона гораздо больше поляризуемости соответствующего нейтрального компонента, а поляризуемость положительного иона, наоборот, существенно меньше [51]), то в результате их вклад в константу Гладстона – Дейла становится больше чем для положительных ионов.

Для анализа точности различных приближений при расчете показателя преломления термически-неравновесного воздуха в первую очередь рассмотрим влияние учета зависимости поляризуемости и дипольного момента молекулы от колебательных и вращательных квантовых чисел на профиль показателя преломления воздуха за фронтом УВ. Соответственно, рассмотрим два различных подхода к вычислению константы Гладстона – Дейла: (i) когда учитывается зависимость электрических свойств молекул от их колебательных и вращательных квантовых чисел, (ii) когда считается, что электрические свойства молекулы не изменяются при ее возбуждении и равны соответствующим величинам для основного колебательно-вращательного состояния молекулы $\alpha_{V,J} = \alpha_{V=0,J=0}$ и $\mu_{V,J} = \mu_{V=0,J=0}$.

На рис. 3 показана зависимость от скорости УВ u_0 для максимальной (по всему профилю вдоль потока) относительной ошибки определения показателя преломления δ_{vib} , возникающей при пренебрежении зависимостью электрических свойств молекул от чисел V и J . Как можно увидеть, ошибка возрастает с ростом интенсивности УВ и, начиная со скорости УВ $u_0 = 8$ км/с, превышает 5%. Отдельно стоит отметить, что величина ошибки слабо зависит от состава газа (см. пунктирную кривую на рис. 3, дополнительно полученную для модельного влажного воздуха с удвоенным содержанием водяного пара).

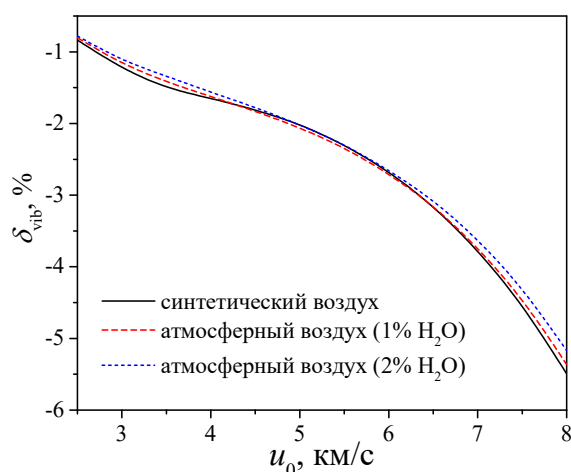


Рис. 3. Ошибка определения показателя преломления ($\lambda = 532$ нм) в пренебрежении зависимостью электрических свойств молекул от их колебательных и вращательных квантовых чисел для различных скорости УВ и состава газа ($T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

На рис. 4 показаны зависимости константы Гладстона – Дейла от расстояния до фронта УВ, полученные для различных интенсивностей УВ с использованием вышеуказанных приближений для расчета K^{GD} : (i) и (ii). Видно, что с увеличением u_0 растут как ошибка в величине изменения константы K^{GD} при переходе через фронт, так и ошибки для величины максимума и конечного значения константы, что связано с большими концентрациями радикалов, электронно-возбужденных компонентов и ионов при больших интенсивностях УВ, и, соответственно, большей поступательной температурой за фронтом УВ, в релаксационной зоне и при достижении термодинамического равновесия. Величина минимума, достигаемого на расстоянии порядка 10^{-2} см от фронта, уменьшается с ростом u_0 из-за увеличения максимальной концентрации электронов в релаксационной зоне.

Проанализируем влияние отклонения заселённости колебательных уровней от распределений Больцмана на результаты расчёта оптических свойств воздуха за ударной волной. Расчёты показывают, что если пренебречь отличием распределения молекул по колебательным уровням от больцмановского, то есть считать, что колебательные уровни каждой молекулы заселены в соответствии с распределением Больцмана при той же запасенной колебательной энергии, то ошибка в определении константы Гладстона – Дейла в условиях, соот-

ветствующих рассмотренным на рис. 3, не превышает 0.05 %. Уточним, что мы не сравниваем здесь результаты расчетов параметров течений неравновесного реагирующего газа с использованием урневого и модового приближений, а сравниваем профили K^{GD} , полученные на основе поурневых электрических свойств компонентов и либо 1) распределений по колебательным уровням, полученных в расчете, либо 2) эквивалентных им по колебательной энергии больцмановских распределений. Таким образом, в данных условиях вполне применимо и модовое приближение, конечно, только если результаты расчета эволюции параметров газа (таких как поступательная температура и плотность, а также концентрации и колебательные температуры компонентов) воспроизводятся одинаково с использованием обоих приближений термической неравновесности, что может быть достигнуто, например, при вычислении факторов неравновесности и скоростей колебательной релаксации путем осреднения поурневых констант скорости, как было сделано в ряде работ [53, 74].

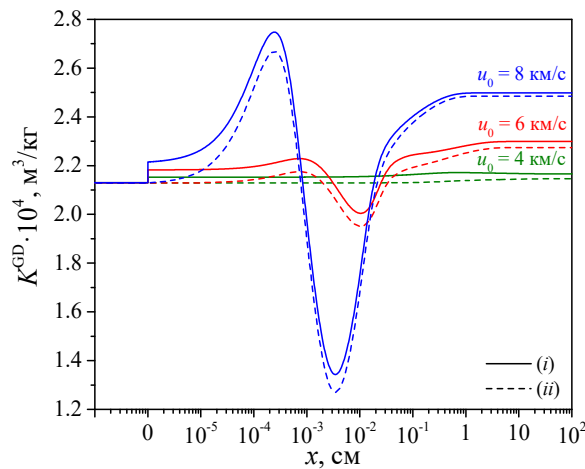


Рис. 4. Профили константы Гладстона–Дейла ($\lambda = 532$ нм) в случае учета (i) и в пренебрежении (ii) зависимостью электрических свойств молекул от их колебательных и вращательных квантовых чисел для различных скоростей УВ ($T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

Рассмотрим теперь, как влияет учет электрических свойств электронно-возбужденных и заряженных компонентов на оптические свойства воздуха за фронтом ударной волны. На рис. 5 показана зависимость от скорости ударной волны для максимальной (вдоль всей релаксационной зоны) относительной ошибки в определении показателя преломления и константы Гладстона–Дейла δ_{ex} , возникающей в случае, если не учитывается, что электрические свойства электронно-возбужденных атомов и молекул отличаются от этих свойств соответствующих компонентов в основных электронных состояниях. Также на данном рисунке показана аналогичная ошибка δ_{ion} , возникающая, если предположить, что величины дипольного момента и поляризуемости ионов такие же, как у соответствующих незаряженных компонентов, и ошибка δ_{el} , возникающая, если не учитывать вклада электронов в константу Гладстона–Дейла.

Как можно увидеть из рис. 5, наибольшее значение имеет правильный учет вклада электронов в величину K^{GD} , причем величина δ_{el} достигает 1 % уже при скорости ударной волны $u_0 > 5$ км/с. Чуть меньшее значение имеет правильный учет электрических свойств ионов. Так, если предположить, что эти свойства для ионов равны свойствам соответствующих нейтральных компонентов, то величина K^{GD} будет занижена на 1 % и более при скорости УВ $u_0 > 5.5$ км/с. Наименьшая точность требуется при определении электрических свойств электронно-возбужденных компонентов, однако при высоких интенсивностях УВ ($u_0 > 8$ км/с) максимальная ошибка для профиля показателя преломления ($n - 1$) будет также превышать

1 %. Аналогично, из рис. 5 можно видеть, что приведенные ошибки имеют слабую зависимость от выбора состава газа (среди рассмотренных).

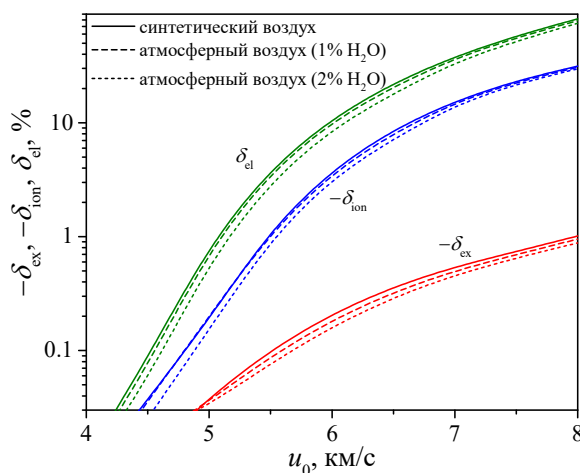


Рис. 5. Зависимость ошибки определения показателя преломления ($\lambda = 532$ нм) от скорости УВ, возникающей в пренебрежении изменением электрических свойств атомов и молекул при их электронном возбуждении (δ_{ex}), ионизации (δ_{ion}), и без учета вклада электронов (δ_{el}) для различных составов газа ($T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

На рис. 6 для атмосферного воздуха, содержащего 1 % водяного пара, приведены зависимости K^{GD} от расстояния до фронта УВ со скоростью $u_0 = 8$ км/с для различных приближений: без учета влияния электронного возбуждения или ионизации на электрические свойства компонентов, без учета электронного вклада и с учетом всех этих явлений. Видно, что неправильное определение электрических свойств ионов или пренебрежение вкладом электронов в величину константы Гладстона–Дейла не только ведет к достаточно серьезным ошибкам в определении показателя преломления ($n-1$), которые превышают 10 % в рассматриваемых условиях, но и приводит к получению качественно неверных профилей K^{GD} при релаксации воздуха за фронтом УВ.

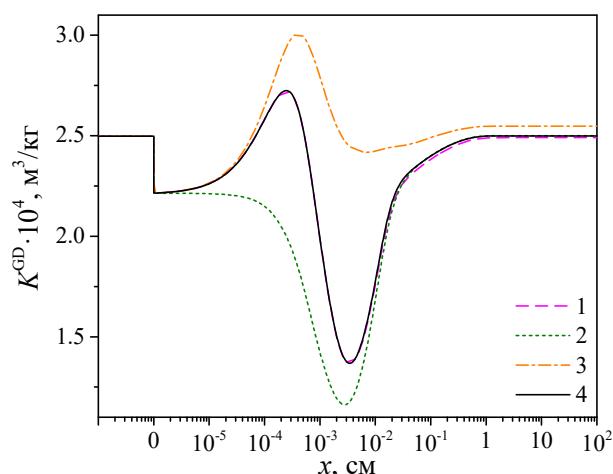


Рис. 6. Профили константы Гладстона–Дейла ($\lambda = 532$ нм), полученные в пренебрежении влиянием электронного возбуждения (кривая 1), ионизации (кривая 2) на оптические свойства компонентов, а также без учета вклада электронов (кривая 3), и профиль (кривая 4), полученный без этих допущений, для атмосферного воздуха (1% H_2O) при скорости УВ $u_0 = 8$ км/с ($T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

До этого момента все значения константы Гладстона – Дейла в этой работе были получены без ограничения общности для длины волны излучения $\lambda = 532$ нм. Теперь посмотрим, как выглядят профили K^{GD} для других длин волн зондирующего излучения. На рис. 7 показаны профили показателя преломления синтетического воздуха за фронтом УВ для различных длин волн излучения (для пяти гармоник Nd:YAG лазера).

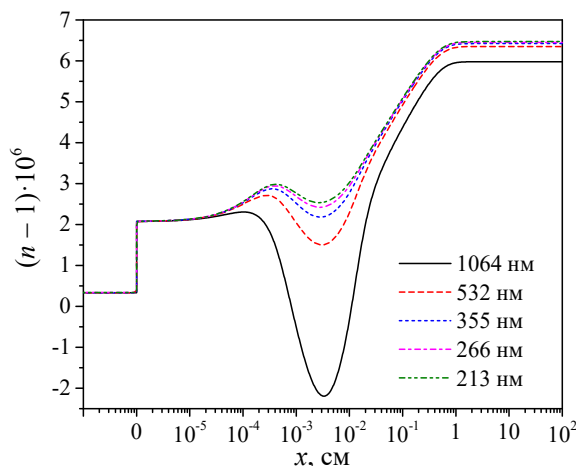


Рис. 7. Профили показателя преломления синтетического воздуха для различных длин волн излучения при скорости УВ $u_0 = 8$ км/с ($T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

Видно, что с ростом длины волны существенно увеличивается глубина «ям» на профиле показателя преломления в районе $x = 10^{-2} \div 10^{-1}$ см, что вызвано ростом отрицательного вклада электронов в константу Гладстона – Дейла с ростом длины волны излучения согласно с выражением (3).

3.1 «Закалка» продуктов сгорания в расширяющемся потоке

Рассмотрим теперь, как влияет на точность определения показателя преломления и константы Гладстона – Дейла зависимость электрических свойств компонентов продуктов сгорания от колебательного и электронного возбуждения, а также ионизации при их «закалке» в расширяющемся потоке. Конкретный анализ был проведен для составов продуктов сгорания стехиометрических смесей водорода и модельного синтез-газа ($H_2/CO = 1/1$) с воздухом согласно методике, описанной в **Разделе 2**. Основные компоненты (с мольной долей, превышающей 0.01 %) для обоих случаев приведены в табл. 2.

Таблица 2

Состав продуктов сгорания

Компонент	Мольная доля, %	
	водород	синтез-газ
N ₂	64.41	64.09
H ₂ O	33.66	17.02
CO ₂	–	16.05
CO	–	1.29
NO	0.50	0.83
O ₂	0.13	0.28
H ₂	0.92	0.22
ОН	0.33	0.19

Поскольку в качестве топлива рассматривались водорода и синтез-газ, где отсутствуют каналы образования ионов, характерные для углеводородов, а температура продуктов сгорания в рассматриваемых в работе условиях не превышает 2600 К, то, как показали расчеты, молярные доли ионов и электронов не превышают 10^{-9} . Поэтому вклад в K^{GD} ионов и электронов, а также электронно-возбужденных состояний компонентов продуктов сгорания будет пренебрежимо мал, и на нём мы останавливаться не будем. Остается проанализировать, насколько важна зависимость электрических свойств компонентов продуктов сгорания от колебательного возбуждения при расчете постоянной Гладстона – Дейла в рассматриваемых условиях. На рис. 8 показана зависимость поступательной температуры, а также колебательных температур основных компонентов смеси (N_2 , H_2O , CO_2) от расстояния до критического сечения сопла. Как видим, наибольшее отличие колебательной температуры от поступательной наблюдается для молекул воды, что может оказать некоторое влияние на величину константы Гладстона – Дейла и показатель преломления.

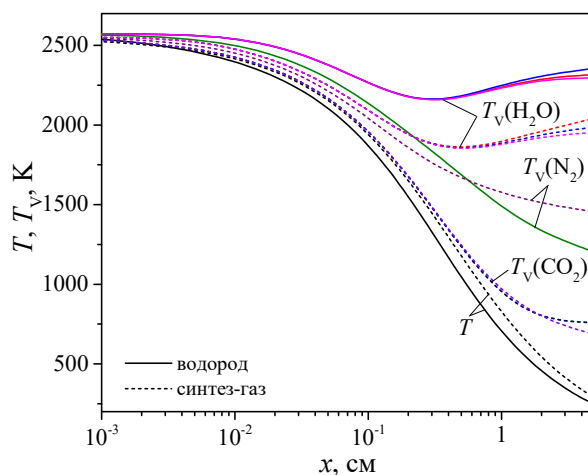


Рис. 8. Профили поступательной и колебательных температур при релаксации продуктов сгорания водорода (сплошные линии) и синтез-газа (пунктир) в расширяющейся части сопла

На рис. 9 показаны профили константы Гладстона – Дейла, полученные с учетом и без учета зависимости поляризуемости и дипольного момента молекул от их колебательного состояния.

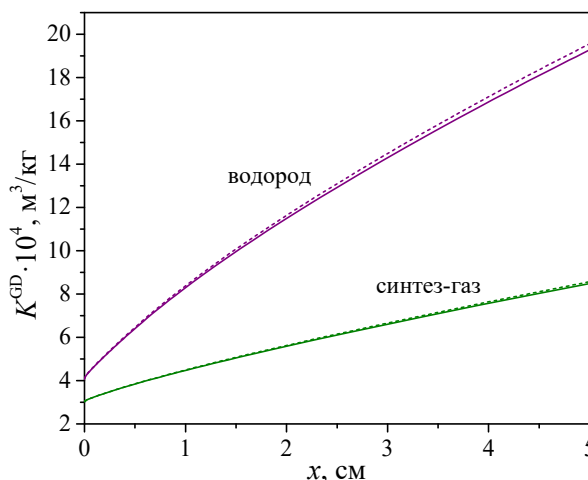


Рис. 9. Профили константы Гладстона – Дейла ($\lambda = 532$ нм) при расширении продуктов сгорания водорода и синтез-газа в сопле, полученные с учетом (сплошные кривые) и без учета (пунктир) зависимости электрических свойств компонентов от колебательного состояния

Первое, что бросается в глаза на приведенном рисунке – это различие полученных профилей для двух рассматриваемых топлив. Данное отличие вызвано тем фактом, что при горении водорода продукты сгорания в основном состоят из молекул воды (не считая радикалов, присутствующих в продуктах сгорания в малых количествах), тогда как при горении синтез-газа в продуктах сгорания кроме водного пара присутствует ещё и углекислый газ (см. табл. 2). При этом, в отличие от CO_2 , вода – полярная молекула и вносит определяющий вклад в величину константы Гладстона – Дейла, причем, как уже упоминалось, вклад этот растет с падением температуры. Пренебрежение зависимостью электрических свойств компонентов от степени колебательного возбуждения приводит к завышению величины K^{GD} (на 1.5 % при использовании водорода в качестве топлива и на 0.9 % для продуктов сгорания синтез-газа), что вызвано, главным образом, тем, что с ростом колебательного уровня дипольный момент молекулы H_2O падает согласно данным [50].

4. Заключение

С использованием термически-неравновесных моделей физико-химической кинетики, позволяющих численно исследовать реагирующие течения с учетом процессов колебательно- и электронно-поступательной релаксации и обмена, химических и плазмо-химических реакций, получены профили температуры и плотности, а также состава и заселенностей колебательных и электронных состояний компонентов газа для случая релаксации воздуха за фронтом ударной волны различной интенсивности и при расширении продуктов сгорания водорода и синтез-газа в сверхзвуковом сопле. На основе полученных профилей и данных об электрических свойствах (поляризуемость, дипольный момент) компонентов газа в основном и возбужденных состояниях вычислены соответствующие профили константы Гладстона – Дейла и показателя преломления.

Показано, что показатель преломления синтетического и атмосферного воздуха принимает существенно различные значения перед УВ из-за наличия в атмосферном воздухе паров воды, однако при переходе через скачок данное отличие практически исчезает.

Установлено, что пренебрежение зависимостью электрических свойств компонентов газовой смеси от их колебательно-вращательного состояния приводит к заметной ошибке определения константы Гладстона – Дейла и, соответственно, показателя преломления релаксирующего за фронтом УВ воздуха. Максимальная вдоль всего профиля K^{GD} ошибка возрастает с ростом интенсивности УВ от 1 % (при скорости УВ $u_0 = 2.5$ км/с) до 5 % (при $u_0 = 8$ км/с). Пренебрежение вкладом электронов в величину константы Гладстона – Дейла приводит к ошибке в 1 % при скорости ударной волны $u_0 \approx 5$ км/с, тогда как при $u_0 \approx 8$ км/с эта ошибка достигает 80 %. Пренебрежение изменением электрических свойств атомов и молекул при их ионизации и электронном возбуждении приводит к занижению показателя преломления на 1% (указано максимальное отличие вдоль профиля), начиная со скорости УВ $u_0 \approx 5.5$ (для ионизации) и 8 км/с (для электронного возбуждения). При этом оказалось, что величины этих ошибок слабо зависят от состава газа (влажности воздуха).

Несмотря на то, что все результаты получены для воздуха в специфических модельных условиях, а именно для одномерного течения воздуха за фронтом УВ, при выборе методики расчета константы Гладстона – Дейла для других задач в первом приближении можно ориентироваться на величины вышеуказанных ошибок, возникающих при скорости УВ, для которой реализуется та же температура за фронтом, что и в интересующей исследователя задаче.

Отмечено, что при расширении продуктов сгорания водорода и синтез-газа, ввиду малой концентрации ионов, электронов и электронно-возбужденных компонентов, вклад заряженных и электронно-возбужденных частиц в величину показателя преломления можно не учитывать, однако пренебрежение зависимостью поляризуемости и дипольного момента молекул от их колебательного состояния приводит к ошибке в 1.5 % и 0.9 % при использовании водорода и синтез-газа в качестве топлива, соответственно.

Благодарности и ссылки на гранты

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-29-00124).

Литература

1. Харитонов А.И., Хорошко К.С., Шкадова В.П. О температурной зависимости рефракции воздуха при высоких температурах // *МЖТ*, 1974, Т. 5, С. 177–180.
2. Осипов А.И., Уваров А.В. Кинетические и газодинамические процессы в неравновесной молекулярной физике // *УФН*, 1992, Т. 162, С. 1–92.
3. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Starik A.M. Influence of Vibrations and Rotations of Diatomic Molecules on Their Physical Properties: II. Refractive Index, Diffusion Coefficients, Reactivity // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2016, Vol. 49, No. 125103.
4. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Loukhovitskaya E.E. *Influence of Internal Degrees of Freedom on Electric and Related Molecular Properties*, Maroulis G. (ed.); Springer International Publishing, 2022.
5. Луховицкий Б.И., Шарипов А.С., Арсентьев И.В., Кузьмицкий В.В., Пенязьков О.Г. О показателе преломления газа в условиях сильной термической неравновесности // *ИФЖ*, 2020, Т. 93, С. 882–889.
6. Осипов А.И., Панченко В.Я., Филиппов А.А. О показателе преломления колебательно-возбужденного газа // *Квантовая электроника*, 1984, Т. 11, С. 1874–1876.
7. Bishop D.M. Molecular vibrational and rotational motion in static and dynamic electric fields // *Rev. Mod. Phys.*, 1990, Vol. 62, pp. 343–374.
8. Tropina A.A., Wu Y., Limbach C.M., Miles R.B. Influence of vibrational non-equilibrium on the polarizability and refraction index in air: computational study // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2019, Vol. 53, No. 105201.
9. Sharipov A.S., Pelevkin A.V., Loukhovitski B.I. A simple semiempirical model for the static polarizability of electronically excited atoms and molecules // *Chin. Phys. B*, 2023, Vol. 32, No. 043301.
10. Cvetanovic R.J. Excited State Chemistry in the Stratosphere // *Can. J. Chem.*, 1974, Vol. 52, pp. 1452–1464.
11. Capitelli M., Ferreira C.M., Gordiets B.F., Osipov A.I. *Plasma Kinetics in Atmospheric Gases*, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
12. Fridman A. *Plasma Chemistry*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2008.
13. Krasnopolsky V.A. Atmospheric chemistry on Venus, Earth, and Mars: Main features and comparison // *Planet. Space Sci.*, 2011, Vol. 59, pp. 952–964.
14. Shang J.S., Surzhikov S.T. Nonequilibrium radiative hypersonic flow simulation // *Prog. Aerosp. Sci.*, 2012, Vol. 53, pp. 46–65.
15. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Pelevkin A.V., Kobtsev V.D., Kozlov D.N. Polarizability of Electronically Excited Molecular Oxygen: Theory and Experiment // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2019, Vol. 52, No. 045101.
16. Арсентьев И.В. О влиянии параметров разряда на кинетику плазменно-стимулированного воспламенения синтез-газа в воздухе // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*, 2021, Т. 22, вып. 5. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-5/articles/953>
17. Кадочников И.Н. Описание лазерно-индуцированного воспламенения синтез-газа в воздухе с использованием урвневой модели колебательной неравновесности // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*, 2021, Т. 22, вып. 6. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/961>

18. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V., Loukhovitski B.I., Sharipov A.S. State-to-state vibrational kinetics of diatomic molecules in laser-induced ignition of a syngas-air mixture: modeling study // *Chem. Phys.*, 2022, Vol. 562, No. 111669.
19. Yun-yun C., Zhen-hua L., Yang S., An-zhi H. Extension of the Gladstone-Dale equation for flame flow field diagnosis by optical computerized tomography // *Appl. Opt.*, 2009, Vol. 48, pp. 2485-2490.
20. Wang M., Mani A., Gordeyev S. Physics and Computation of Aero-Optics // *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 2012, Vol. 44, pp. 299–321.
21. Sharma S.P., Ruffin S.M., Meyer S.A., Gillespie W.D., Yates L.A. Density Measurements in an Expanding Flow Using Holographic Interferometry // *J. Thermophys. Heat Transfer*, 1993, Vol. 7, pp. 261–268.
22. Кузьмицкий В.В., Пенязьков О.Г., Буганов О.В. Схема визуализации неравновесных газовых потоков шпирен-методом с двухимпульсным фемтосекундным лазером в качестве источника оптического излучения // *Неравновесные процессы. Т. 1. Кинетика и плазма* / [Под ред. С.М. Фролова и А.И. Ланшина], М.: Торус Пресс, 2019, С. 162–171.
23. Tropina A.A., Wu Y., Limbach C.M., Miles R.B. Aero-optical effects in non-equilibrium air. AIAA Paper 2018-3904. <https://doi.org/10.2514/6.2018-3904>
24. Alpher R.A., White D.R. Optical Refractivity of High Temperature Gases. I. Effects Resulting from Dissociation of Diatomic Gases // *Phys. Fluids*, 1959, Vol. 2, pp. 153–161.
25. Byron S. Shock-Tube Measurement of the Rate of Dissociation of Nitrogen // *J. Chem. Phys.*, 1966, Vol. 44, pp. 1378–1388.
26. Kiefer J.H., Sathyanarayana R. Vibrational relaxation and dissociation in the perfluoromethyl halides, CF₃Cl, CF₃Br, and CF₃I // *Int. J. Chem. Kinet.*, 1997, Vol. 29, pp. 705–716.
27. Mackey L.E., Boyd I.D. Assesment of hypersonic flow physics on aero-optics // *AIAA J.*, 2019, Vol. 57, pp. 3885–3897.
28. Craig J.E., Azzazy M., Poon C.C. Resonant Holographic Detection of Hydroxyl Radicals in Reacting Flows // *AIAA J.*, 1986, Vol. 24, pp. 74–81.
29. White D.R. Optical Refractivity of High Temperature Gases. III. The Hydroxyl Radical // *Phys. Fluids*, 1961, Vol. 4, pp. 40–45.
30. Зуев А.П., Негодяев С.С., Ткаченко Б.К. Измерение лазерным шпирен-методом времен колебательной релаксации N₂O в смесях, содержащих CO, N₂ и Ar за ударной волной // *Изв. ВУЗов, Физика*, 1984, Т. 11, С. 3–8.
31. Kiefer J., Buzyna L., Dib A., Sundaram S. Observation and analysis of nonlinear vibrational relaxation of large molecules in shock waves // *J. Chem. Phys.*, 2000, Vol. 113, pp. 48–58.
32. Saxena S., Kiefer J.H., Tranter R.S. Relaxation, Incubation, and Dissociation in CO₂ // *J. Phys. Chem. A*, 2007, Vol. 111, pp. 3884–3890.
33. Alpher R.A., White D.R. Optical Refractivity of High Temperature Gases. II. Effects Resulting from Ionization of Monatomic Gases // *Phys. Fluids*, 1959, Vol. 2, pp. 162–169.
34. van der Veek B., Chintalapati S., Kirk D.R., Gutierrez H. Modeling and Validation of Ku-Band Signal Attenuation Through Rocket Plumes // *J. Spacecraft Rockets*, 2013, Vol. 50, pp. 992–1001.
35. Голубков Г.В., Голубков М.Г, Манжелей М.И. Ридберговские состояния в D-слое атмосферы и ошибки позиционирования системы GPS // *Хим. физика*, 2014, Т. 33, С. 64–77.
36. Takahashi Y., Yamada K., Abe T. Prediction Performance of Blackout and Plasma Attenuation in Atmospheric Reentry Demonstrator Mission // *J. Spacecraft Rockets*, 2014, Vol. 51, pp. 1954-1964.
37. Takahashi Y., Nakasato R., Oshima N. Analysis of Radio Frequency Blackout for a Blunt-Body Capsule in Atmospheric Reentry Missions // *Aerospace*, 2016, Vol. 3, No. 2.
38. Liang Y., Wu J., Li H., Tian R., Yuan C., Wang Y., Kudryavtsev A.A., Zhou Z., Tian H. A kinetic model for investigating the dielectric properties of rocket exhaust dusty plasmas // *Phys. Plasmas*, 2019, Vol. 26, No. 043704.

39. Гладков С.М., Коротеев Н.И. Квазирезонансные нелинейные оптические процессы с участием возбужденных и ионизированных атомов // *УФН*, 1990, Т. 160, С. 105–145.
40. Cao S.Q., Su M.G., Jiao Z.H., Min Q., Sun D.X., Ma P.P., Wang K.P., Dong C.Z. Dynamics and density distribution of laser-produced plasma using optical interferometry // *Phys. Plasmas*, 2018, Vol. 25, No. 063302.
41. Зимаков В.П., Лаврентьев С.Ю., Соловьев Н.Г., Шемякин А.Н., Якимов М.Ю. Пространственная и временная нестабильность оптических разрядов // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*, 2018, Т. 19, вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2018-19-4/articles/754/>
42. Egan P.F., Stone J.A., Scherschligt J.K., Harvey A.H. Measured relationship between thermodynamic pressure and refractivity for six candidate gases in laser barometry // *J. Vac. Sci. Technol. A*, 2019, Vol. 37, No. 031603.
43. Rourke P.M.C., Gaiser C., Gao B., Ripa D.M., Moldover M.R., Pitre L., Underwood R. Refractive-index gas thermometry // *Metrologia*, 2019, Vol. 56, No. 032001.
44. Gaiser C., Fellmuth B., Sabuga W. Primary gas-pressure standard from electrical measurements and thermophysical ab initio calculations // *Nature Physics*, 2020, Vol. 16, pp. 177–180.
45. Gardiner Jr. W.C., Hidaka Y., Tanzawa T. Refractivity of Combustion Gases // *Combust. Flame*, 1981, Vol. 40, pp. 213–219.
46. Бельский В.М., Михайлов А.Л., Родионов А.В., Седов А.А. Микроволновая диагностика ударно-волновых и детонационных процессов // *ФГВ*, 2011, Т. 47, С. 29–41.
47. Meidanshahi F. S., Madanipour K., Shokri B. Investigation of first and second ionization on optical properties of atmospheric plasmas // *Opt. Commun.*, 2012, Vol. 285, pp. 453–458.
48. Wu Y., Tropina A.A., Miles R.B., Limbach C.M. Measurements of N₂ refractive index and scalar polarizability in a pulsed nanosecond non-equilibrium discharge by Mach-Zehnder interferometry and spontaneous Raman scattering // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2020, Vol. 53, No. 485203.
49. Loukhovitski B.I., Sharipov A.S., Starik A.M. Influence of vibrations and rotations of diatomic molecules on their physical properties: I. Dipole moment and static dipole polarizability // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2016, Vol. 49, No. 125102.
50. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Starik A.M. Influence of Vibrations of Polyatomic Molecules on Dipole Moment and Static Dipole Polarizability: Theoretical Study // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2017, Vol. 50, No. 165101.
51. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I. A simple semiempirical model for the static polarizability of ions // *Chin. Phys. B*, 2023 (in press). DOI: 10.1088/1674-1056/acd2b2
52. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V. Kinetics of Nonequilibrium Processes in Air Plasma Formed behind Shock Waves: State-to-State Consideration // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2018, Vol. 51, No. 374001.
53. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V. Modelling of vibrational nonequilibrium effects on the H₂-air mixture ignition under shock wave conditions in the state-to-state and mode approximations // *Shock Waves*, 2020, Vol. 30, pp. 491–504.
54. Nelson Jr. R.D., Lide Jr. D.R., Maryott A.A. *Selected values of electric dipole moments for molecules in the gas phase* // National Standard Reference Data Series, National Bureau of Standards 10, 1967.
55. Teuff Y.H.L., Millar T.J., Markwick A.J. The UMIST database for astrochemistry 1999 // *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, 2000, Vol. 146, pp. 157–168.
56. Lide D.R. (ed.) *CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th Edition*, CRC press, 2010.
57. Hohm U. Experimental Static Dipole-Dipole Polarizabilities of Molecules // *J. Mol. Struct.*, 2013, Vol. 1054-1055, pp. 282–292.
58. Schwerdtfeger P., Nagle J.K. 2018 Table of static dipole polarizabilities of the neutral elements in the periodic table // *Mol. Phys.*, 2019, Vol. 117, pp. 1200–1225.
59. Johnson III R.D. 2010 NIST computational chemistry comparison and benchmark database, NIST standard reference database number 101 release 15a.

60. Lie G.C., Hinze J., Liu B. Valence excited states of CH. II. Properties // *J. Chem. Phys.*, 1973, Vol. 59, pp. 1887–1898.
61. Adamowicz L. Numerical multiconfiguration self-consistent field study of the total (electronic and nuclear) parallel polarizability and hyperpolarizability for the OH, OH⁺, OH⁻ // *J. Chem. Phys.* 1988, Vol. 89, pp. 6305–6309.
62. Andersson K., Sadlej A.J. Electric dipole polarizabilities of atomic valence states // *Phys. Rev. A*, 1992, Vol. 46, pp. 2356–2362.
63. Éhn L., Černušák I. Atomic and ionic polarizabilities of B, C, N, O, and F // *Int. J. Quantum Chem.*, 2020, Vol. 121, No. e26467.
64. Wang K., Wang X., Fan Z., Zhao H.-Y., Miao L., Yin G.-J., Moro R., Ma L. Static dipole polarizabilities of atoms and ions from Z=1 to 20 calculated within a single theoretical scheme // *Eur. Phys. J. D*, 2021, Vol. 75, No. 46.
65. Шарипов А.С., Луховицкий Б.И., Пелевкин А.В. Коэффициенты диффузии электронно-возбужденных молекул // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*, 2021, Т. 22, вып. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-1/articles/913/>
66. Weck G., Milet A., Moszynski R., Kochanski E. Analysis of accuracy in ab initio calculations of the static dipole polarizability components. Examples of the water molecule and hydroxide ion // *J. Comput. Methods Sci. Eng.*, 2004, Vol. 4, pp. 501–516.
67. Kerl K., Hohm U., Varchmin H. Polarizability $\alpha(\omega, T, \rho)$ of Small Molecules in the Gas Phase // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 1992, Vol. 96, pp. 728–733.
68. Нагнибеда Е.А., Папина К.В. Химическая релаксация в потоках воздуха в соплах // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*, 2016, Т. 17, вып. 2. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-2/articles/635/>
69. Starik A.M., Kozlov V. E., Titova N.S. On the Influence of Singlet Oxygen Molecules on Characteristics of HCCI Combustion: A Numerical Study // *Combust. Theory Model.*, 2013, Vol. 17, pp. 579– 609.
70. Князьков Д.А., Большова Т.А., Дмитриев А.М., Шмаков А.Г., Коробейничев О.П. Экспериментальное и численное исследование кинетики химических реакций в пламени синтез-газа H₂/CO при давлении 1–10 атм // *ФГВ* 2017, Т. 53, С. 23–33.
71. Belhi M., Han J., Casey T.F., Chen J.-Y., Im H.G., Sarathy S.M., Bisetti F. Analysis of the current-voltage curves and saturation currents in burner-stabilised premixed flames with detailed ion chemistry and transport models // *Combust. Theor. Model.* 2018, Vol. 22, pp. 939–972.
72. Кузнецов Н.М. Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982.
73. Starik A.M., Titova N.S., Arsentiev I.V. Comprehensive analysis of the effect of atomic and molecular metastable state excitation on air plasma composition behind strong shock waves // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2010, Vol. 19, No. 015007
74. Kosareva A., Kunova O., Kustova E., Nagnibeda E. Hybrid approach to accurate modeling of coupled vibrational-chemical kinetics in carbon dioxide // *Phys. Fluids*. 2022, Vol. 34, No. 026105.

References

1. Kharitonov A.I., Khoroshko K.S., Shkadova V.P., Temperature dependence of air refraction at high temperature, *Fluid Dyn.*, 1974, vol. 9, pp. 851–853. <https://doi.org/10.1007/BF01017444>
2. Osipov A.I., Uvarov A.V., Kinetic and gasdynamic processes in nonequilibrium molecular physics, *Sov. Phys. Usp.*, 1992, vol. 35, no. 11, pp. 903–923. <https://doi.org/10.1070/PU1992v035n11ABEH002275>
3. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Starik A.M., Influence of Vibrations and Rotations of Diatomic Molecules on Their Physical Properties: II. Refractive Index, Diffusion Coefficients, Reactivity, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Phys.*, 2016, vol. 49, no. 125103. <https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/12/125103>

4. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Loukhovitskaya E.E., *Influence of Internal Degrees of Freedom on Electric and Related Molecular Properties*, Maroulis, G. (ed.); Springer International Publishing, 2022. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-84632-9>
5. Lukhovitskii B.I., Sharipov A.S.; Arsent'ev I.V., Kuzmitskii, V.V., Penyazkov O. G., On the refractive index of a gas under high-thermal-nonequilibrium conditions, *J. Eng. Phys. Thermophys.*, 2020, vol. 93, pp. 850–857. <https://doi.org/10.1007/s10891-020-02187-4>
6. Osipov A.I., Panchenko V.Y., Filippov A.A., Refractive index of a vibrationally excited gas, *Sov. J. Quant. Electron.*, 1984, vol. 14, pp. 1259–1260. <https://doi.org/10.1070/QE1984v014n09ABEH006205>
7. Bishop D.M., Molecular vibrational and rotational motion in static and dynamic electric fields, *Rev. Mod. Phys.*, 1990, vol. 62, pp. 343–374. <https://doi.org/10.1103/REVMODPHYS.62.343>
8. Tropina A.A., Wu Y., Limbach C.M., Miles R.B., Influence of vibrational non-equilibrium on the polarizability and refraction index in air: computational study, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2019, vol. 53, no. 105201. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ab5bb2>
9. Sharipov A.S., Pelevkin A.V., Loukhovitski B.I., A simple semiempirical model for the static polarizability of electronically excited atoms and molecules, *Chin. Phys. B*, 2023, vol. 32, no. 043301. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/ac8342>
10. Cvetanovic R.J., Excited State Chemistry in the Stratosphere, *Can. J. Chem.*, 1974, vol. 52, pp. 1452–1464. <https://doi.org/10.1139/V74-217>
11. Capitelli M., Ferreira C.M., Gordiets B.F., Osipov A.I., *Plasma Kinetics in Atmospheric Gases*, Springer-Verlag, Berlin, 2000. <https://doi.org/10.1088/0741-3335/43/3/702>
12. Fridman A., *Plasma Chemistry*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2008. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511546075>
13. Krasnopolsky V.A., Atmospheric chemistry on Venus, Earth, and Mars: Main features and comparison, *Planet. Space Sci.*, 2011, vol. 59, pp. 952–964. <https://doi.org/10.1016/j.pss.2010.02.011>
14. Shang J.S., Surzhikov S.T., Nonequilibrium radiative hypersonic flow simulation, *Prog. Aerosp. Sci.*, 2012, vol. 53, pp. 46–65. <https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2012.02.003>
15. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Pelevkin A.V., Kobtsev V.D., Kozlov D.N., Polarizability of Electronically Excited Molecular Oxygen: Theory and Experiment, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2019, vol. 52, no. 045101. <https://doi.org/10.1088/1361-6455/aaf9d9>
16. Arsentiev I.V., On the influence of discharge parameters on the kinetics of plasma-assisted combustion of synthesis gas in air, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, no.5. [in Russian]. <http://doi.org/10.33257/PhChGD.22.5.953>
17. Kadochnikov I.N., Modelling of syngas/air laser-induced ignition with the state-to-state vibrational kinetics taken into consideration, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, no. 6. [in Russian]. <http://doi.org/10.33257/PhChGD.22.6.961>
18. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V., Loukhovitski B.I., Sharipov A.S., State-to-state vibrational kinetics of diatomic molecules in laser-induced ignition of a syngas-air mixture: modeling study, *Chem. Phys.*, 2022, vol. 562, no. 111669. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2022.111669>
19. Yun-yun C., Zhen-hua L., Yang S., An-zhi H., Extension of the Gladstone-Dale equation for flame flow field diagnosis by optical computerized tomography, *Appl. Opt.*, 2009, vol. 48, pp. 2485–2490. <https://doi.org/10.1364/ao.48.002485>
20. Wang M., Mani A., Gordeyev S., Physics and Computation of Aero-Optics, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 2012, vol. 44, pp. 299–321. <https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-120710-101152>
21. Sharma S.P., Ruffin S.M., Meyer S.A., Gillespie W.D., Yates L.A., Density Measurements in an Expanding Flow Using Holographic Interferometry, *J. Thermophys. Heat Transfer*, 1993, vol. 7, pp. 261–268. <https://doi.org/10.2514/3.415>

22. Kuzmitskiy V.V., Penyazkov O.G., Buganov O.V., *Visualization of nonequilibrium gas flows by schlieren technique with a double-pulse femtosecond laser a source of optical radiation // Nonequilibrium processes. Vol. 1. Kinetics and plasma* / [Edited by S.M. Frolov and A.I. Lanshin], Moscow: Torus Press, 2019, pp. 162–171. <https://doi.org/10.30826/NEPCAP2018-1-18>
23. Tropina A.A., Wu Y., Limbach C.M., Miles R.B., Aero-optical effects in non-equilibrium air, *AIAA Paper* 2018-3904. <https://doi.org/10.2514/6.2018-3904>
24. Alpher R.A., White D.R., Optical Refractivity of High Temperature Gases. I. Effects Resulting from Dissociation of Diatomic Gases, *Phys. Fluids*, 1959, vol. 2, pp. 153–161. <https://doi.org/10.1063/1.1705906>
25. Byron S., Shock-Tube Measurement of the Rate of Dissociation of Nitrogen, *J. Chem. Phys.*, 1966, vol. 44, pp. 1378–1388. <https://doi.org/10.1063/1.1726870>
26. Kiefer J.H., Sathyanarayana R., Vibrational relaxation and dissociation in the perfluoromethyl halides, CF₃Cl, CF₃Br, and CF₃I, *Int. J. Chem. Kinet.*, 1997, vol. 29, pp. 705–716. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-4601\(1997\)29:9<705::AID-KIN8>3.0.CO;2-Y](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4601(1997)29:9<705::AID-KIN8>3.0.CO;2-Y)
27. Mackey L.E., Boyd I.D., Assessment of hypersonic flow physics on aero-optics, *AIAA J.*, 2019, vol. 57, pp. 3885–3897. <https://doi.org/10.2514/1.J057869>
28. Craig J.E., Azzazy M., Poon C.C., Resonant Holographic Detection of Hydroxyl Radicals in Reacting Flows, *AIAA J.*, 1986, vol. 24, pp. 74–81. <https://doi.org/10.2514/3.9225>
29. White D.R., Optical Refractivity of High Temperature Gases. III. The Hydroxyl Radical, *Phys. Fluids*, 1961, vol. 4, pp. 40–45. <https://doi.org/10.1063/1.1706187>
30. Zuev A.P., Negodyaev S.S., Tkachenko B.K., Laser schlieren measurement of vibrational relaxation times for N₂O in mixtures containing CO, N₂, and Ar behind a shock wave, *Sov. Phys. J.*, 1984, vol. 27, pp. 911–914. <https://doi.org/10.1007/BF00902137>
31. Kiefer J., Buzyna L., Dib A., Sundaram S., Observation and analysis of nonlinear vibrational relaxation of large molecules in shock waves, *J. Chem. Phys.*, 2000, vol. 113, pp. 48–58. <https://doi.org/10.1063/1.481772>
32. Saxena S., Kiefer J.H., Tranter R.S., Relaxation, Incubation, and Dissociation in CO₂, *J. Phys. Chem. A*, 2007, vol. 111, pp. 3884–3890. <https://doi.org/10.1021/jp066717b>
33. Alpher R.A., White D.R., Optical Refractivity of High Temperature Gases. II. Effects Resulting from Ionization of Monatomic Gases, *Phys. Fluids*, 1959, vol. 2, pp. 162–169. <https://doi.org/10.1063/1.1705907>
34. van der Veek B., Chintalapati S., Kirk D.R., Gutierrez H., Modeling and Validation of Ku-Band Signal Attenuation Through Rocket Plumes, *J. Spacecraft Rockets*, 2013, vol. 50, pp. 992–1001. <https://doi.org/10.2514/1.A32358>
35. Golubkov G.V., Golubkov M.G., Manzhelii M.I., Rydberg States in the D Layer of the Atmosphere and the GPS Positioning Errors, *Russ. J. Phys. Chem. B*, 2014, vol. 8, pp. 103–115. <https://doi.org/10.1134/S1990793114010126>
36. Takahashi Y., Yamada K., Abe T., Prediction Performance of Blackout and Plasma Attenuation in Atmospheric Reentry Demonstrator Mission, *J. Spacecraft Rockets*, 2014, vol. 51, pp. 1954–1964. <https://doi.org/10.2514/1.A32880>
37. Takahashi Y., Nakasato R., Oshima N., Analysis of Radio Frequency Blackout for a Blunt-Body Capsule in Atmospheric Reentry Missions, *Aerospace*, 2016, vol. 3, no. 2. <https://doi.org/10.3390/aerospace3010002>
38. Liang Y., Wu J., Li H., Tian R., Yuan C., Wang Y., Kudryavtsev A.A., Zhou Z., Tian H., A kinetic model for investigating the dielectric properties of rocket exhaust dusty plasmas, *Phys. Plasmas*, 2019, vol. 26, no. 043704. <https://doi.org/10.1063/1.5089473>
39. Gladkov S.M., Koroteev N.I., Quasiresonant nonlinear optical processes involving excited and ionized atoms, *Sov. Phys. Usp.*, 1990, vol. 33, pp. 554–575. <https://doi.org/10.1070/PU1990v033n07ABEH002608>

40. Cao S.Q., Su M.G., Jiao Z.H., Min Q., Sun D.X., Ma P.P., Wang K.P., Dong C.Z., Dynamics and density distribution of laser-produced plasma using optical interferometry, *Phys. Plasmas*, 2018, vol. 25, no. 063302. <https://doi.org/10.1063/1.5028414>
41. Zimakov V.P., Lavrentyev S.Y., Solovyov N.G., Shemyakin A.N., Yakimov M.Y., Spatial and Temporal Instabilities of Optical Discharges, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2018, vol. 19, no. 4. [in Russian]. <http://doi.org/10.33257/PhChGD.19.4.754>
42. Egan P.F., Stone J.A., Scherschligt J.K., Harvey A.H., Measured relationship between thermodynamic pressure and refractivity for six candidate gases in laser barometry, *J. Vac. Sci. Technol. A*, 2019, vol. 37, no. 031603. <https://doi.org/10.1116/1.5092185>
43. Rourke P.M.C., Gaiser C., Gao B., Ripa D.M., Moldover M.R., Pitre L., Underwood R., Refractive-index gas thermometry, *Metrologia*, 2019, vol. 56, no. 032001. <https://doi.org/10.1088/1681-7575/ab0dbe>
44. Gaiser C., Fellmuth B., Sabuga W., Primary gas-pressure standard from electrical measurements and thermophysical ab initio calculations, *Nature Physics*, 2020, vol. 16, pp. 177–180. <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0722-2>
45. Gardiner Jr. W.C., Hidaka Y., Tanzawa T., Refractivity of Combustion Gases, *Combust. Flame*, 1981, vol. 40, pp. 213–219. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(81\)90124-3](https://doi.org/10.1016/0010-2180(81)90124-3)
46. Bel'skii V.M., Mikhailov A.L., Rodionov A.V., Sedov A.A., Microwave Diagnostics of Shock-Wave and Detonation Processes, *Combust. Expl. Shock Waves*, 2011, vol. 47, pp. 639–650. <https://doi.org/10.1134/S0010508211060037>
47. Meidanshahi F. S., Madanipour K., Shokri B., Investigation of first and second ionization on optical properties of atmospheric plasmas, *Opt. Commun.*, 2012, vol. 285, pp. 453–458. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2011.10.025>
48. Wu Y., Tropina A.A., Miles R.B., Limbach C.M., Measurements of N₂ refractive index and scalar polarizability in a pulsed nanosecond non-equilibrium discharge by Mach-Zehnder interferometry and spontaneous Raman scattering, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2020, vol. 53, no. 485203. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/abae95>
49. Loukhovitski B.I., Sharipov A.S., Starik A.M., Influence of vibrations and rotations of diatomic molecules on their physical properties: I. Dipole moment and static dipole polarizability, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2016, vol. 49, no. 125102. <https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/12/125102>
50. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Starik A.M., Influence of Vibrations of Polyatomic Molecules on Dipole Moment and Static Dipole Polarizability: Theoretical Study, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2017, vol. 50, no. 165101. <https://doi.org/10.1088/1361-6455/aa7f80>
51. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., A simple semiempirical model for the static polarizability of ions // *Chin. Phys. B*, 2023 (in press). <https://doi.org/10.1088/1674-1056/acd2b2>
52. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V., Kinetics of Nonequilibrium Processes in Air Plasma Formed behind Shock Waves: State-to-State Consideration, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2018, vol. 51, no. 374001. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aad1db>
53. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V., Modelling of vibrational nonequilibrium effects on the H₂-air mixture ignition under shock wave conditions in the state-to-state and mode approximations, *Shock Waves*, 2020, vol. 30, pp. 491–504. <https://doi.org/10.1007/s00193-020-00961-0>
54. Nelson Jr. R.D., Lide Jr. D.R., Maryott A.A., *Selected values of electric dipole moments for molecules in the gas phase*, National Standard Reference Data Series, National Bureau of Standards 10, 1967. <https://doi.org/10.6028/nbs.nsrds.10>
55. Teuff Y.H.L., Millar T.J., Markwick A.J., The UMIST database for astrochemistry 1999, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, 2000, vol. 146, pp. 157–168. <https://doi.org/10.1051/aas:2000265>
56. Lide D.R. (ed.) *CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th Edition*, CRC press, 2010. <https://doi.org/10.1080/08893110902764125>

57. Hohm U., Experimental Static Dipole-Dipole Polarizabilities of Molecules, *J. Mol. Struct.*, 2013, vol. 1054–1055, pp. 282–292. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2013.10.003>
58. Schwerdtfeger P., Nagle J.K., 2018 Table of static dipole polarizabilities of the neutral elements in the periodic table, *Mol. Phys.*, 2019, vol. 117, pp. 1200–1225. <https://doi.org/10.1080/00268976.2018.1535143>
59. Johnson III R.D., 2010 NIST computational chemistry comparison and benchmark database, NIST standard reference database number 101 release 15a.
60. Lie G.C., Hinze J., Liu B., Valence excited states of CH. II. Properties, *J. Chem. Phys.*, 1973, vol. 59, pp. 1887–1898. <https://doi.org/10.1063/1.1680273>
61. Adamowicz L., Numerical multiconfiguration self-consistent field study of the total (electronic and nuclear) parallel polarizability and hyperpolarizability for the OH, OH⁺, OH⁻, *J. Chem. Phys.* 1988, vol. 89, pp. 6305–6309. <https://doi.org/10.1063/1.1680273>
62. Andersson K., Sadlej A.J., Electric dipole polarizabilities of atomic valence states, *Phys. Rev. A*, 1992, vol. 46, pp. 2356–2362. <https://doi.org/10.1063/1.1680273>
63. Éhn L., Černušák I., Atomic and ionic polarizabilities of B, C, N, O, and F, *Int. J. Quantum Chem.*, 2020, vol. 121, no. e26467. <https://doi.org/10.1002/qua.26467>
64. Wang K., Wang X., Fan Z., Zhao H.-Y., Miao L., Yin G.-J., Moro R., Ma L., Static dipole polarizabilities of atoms and ions from Z=1 to 20 calculated within a single theoretical scheme, *Eur. Phys. J. D*, 2021, vol. 75, no. 46. <https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-021-00054-2>
65. Sharipov A., Loukhovitski B., Pelevkin A., Diffusion Coefficients of Electronically Excited Molecules, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, no. 1. [in Russian]. <http://doi.org/10.33257/PhChGD.22.1.913>
66. Weck G., Milet A., Moszynski R., Kochanski E., Analysis of accuracy in ab initio calculations of the static dipole polarizability components. Examples of the water molecule and hydroxide ion, *J. Comput. Methods Sci. Eng.*, 2004, vol. 4, pp. 501–516. <https://doi.org/10.3233/jcm-2004-4324>
67. Kerl K., Hohm U., Varchmin H., Polarizability $\alpha(\omega, T, \rho)$ of Small Molecules in the Gas Phase, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 1992, vol. 96, pp. 728–733. <https://doi.org/10.1002/BBPC.19920960517>
68. Nagnibeda E. A., Papina K.V., Chemical Kinetics in Air Flows in Nozzles, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2016, vol. 17, no. 2. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-2/articles/635/> [in Russian].
69. Starik A.M., Kozlov V. E., Titova N.S., On the Influence of Singlet Oxygen Molecules on Characteristics of HCCI Combustion: A Numerical Study, *Combust. Theory Model.*, 2013, vol. 17, pp. 579–609. <https://doi.org/10.1080/13647830.2013.783238>
70. Knyazkov D.A., Bolshova T.A., Dmitriev A.M., Shmakov A.G., Korobeinichev O.P., Experimental and Numerical Investigation of the Chemical Reaction Kinetics in H₂/CO Syngas Flame at a Pressure of 1–10 atm, *Combust. Expl. Shock Waves*, 2017, vol. 53, pp. 388–397. <https://doi.org/10.1134/S0010508217040025>
71. Belhi M., Han J., Casey T.F., Chen J.-Y., Im H.G., Sarathy S.M., Bisetti F., Analysis of the current-voltage curves and saturation currents in burner-stabilised premixed flames with detailed ion chemistry and transport models, *Combust. Theor. Model.* 2018, vol. 22, pp. 939–972. <https://doi.org/10.1080/13647830.2018.1468033>
72. Kuznetsov N.M., *Kinetics of Monomolecular Reactions*, Moscow: Nauka. 1982. [in Russian].
73. Starik A.M., Titova N.S., Arsentiev I.V., Comprehensive analysis of the effect of atomic and molecular metastable state excitation on air plasma composition behind strong shock waves, *Plasma Sources Sci. Technol.* 2010, vol. 19, no. 015007. <https://doi.org/10.1088/0963-0252/19/1/015007>
74. Kosareva A., Kunova O., Kustova E., Nagnibeda E., Hybrid approach to accurate modeling of coupled vibrational-chemical kinetics in carbon dioxide, *Phys. Fluids*. 2022, vol. 34, no. 026105. <https://doi.org/10.1063/5.0079664>