

# Numerical Interpretation of Experimental Data on the Spectral Radiation of Shock Waves in Air at Velocities of $7 \div 8$ km/s using the eRC-model

Sergey T. Surzhikov

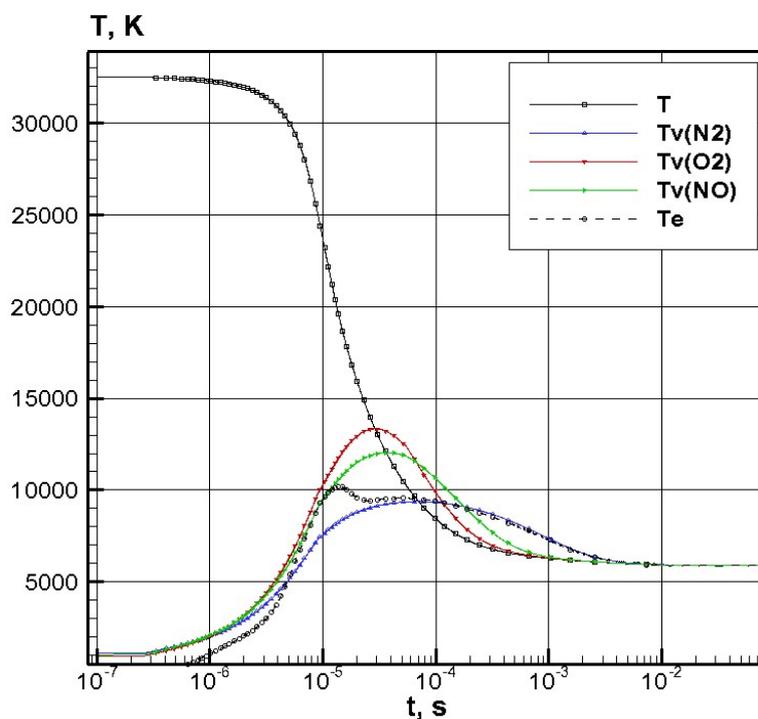
*Ishlinskyi Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences (IPMech RAS),  
Moscow, 119526, Russia*

surg@ipmnet.ru

## Abstract

Using the electron-radiative-collision model (eRC), calculations of the spectral emissivity of shock waves in air at velocities of  $7 \div 8$  km/s were performed under the conditions of shock-wave experiments [Cruden B. A., Brandis A. V. Measurement of Radiative Nonequilibrium for Air Shocks Between 7 and 9 km/s//JTHT. 2019]. A kinetic model of the population and depletion of electronically excited quantum states of diatomic molecules is presented. Satisfactory agreement between the obtained calculated and experimental data is shown. A formulation of current problems for the further development of eRC-models is given.

Keywords: radiation-collision model, emissivity of electron-vibrational bands of diatomic molecules, experimental data on the spectral radiation of strong shock waves.



Time distributions of translational, vibrational and electron temperatures behind the shock wave front

УДК 533.92:533.6.01

# Численная интерпретация экспериментальных данных по спектральному излучению ударных волн в воздухе при скоростях $7 \div 8$ км/с посредством eRC-модели

С. Т. Суржиков

*Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского Российской академии наук  
Россия, Москва, 119526, проспект Вернадского, д. 101-1*

[surg@ipmnet.ru](mailto:surg@ipmnet.ru)

## Аннотация

С использованием электронно-радиационно-столкновительной модели (eRC) выполнены расчеты спектральной излучательной способности ударных волн в воздухе при скоростях  $7 \div 8$  км/с в условиях проведения ударно-волновых экспериментов [Cruden B.A., Brandis A.V. Measurement of Radiative Nonequilibrium for Air Shocks Between 7 and 9 km/s//ЖТНТ. 2019]. Представлена кинетическая модель заселения и опустошения электронно-возбужденных квантовых состояний двухатомных молекул. Показано удовлетворительное совпадение полученных расчетных и экспериментальных. Дана формулировка актуальных задач дальнейшего развития eRC-моделей.

Ключевые слова: радиационно-столкновительная модель, излучательные способности электронно-колебательных полос двухатомных молекул, экспериментальные данные по спектральному излучению сильных ударных волн.

## 1. Введение

Недавно опубликованные экспериментальные данные по спектральному излучению релаксационной зоны за фронтом сильных ударных волн в воздухе [1, 2] при скоростях  $7 \div 10$  км/с дают возможность продолжения работ по тестированию и дальнейшему развитию моделей физико-химической кинетики, начатых около полувека назад [3–14].

Введение в практику исследования спектрального неравновесного излучения быстродействующих электронных приборов и развитие методов компьютерного моделирования позволили уже в 90-х годах прошлого столетия разработать компьютерные модели физико-химической кинетики [12] и излучения [13, 14], которые позволили с удовлетворительной точностью предсказывать и интерпретировать синтетические спектры неравновесного излучения, получаемые в эксперименте. Подробный обзор экспериментальных и расчетно-теоретических работ, посвященных этим вопросам, представлены в работе [15].

Однако, по мере накопления опыта и совершенствования техники эксперимента и, параллельно, развития расчетно-теоретических моделей, а также наполнения используемых баз кинетических данных по скоростям элементарных физико-химических процессов, стали более отчетливо проявляться основные проблемные вопросы, на которые пока нет внятных ответов. Примеры таких проблем в экспериментальной области обсуждались в [1, 2], где также можно найти обширную библиографию. Обзор проблем в расчетно-теоретической области приведены в [15], а также в [16].

Наметившаяся тенденция в недавних работах [15, 16] более детального рассмотрения отдельных кинетических и релаксационных процессов обусловлена желанием исследователей соединить уникальные возможности современных экспериментов как по синтетическим

панорамным спектрам, так и по временной зависимости интенсивности излучения в узких спектральных диапазонах, ассоциируемых с отдельно взятыми кинетическими процессами с детальными кинетическими расчетами. Именно указанные временные зависимости позволяют получить важную информацию по возбуждению и дезактивации отдельных квантовых состояний атомов и молекул, по развитию кинетических процессов, процессов диссоциации и ионизации. Чем более детально делаются попытки сопоставить получаемые экспериментальные данные с результатами компьютерного моделирования [15, 16], тем больше вопросов возникает к возможности описания начальных стадий кинетических процессов, к выбору моделей учитываемых кинетических процессов, будь то в моделях физической газовой динамики или в стохастических моделях. Применительно к первому из упомянутых классов моделей анализ различных подходов выполнен в [17–19].

В развиваемых в настоящее время eRC-моделях физико-химической кинетики совместно с моделями газовой динамики [20] прослеживаются два альтернативных направления. В первом случае для отдельных электронно-возбужденных состояний рассматриваются кинетические уравнения, задающие процессы их заселения или опустошения. Другими словами, каждое отдельно взятое электронно-возбужденное состояние рассматривается как отдельная компонента частично ионизированной смеси газов. При этом, для констант скоростей используются полуэмпирические величины, получаемые (рекомендуемые) как раз при обработке экспериментальных данных. Во втором случае, делается попытка расчета констант скоростей процессов с использованием квантовой механики/химии и физической кинетики.

В данной работе представлены результаты численного моделирования 4-х экспериментов [2] с использованием eRC-модели [15], в которой часть констант скоростей электронно-радиационной кинетики рассчитываются с использованием квазиклассических моделей.

## 2. Кинетическая модель заселения электронно-возбужденных состояний двухатомных молекул

Как отмечалось выше, в eRC-модели данной работы используются два блока кинетической схемы. Решение задачи химической кинетики, кинетики колебательного возбуждения, диссоциации и ионизации газа за фронтом ударной волны выполняется с использованием 1-го блока кинетической схемы – кинетической модели [21] для скоростей прямых химических реакций с учетом неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы. Данный блок кинетической модели представлен в Табл. П.1. Константы скоростей прямых реакций в этой модели задаются в аррениусовской форме

$$k_f = A_f T^{n_f} \exp\left(-\frac{E_f}{kT}\right)$$

В неравновесных условиях релаксация колебательных степеней свободы за фронтом ударной волны константы скоростей диссоциации модифицируются, например с использованием моделей [22].

Константы скоростей обратных химических реакций рассчитывались с использованием аппроксимаций констант равновесия реакций в форме аррениусовских зависимостей

$$k_r = A_r T^{n_r} \exp\left(-\frac{E_r}{kT}\right),$$

полученных в работе [23]. Числовые значения констант равновесия в диапазоне температур до 20000 К были получены с использованием полиномов [24]. Как видно из кинетической схемы в Табл. П.1, константы скоростей обратных реакций рассчитывались с учетом специфики столкновений двухатомных молекул с различными частицами.

Второй блок кинетической схемы включает процессы заселения и обеднения электронно-возбужденных состояний (см. Табл. П.2). Выделим следующие характеристики этих процессов, присутствующие в Табл. П.2:

- константы скоростей активации и дезактивации электронно-возбужденных состояний двухатомных молекул  $N_2$ , NO и молекулярных ионов  $N_2^+$  при столкновении с тяжелыми частицами или с электронами;
- константы скоростей ионизации молекул из отдельных возбужденных электронных состояний молекул  $N_2$ , NO;
- вероятности спонтанного испускания квантов излучения из электронно-возбужденных состояний двухатомных молекул.

Особенностью используемой в данной работе кинетической модели является использование данных *ab-initio* расчетов [25–27] для определения сил осцилляторов дипольных квантовых переходов.

Расчетные соотношения, связывающие коэффициенты Эйнштейна ровибронных переходов с силами осцилляторов электронных переходов, приведены и исследованы в работе [18]. Элементы теории электронных переходов, позволяющей использовать силы осцилляторов для расчета скоростей электронной кинетики двухатомных молекул приведены в работах [28–34].

### 3. Результаты расчетов

Расчеты спектральной излучательной способности релаксационной зоны за фронтом ударных волн в воздухе выполнены для следующих условий экспериментов [2]:

- а) Run#15:  $T_\infty = 293$  К,  $p_\infty = 13$  эрг/см<sup>3</sup>,  $V_\infty = 8.18 \times 10^5$  см/с;
- б) Run#20:  $T_\infty = 293$  К,  $p_\infty = 187$  эрг/см<sup>3</sup>,  $V_\infty = 8.29 \times 10^5$  см/с;
- в) Run#42:  $T_\infty = 293$  К,  $p_\infty = 340$  эрг/см<sup>3</sup>,  $V_\infty = 8.09 \times 10^5$  см/с;
- г) Run#50:  $T_\infty = 293$  К,  $p_\infty = 933$  эрг/см<sup>3</sup>,  $V_\infty = 7.34 \times 10^5$  см/с.

Название расчетных серий (Run#15, Run#20,...) заимствовано из [2], где так обозначались экспериментальные серии.

Расчеты проводились в два этапа с использованием двух авторских кодов. На первом этапе решалась задача физико-химической кинетики за фронтом ударной волны [15]. Использовалась одномерная газодинамическая модель Эйлера совместно с системой уравнений химической кинетики в рамках кинетической схемы #1–#48 (Табл. П.1), системой уравнений физической кинетики возбуждения и дезактивации электронно-возбужденных состояний в рамках кинетической схемы #1–#73 (Табл. П.2). В кинетической схеме замедления и опустошения электронно-возбужденных состояний использованы условные обозначения квантовых уровней:

N2	$X^1\Sigma_g^+$	N2+	$X^2\Sigma_g^+$	NO	$X^2\Pi$
N2	$A^3\Sigma_u^+$	N2+A	$A^2\Pi_u$	NOA	$A^2\Sigma^+$
N2B	$B^3\Pi_g$	N2+B	$B^2\Sigma_u^+$	NOB	$B^2\Pi$
N2C	$C^3\Pi_u$	N2+C	$C^2\Sigma_u^+$	NOC	$C^2\Pi$
N2D	$D^3\Sigma_u^+$			NOD	$D^2\Sigma^+$
N2b1	$b^1\Pi_u$				
N2b2	$b^{1'}\Sigma_u^+$				

Также решались уравнения сохранения энергии газа и электронов, система уравнений релаксационной кинетики колебательных состояний двухатомных молекул. В результате

расчетов находятся распределения вдоль продольной координаты (или по времени отхода от фронта) температуры электронов, поступательных и колебательных степеней свободы, концентраций молекулярных и атомарных компонент частично ионизованного воздуха, заселенностей возбужденных электронных состояний. Полученные расчетные данные передаются во второй компьютерный код в качестве исходных данных.

На втором этапе решались следующие задачи.

1) Расчет спектральной излучательной способности в широком спектральном диапазоне  $\Delta\lambda = 190 \div 500$  нм (т.н. «синтетический» спектр), интегральной (или усредненной) на заданном временном интервале  $\Delta t$  или, что одно и то же, интегральной на дистанции  $\Delta x_{\Delta t}$ , которую проходит газ за фронтом ударной волны. Наглядный физический аналог этих результатов можно пояснить при помощи схемы физического эксперимента, показанного на рис. 1. Задание времени регистрации оптического сигнала  $\Delta t$  после прихода ударной волны в поле зрения детектора, позволяет определить интегральную по указанному интервалу  $\Delta t$  спектральную энергию, поступившую в детектор. При численной интерпретации такого эксперимента, интервал времени  $\Delta t$  с высокой точностью соответствует расстоянию  $\delta_{exp}$ , на которое пройдет фронт ударной волны за это время.

2) Расчет спектральной излучательной способности интегральной на заданном временном интервале  $\Delta t$  в отдельных электронно-колебательных полосах:

NO  $\gamma$ - система полос ( $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ ),

NO  $\beta$ - система полос ( $B^2\Pi - X^2\Pi$ ),

NO  $\delta$ - система полос ( $C^2\Pi - X^2\Pi$ ),

N2 «2+» – система полос ( $C^3\Pi_u - B^3\Pi_u$ ),

N2 «VK» – система полос ( $A^3\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ ),

N2+ «1-» система полос ( $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ).

3) Расчет распределений по времени излучательной способности NO, N<sub>2</sub><sup>+</sup> в узких спектральных диапазонах.

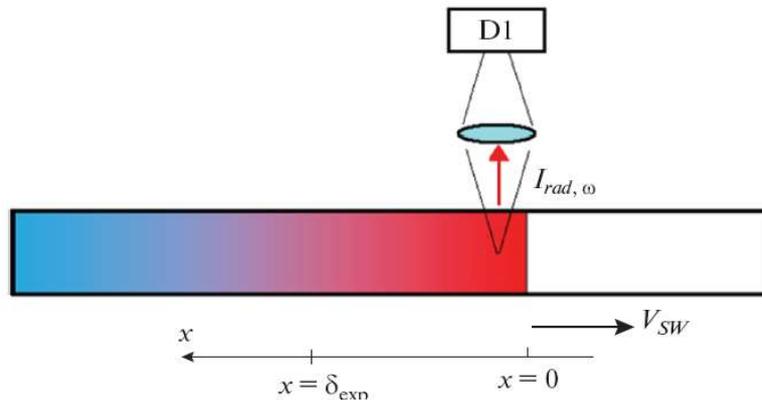


Рис. 1. Расчетная схема интерпретации ударно-волновых экспериментов: спектральная интенсивность излучения  $I_{rad,\omega}$ , испускаемого нагретым газом за фронтом ударной волны фиксируется приемником излучения D1; фронт ударной волны перемещается слева направо по невозмущенному газу

Рассмотрим более подробно результаты решения кинетической части задачи. На рис. 2 показаны распределения электронной, поступательной и колебательных температур во времени, а на рис. 3 – вдоль продольной координаты для 4-х экспериментов. Сравнение расчетных данных на указанных рисунках позволяет получить представление о развитии релаксационных зон за фронтом ударной волны во времени и в пространстве.

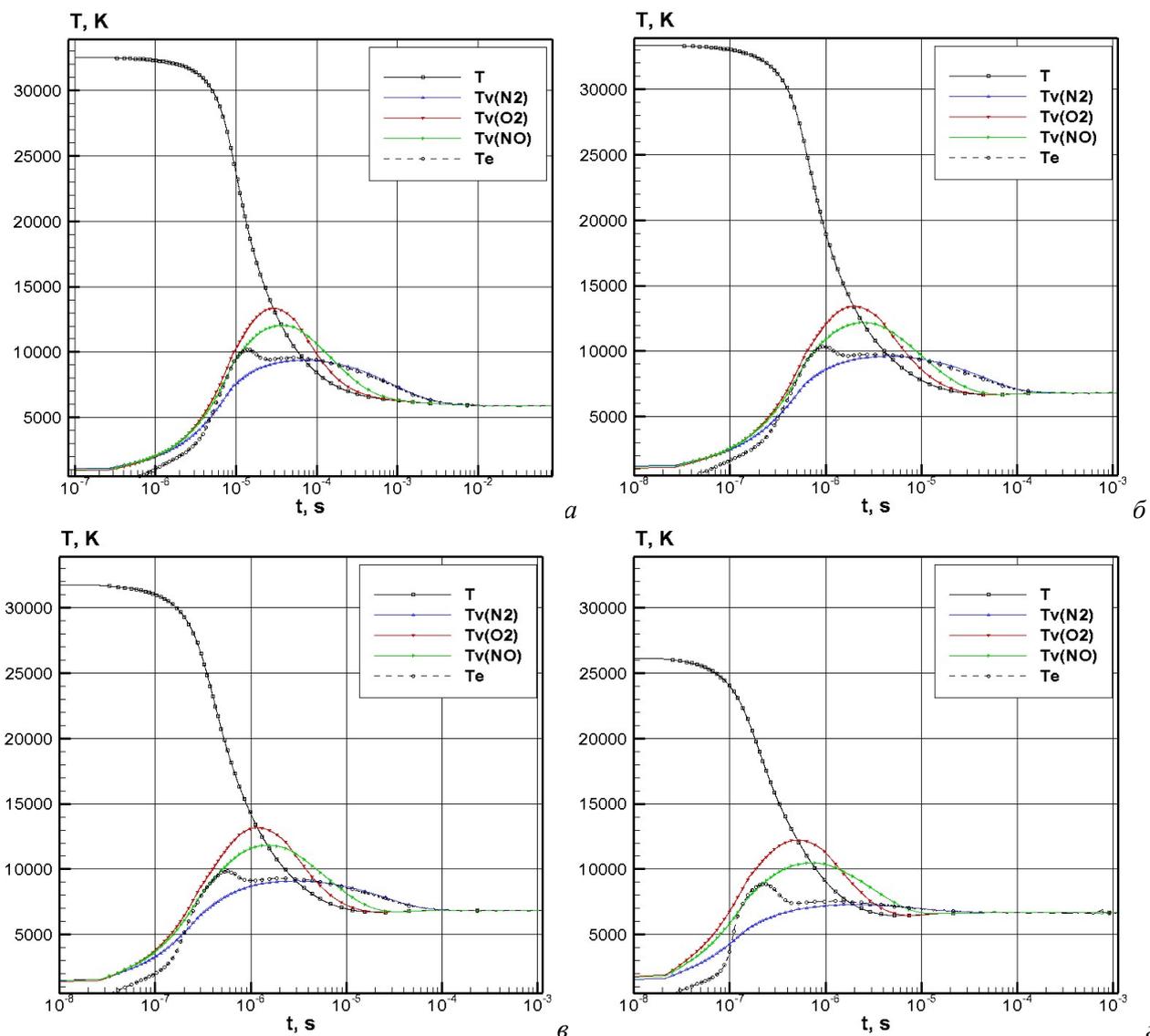


Рис. 2. Распределения во времени поступательной, колебательных и электронной температур за фронтом ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(*a*), Run#20(*б*), Run#42(*в*), Run#50(*г*)

По мере увеличения давления в набегающем потоке воздуха заметно снижается время релаксационных процессов от  $\Delta t_{\text{rel}} \sim 5 \times 10^{-3}$  с до  $\Delta t_{\text{rel}} \sim 2 \times 10^{-5}$  с. Соответственно сокращается протяженность релаксационной зоны от  $\Delta x_{\text{rel}} \sim 2 \times 10^2$  см до  $\Delta x_{\text{rel}} \sim 1$  см.

Основные закономерности распределения температур колебательных степеней свободы и температур электронов неоднократно обсуждались ранее [13, 21, 22]. Наиболее продолжительный релаксационный процесс наблюдается для молекул  $\text{N}_2$ , наиболее быстрый процесс – для молекулы  $\text{O}_2$ . В данной модели, в отличие от работы [11] температура электронов  $T_e$  в набегающем потоке полагалась равной температуре набегающего потока воздуха,  $T = 293$  К, где эта температура полагалась практически равной температуре поступательных степеней свободы за фронтом ударной волны. Численные эксперименты, выполненные в данной работе, показали, что разница в задании  $T_e$  за фронтом ударной волны достаточно быстро нивелируется к моментам времени, отвечающим достижению колебательных температур своего максимума, где колебательные и электронная температуры практически сравниваются вследствие сильного резонансного взаимодействия электронов с колебательными степенями свободы молекул.

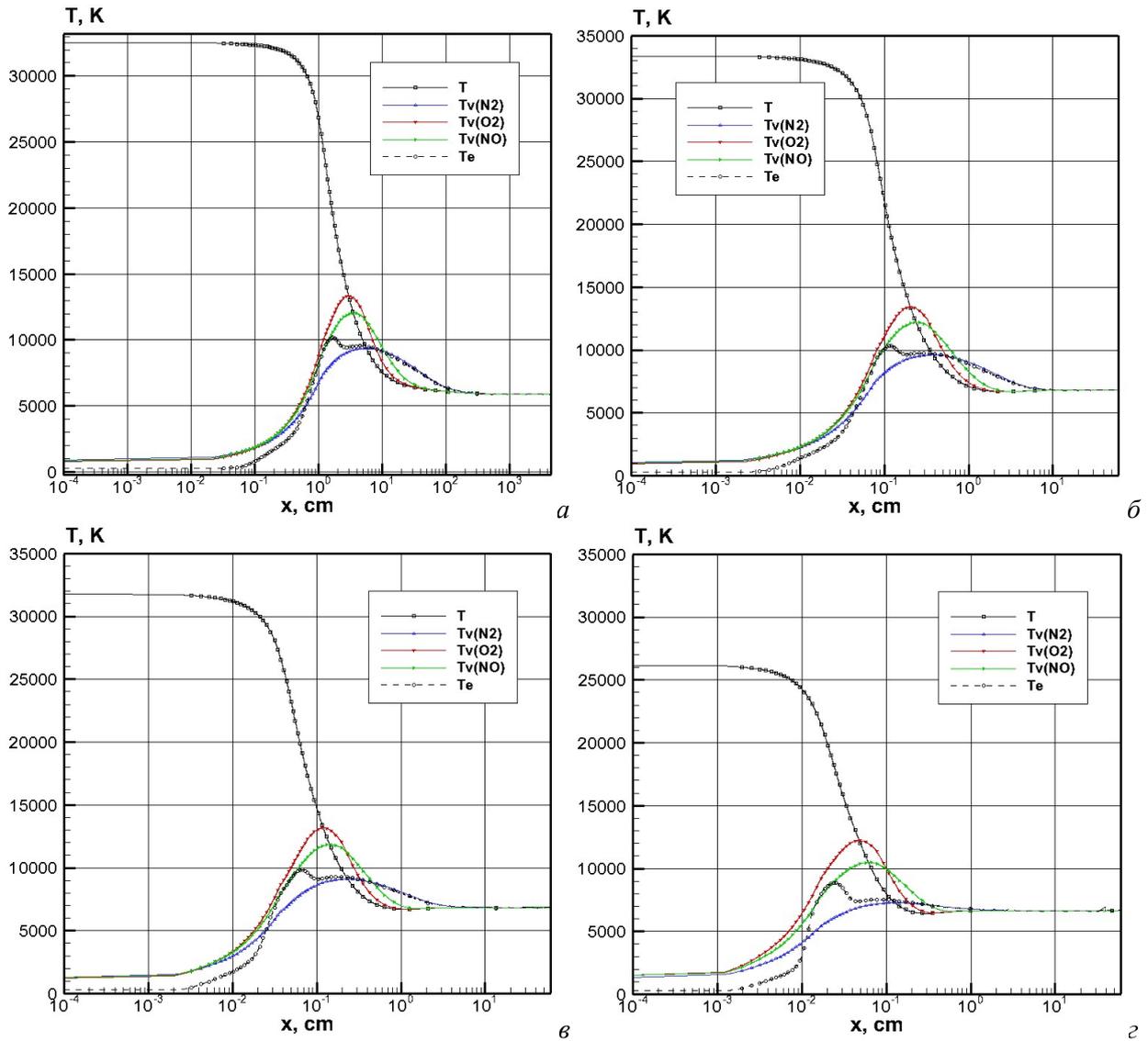


Рис. 3. Распределения вдоль продольной координаты, связанной с теоретическим фронтом ударной волны, поступательной, колебательных и электронной температур во фронте ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(a), Run#20(б), Run#42(в), Run#50(г)

Необходимо отметить, что вопрос корректного описания начальной стадии релаксационных процессов еще подлежит тщательному изучению. В частности, требует более глубокое изучение электронной кинетики в релаксационной зоне за фронтом ударной волны. Модели электронной кинетики, используемые в расчетах газодинамических задач [12, 13], во многом базируются на теоретическом анализе работ [10, 37], требуют дальнейшего развития с учетом новых достижений электронной кинетики.

На рис. 4 и рис. 5 показаны распределения относительных мольных долей во времени и вдоль продольной координаты. Анализ указанных распределений дополняет информацию по температурным распределениям относительно протяженности релаксационных зон. На этих рисунках показаны также профили заселенностей электронно-возбужденных состояний, которые весьма быстро заселяются и опустошаются. Такое их поведение полностью определяет импульсное поведение во времени излучательной способности отдельных электронных полос (показаны ниже на рис. 10 и рис. 11).

На рис. 6–8 показаны числовые концентрации основных и возбужденных электронных состояний, где также хорошо видны локальные максимумы в релаксационной зоне.

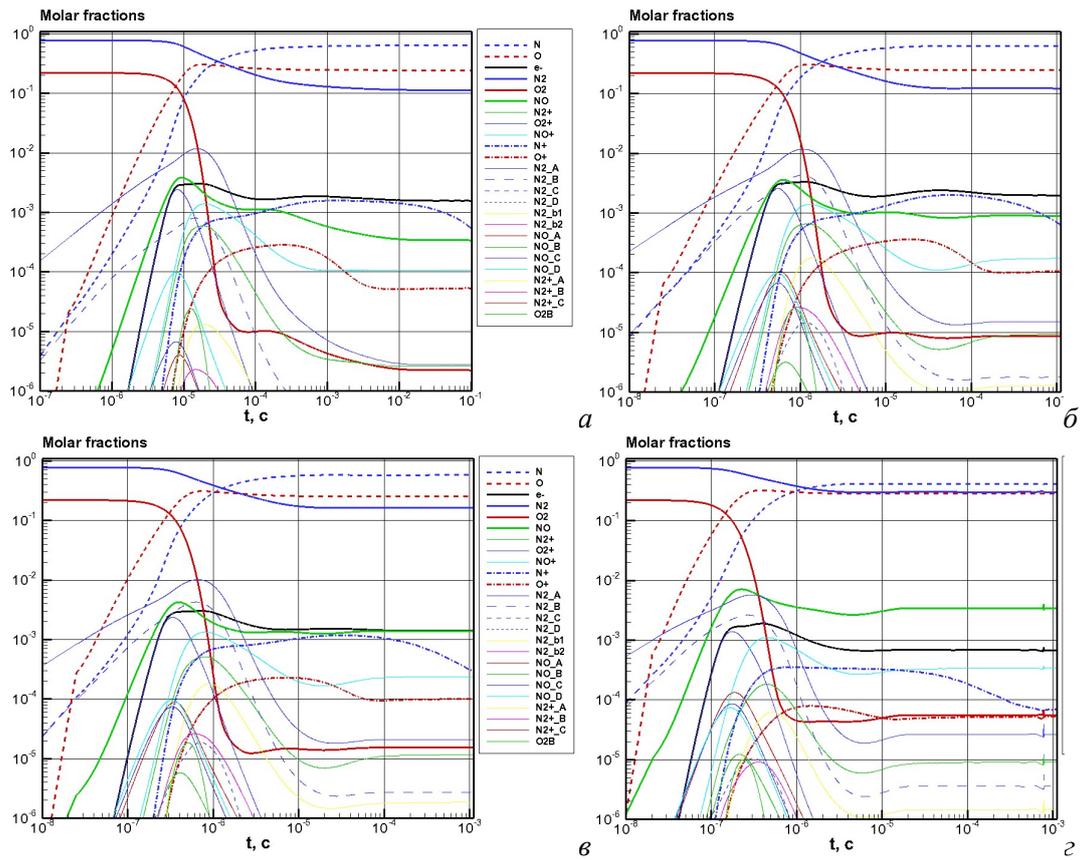


Рис. 4. Распределения во времени молярных концентраций за фронтом ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(a), Run#20(b), Run#42(v), Run#50(z)

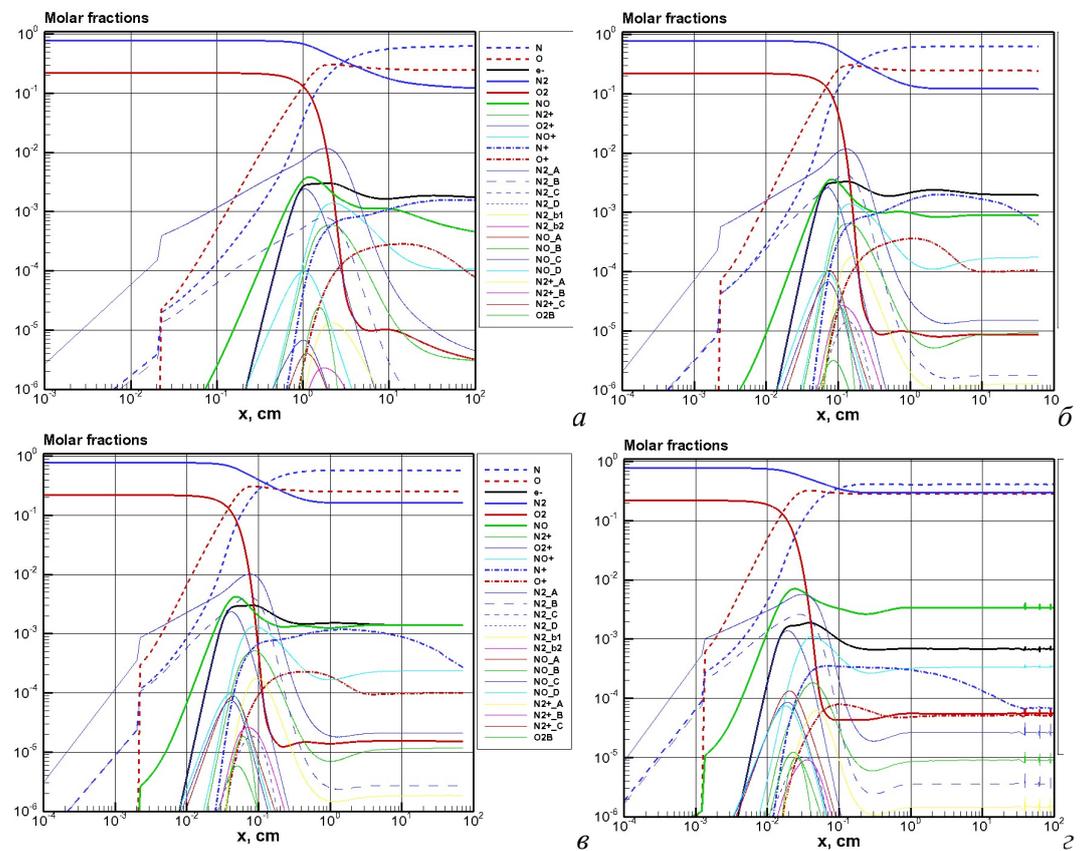


Рис. 5. Распределения вдоль продольной координаты молярных концентраций за фронтом ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(a), Run#20(b), Run#42(v), Run#50(z)

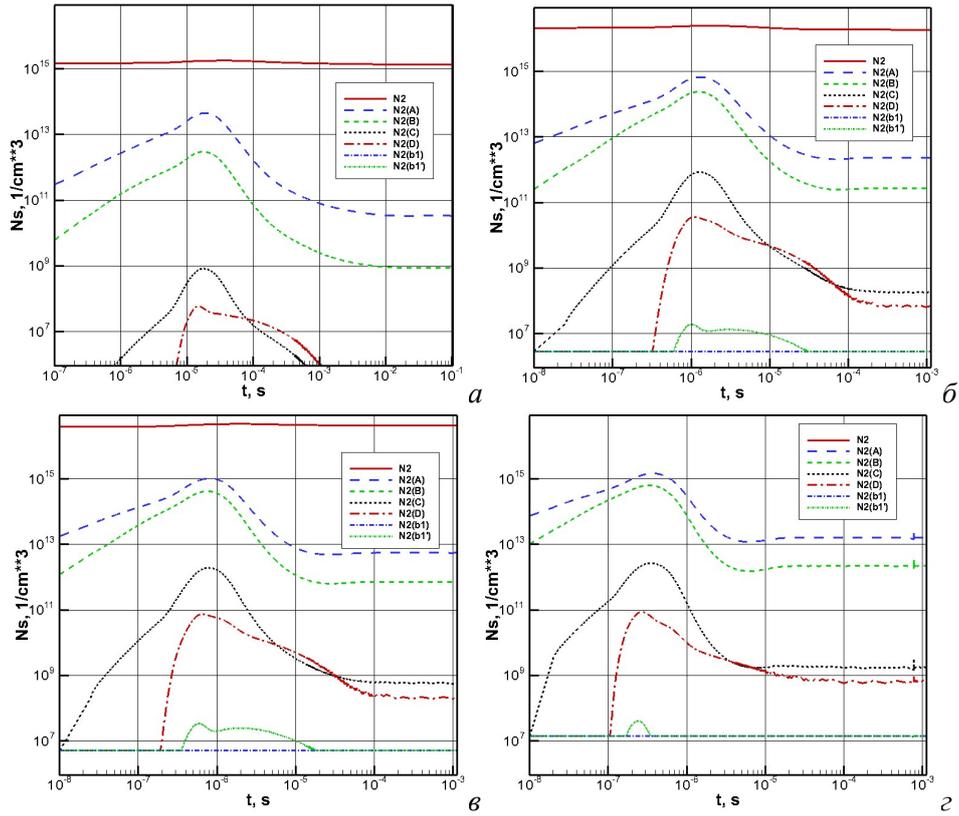


Рис. 6. Распределения во времени заселенностей возбужденных электронных состояний молекулы  $N_2$  за фронтом ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(a), Run#20(б), Run#42(в), Run#50(г)

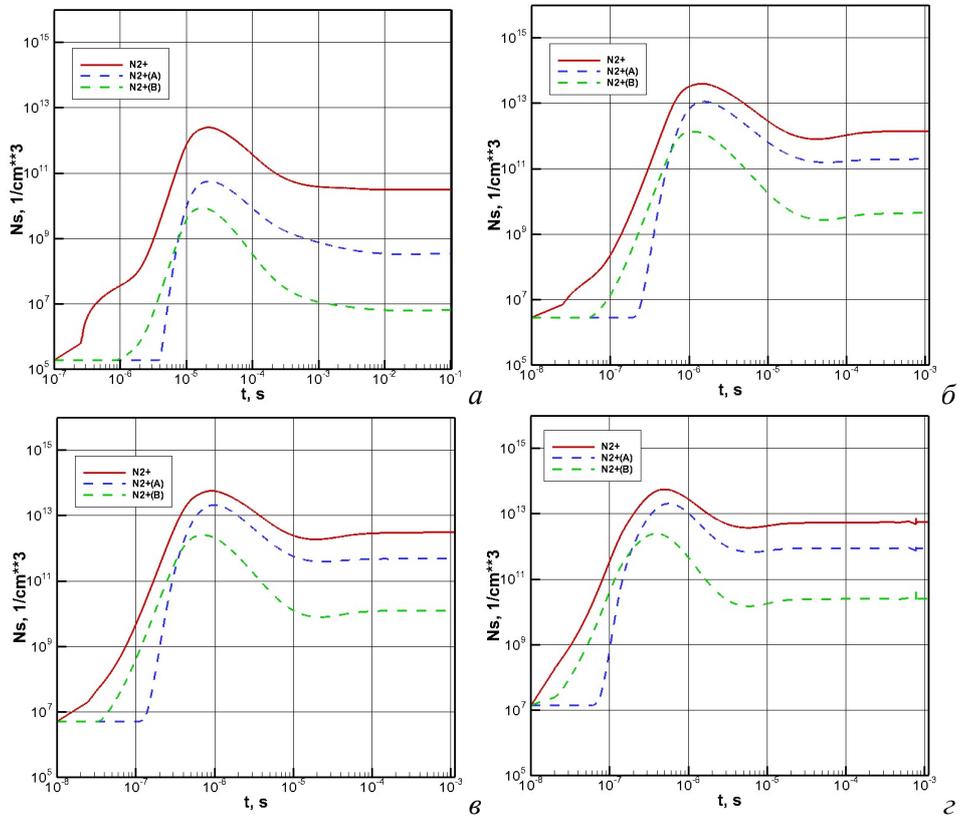


Рис. 7. Распределения во времени заселенностей возбужденных электронных состояний молекулы  $N_2^+$  за фронтом ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(a), Run#20(б), Run#42(в), Run#50(г)

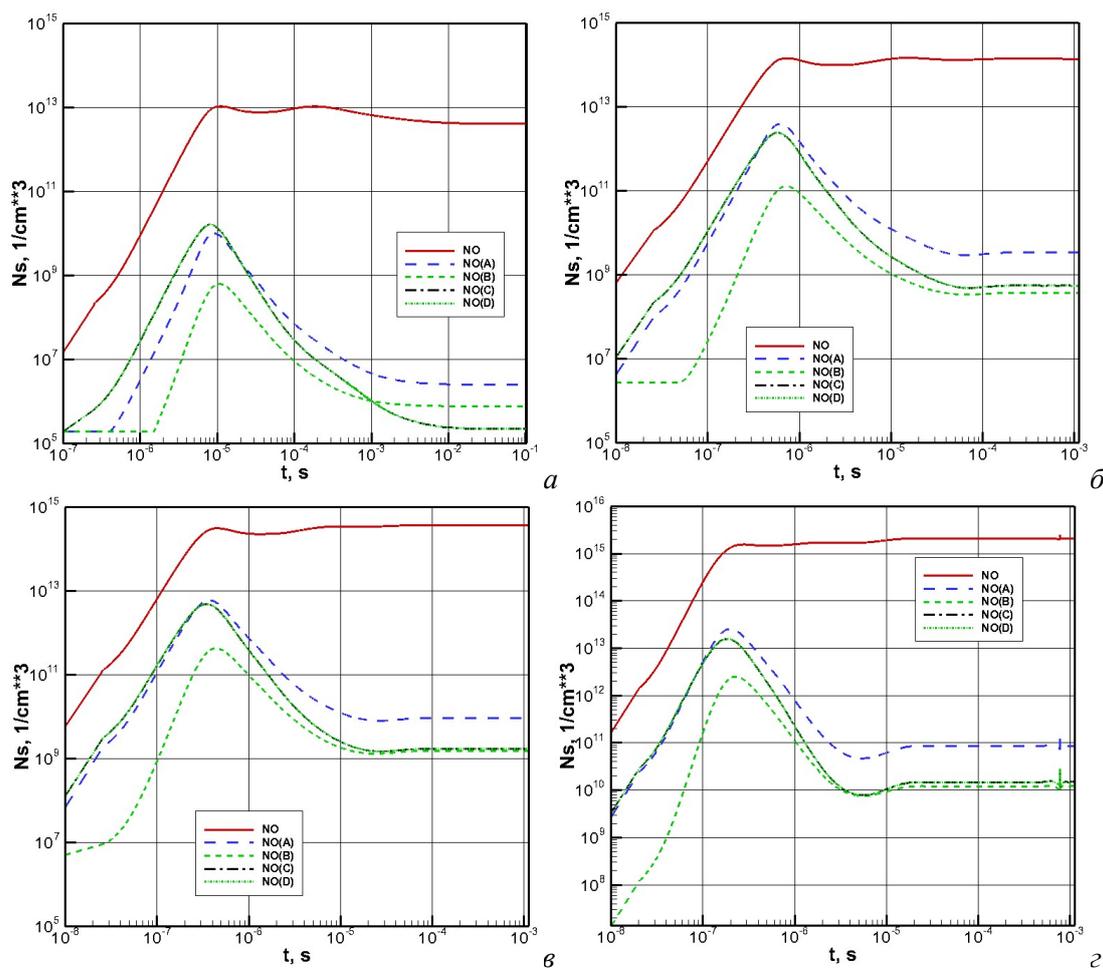


Рис. 8. Распределения во времени заселенностей возбужденных электронных состояний молекулы NO за фронтом ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(*a*), Run#20(*б*), Run#42(*в*), Run#50(*г*)

Главным расчетным итогом выполненной работы является сравнение рассчитанных интенсивностей спектрального излучения с экспериментальными данными [2], представленное на рис. 9. Синтетические спектры излучательной способности были получены на следующих временных интервалах:

$$\Delta t = 3 \times 10^{-6} \div 10^{-3} \text{ с для эксперимента Run\#15,}$$

$$\Delta t = 10^{-4} \div 10^{-3} \text{ с для эксперимента Run\#20,}$$

$$\Delta t = 10^{-6} \div 10^{-2} \text{ с для эксперимента Run\#42,}$$

$$\Delta t = 10^{-4} \div 10^{-2} \text{ с для эксперимента Run\#50.}$$

В работе [19] исследовался вопрос о рекомендуемых диапазонах усреднения спектра вращательных линий при расчете излучательной способности в электронно-колебательных полосах, примеры которых показаны на рис. 9. В представленных расчетных данных использовалось следующее число диапазонов усреднения:

$$N_{av} = 10^3 \text{ (Run\#15), } N_{av} = 10^2 \text{ (Run\#20), } N_{av} = 10^3 \text{ (Run\#42), } N_{av} = 10^2 \text{ (Run\#50).}$$

Приведенные диапазоны чисел спектральных диапазонов является вполне приемлемым для достоверной интерпретации всех экспериментов. Очевидно, что для большего числа диапазонов усреднения на спектральных распределениях интенсивности излучения более отчетливо проявляется колебательная структура спектра (см., например, рис. 9, *з*).

Представленные данные наглядно иллюстрируют главный вклад в излучательную способность в вакуумной ультрафиолетовой области  $\lambda < 250$  нм двух электронных полос NO:

NO  $\delta$ -системы полос ( $C^2\Pi - X^2\Pi$ ) и NO  $\gamma$ -системы полос ( $A^2\Sigma - X^2\Pi$ ). При этом, электронная полоса NO  $\gamma$ -система полос является определяющей в спектральном диапазоне  $\lambda = 240 \div 280$  нм.

На рис. 9 хорошо видна определяющая роль электронных полос  $N_2$  («2+» система полос,  $C^3\Pi_u - B^3\Pi_u$ ) в спектральном диапазоне  $\lambda = 290 \div 400$  нм и  $N_2^+$  («1-» система полос,  $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ) в спектральном диапазоне  $\lambda = 320 \div 500$  нм.

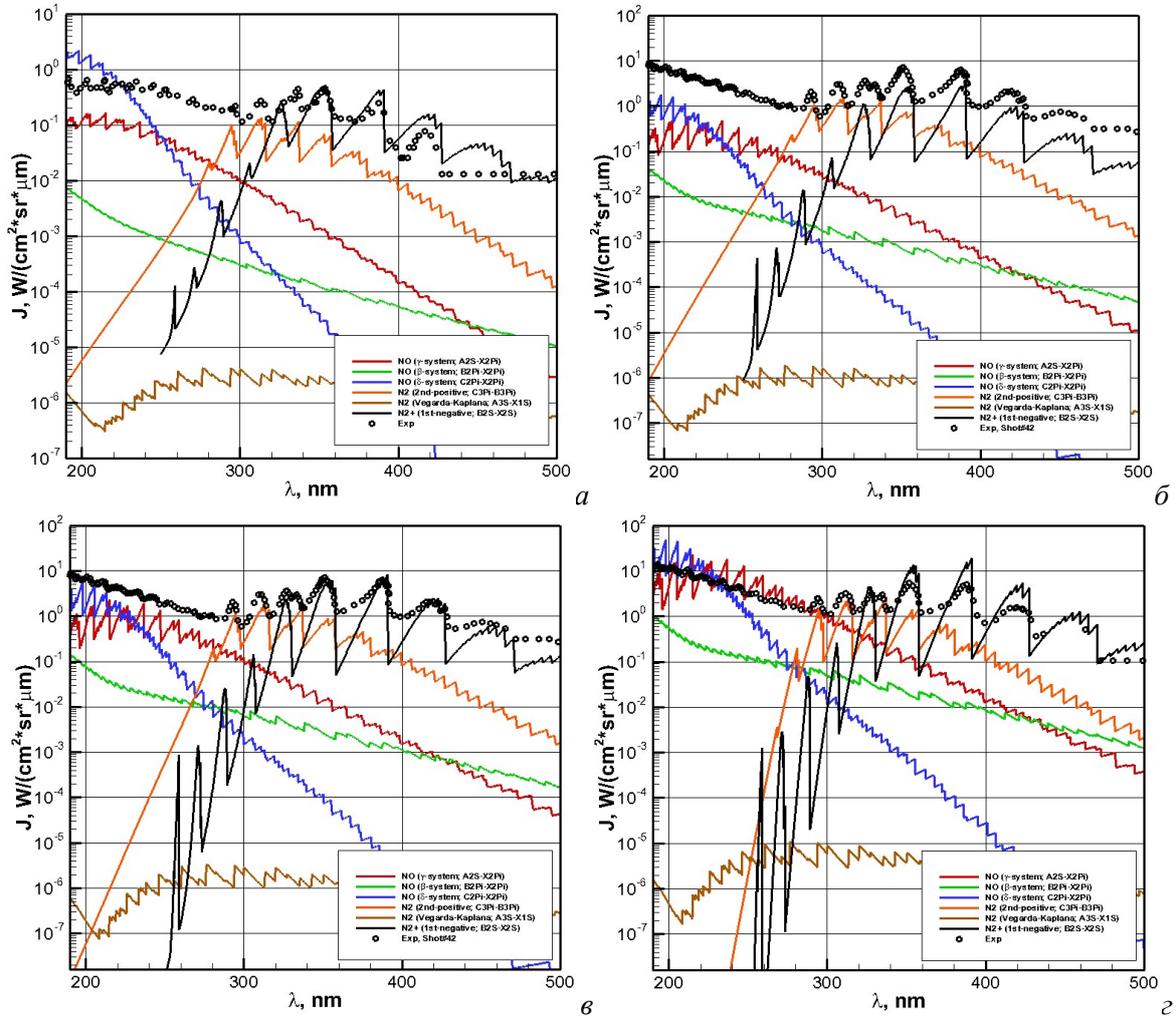


Рис. 9. Спектральная излучательная способность сильных ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(a), Run#20(б), Run#42(е), Run#50(з). Цветными кривыми показаны парциальные излучательные способности отдельных электронно-колебательных полос, точки – экспериментальные данные

В целом можно отметить удовлетворительное соответствие расчетных данных экспериментальным несмотря на известные неопределенности, присущие физическим опытам, а также на значительное число использованных физико-химических моделей, с присущими им допущениями и неопределенностями. Тем не менее, следует отметить, что в отдельных спектральных диапазонах различие остается весьма значительным. Численные эксперименты показывают, что наиболее чувствительны расчетные данные по спектральной интенсивности к константам скоростей возбуждения и опустошения электронных состояний молекул. При этом тривиальная коррекция констант скоростей отдельных реакций нельзя признать продуктивной, в силу значительной связи отдельных электронных процессов между собой [23].

На рис. 10, 11 в качестве примера показаны распределения во времени излучательной способности в отдельных спектральных диапазонах молекул NO и  $N_2^+$ .

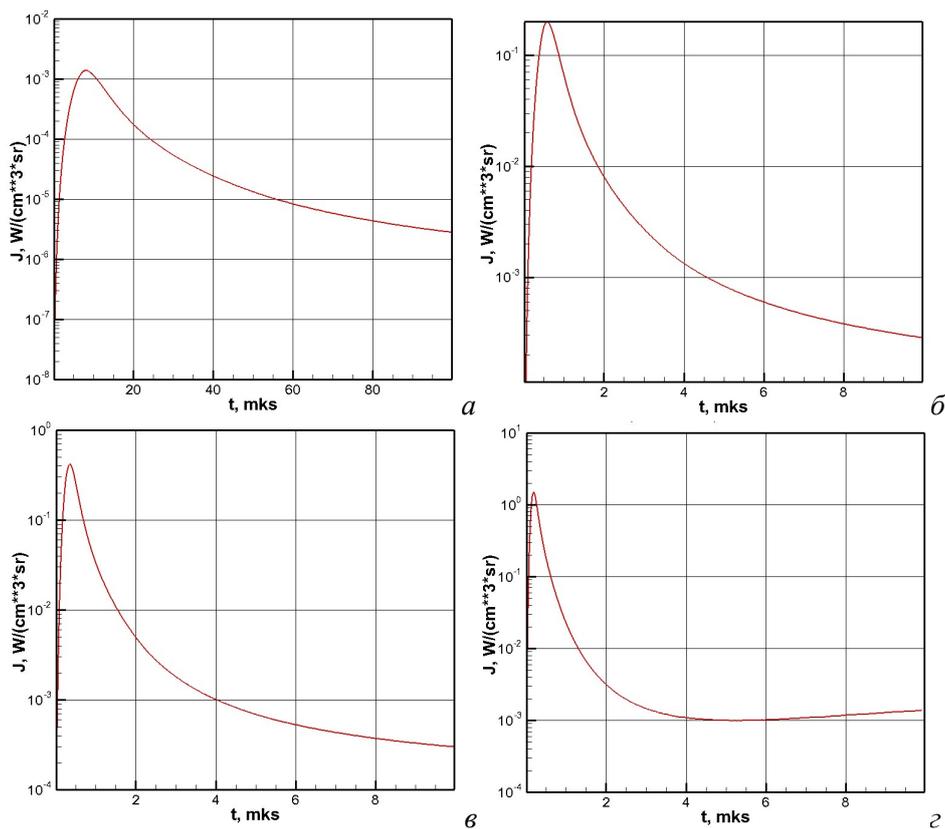


Рис. 10. Распределения во времени излучательной способности молекулы NO в узком спектральном  $46508 \div 47388 \text{ cm}^{-1}$  диапазоне за фронтом ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(a), Run#20(б), Run#42(в), Run#50(г)

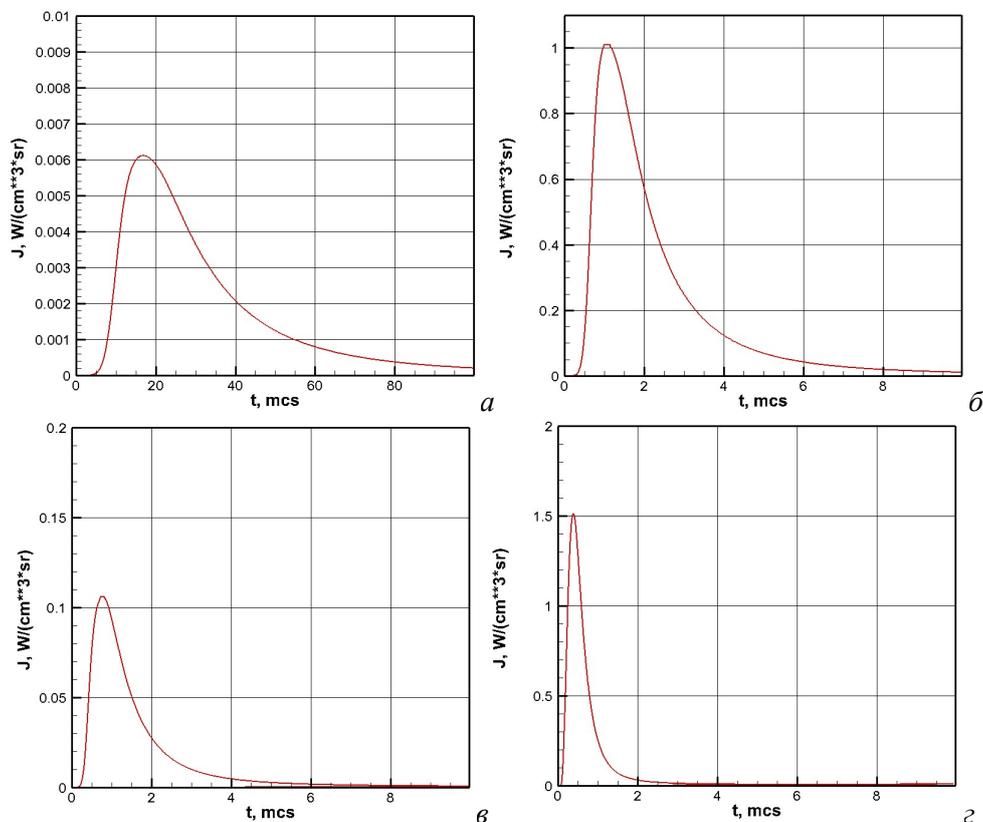


Рис. 11. Распределения во времени излучательной способности молекулы  $N_2^+$  в узком спектральном диапазоне  $27027 \div 31200 \text{ cm}^{-1}$  за фронтом ударных волн для четырех экспериментов [2]: Run#15(a), Run#20(б), Run#42(в), Run#50(г)

Приведенные данные показывают потенциальные возможности сравнений этих распределений с экспериментальными данными, как это показано в работе [15]. При этом, конечно, следует обеспечить строгое соответствие расчетных данных экспериментальным по выбранным спектральным диапазонам и временным интервалам, что не всегда является простой задачей. При повышенных давлениях в набегающем потоке на точность результатов сравнения могут также оказать влияние процессы реабсорбции.

#### 4. Заключение

Разработанная компьютерная eRC-модель использована для численной интерпретации ударно-волновых экспериментальных данных по спектральному излучению ударных волн в воздухе при скорости  $7 \div 8$  км/с. Используемая eRC-модель состоит из двух кинетических моделей, первая из которых определяет неравновесную химическую кинетику частично ионизованного газа, а вторая модель определяет скорость заселения и объединения отдельно выделенных электронно-возбужденных состояний.

Особенностью использованной кинетической модели является расчет констант скоростей процессов заселения и обеднения с использованием квазиклассической теоретической модели.

Показано, что разработанная компьютерная модель позволяет с удовлетворительной точностью описать экспериментальные данные по синтетическим спектрам интенсивности излучения релаксационной области ударных волн.

Обозначены задачи дальнейших исследований, связанных с получением достоверных кинетических данных для отдельных элементарных процессов, установления соответствия по временным экспериментальным и расчетным интервалам, оценкам уровня реабсорбции в экспериментальных условиях. В приложении приведена использованная кинетическая модель.

#### Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №22-11-00062).

#### Литература

1. Козлов П. В. Экспериментальное исследование радиационных свойств воздуха за фронтом ударной волны при скоростях до 10 км/с // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2016. Т. 17, вып. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-1/articles/624/>
2. Cruden B.A., Brandis A.V. Measurement of radiative nonequilibrium for Air Shocks Between 7 and 9 km/s // Journal Thermophysics and Heat Transfer. November 2019. <https://doi.org/10.2514/1.T5735>
3. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука. 1966. 686 с.
4. Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Изд-во «Наука» Глав. ред. Физ.-Мат. Литературы. 1965. 484 с.
5. Park C. Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics. Wiley-Inter-science Publication. J. Wiley & Sons. New York. 1990.
6. Агафонов В.П., Вертушкин В.К., Гладков А.А. и др. Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике. М.: Машиностроение. 1972. 344 с.
7. Keck C.K., Camm J.C., Kivel B. and Wentink T. Jr. Radiation from Hot Air Part II. Shock Tube Study of Absolute Intensities // Annals of Physics. 1959. Vol. 7. pp. 1–38.
8. Thomas G.M. and Menard W.A. Experimental Measurements of Nonequilibrium and Equilibrium Radiation from Planetary Atmospheres // AIAA Journal. Vol. 4. No. 2. 1966. Pp. 227–237.
9. Wilson J. Ionization rate of air behind high-speed shock waves // Phys. Fluids. 1965. Vol. 9. No. 10
10. Железняк М.В., Мнацаканян А.Х., Якубов И.Т. Релаксация и неравновесное излучение за ударными волнами в воздухе // МЖГ. 1970. № 4. С. 161–174.

11. Gorelov V.A., Kildusheva L.A., Kireev A.Yu. Ionization Particularities Behind Intensive Shock Waves in Air at Velocities of 8÷15 km/s // AIAA Paper 94-2051. 1994. 11 p.
12. Лосев С.А., Макаров В.Н., Погосбекян М.Ю. Модель физико-химической кинетики за фронтом очень сильной ударной волны в воздухе // МЖГ. 1995. № 2. С. 169–182.
13. Залогин Г.Н., Козлов П.В., Кузнецова Л.А., Лосев С.А., Макаров В.Н., Романенко Ю.В., Суржиков С.Т. Излучение смеси CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>-Ar в ударных волнах: эксперимент и теория // ЖТФ. 2001. Т. 46. № 6. С. 10–16.
14. Kuznetsova L.A., Surzhikov S.T. Spectral Radiation of Shock Waves and Radiative Models of Diatomic Molecules // AIAA Paper 97-2564. 1997. 10 p.
15. Суржиков С. Т. Применение квазистационарных eRC-моделей для расчета неравновесного излучения ударных волн при скорости порядка 10 км/с // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2022. Т. 23, вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-4/articles/1015/>
16. Кусов А. Л., Козлов П. В., Быкова Н. Г., Забелинский И. Е., Герасимов Г. Я., Левашов В. Ю. Прямое статистическое моделирование излучения за фронтом ударной волны в кислороде // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2022. Т. 23, вып. 3. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-3/articles/1000/>
17. Суржиков С. Т. Введение в теорию eRC-моделей аэрофизики высоких скоростей. Общие понятия // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2021. Т. 22, вып. 6. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/967/>
18. Суржиков С. Т. Введение в теорию eRC-моделей аэрофизики высоких скоростей. Электронная кинетика двухатомных молекул // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2021. Т.22, вып. 6. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/968/>
19. Суржиков С. Т. Модель усредненной по вращательной структуре неравновесной излучательной способности двухатомных молекул//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2023. Т.24, вып. 6. <http://chemphys.edu.ru/issues/2023-24-6/articles/1078/>
20. Surzhikov S.T. Radiative-Collisional Models of Non-Equilibrium Aerothermodynamics of Entry Probes // ASME J. of Heat and Mass Transfer. 2012. Vol. 134, issue 3. 11 p.
21. Park Ch. Review of Chemical-Kinetic Problems of Future NASA Missions, I: Earth Entries // JTHT. 1993. Vol. 7. No. 3. Pp. 385-398.
22. Физико-химические процессы в газовой динамике. Компьютеризованный справочник. В 3-х томах. Том I. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме // Под ред. Г.Г. Черного и С.А. Лосева. – М.: Изд-во Моск. Ун-та. 1995. 350 с.
23. Суржиков С.Т. Компьютерная аэрофизика спускаемых космических аппаратов. Двухмерные модели. М.: Физматлит. 2018. 543 с.
24. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. М.: Наука. 1978. 495 с.
25. Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т. Информационно-вычислительный комплекс MSRT-RADEN. I. Основная модель коэффициентов поглощения // Математическое моделирование. 1998. Т. 36. № 3. С. 15–26.
26. Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т. Информационно-вычислительный комплекс MSRT-RADEN. 2. Модели коэффициентов поглощения // Математическое моделирование. 1998. Т.36. № 4. С. 30–40.
27. Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т. Информационно-вычислительный комплекс MSRT-RADEN. 3. База данных // Математическое моделирование. 1998. Т. 36. № 5. С. 15–26.
28. Park C. Rate Parameters for Electronic Excitation of Diatomic Molecules I. Electron Impact Processes // AIAA Paper 2008-1206. 15 p.
29. Park C. Rate Parameters for Electronic Excitation of Diatomic Molecules: II Heavy Particle Impact Processes // AIAA Paper 2008-1446. 16 p.

30. Teulet P., Sarrette J.P., Gomes A.M. Calculation of Electron Impact Inelastic Cross Sections and Rate Coefficients for Diatomic Molecules. Application to Air Molecules // JQSRT. 1998. Vol. 62. P. 549.
31. Cartwright D.C. Rate Coefficients and Inelastic Momentum Transfer Cross-Sections for Electronic Excitation of N<sub>2</sub> by Electrons // J. Appl. Phys. 1978. Vol. 49. №7. P. 3855.
32. Drawin H.W. Collision and Transport Cross Sections. Report EUR-CEA-FC 383. 1967.
33. Drawin H.W. Elementary Reactions and the Interpretation of Measurements of Chemically Reacting Non LTE Plasmas // Pure & Appl. Chem. 1976. Vol. 48. Pp. 133–153.
34. Семиохин И.А. Элементарные процессы в низкотемпературной плазме. М.: Изд-во МГУ. 1988. 141 с.
35. Surzhikov S.T., Sharikov I., Capitelli M., Colonna G. Kinetic Models of Non-Equilibrium Radiation of Strong Air Shock Waves// AIAA 2006-0586. 2006. 11 p.
36. Gorelov V.A., Kireev A.Yu., Shilenkov S., Surzhikov S.T. Prediction of Nonequilibrium Ionization and Emission at Superorbital Flight in Air // AIAA Paper 04-2380. 2004. 11 p.
37. Биберман Л.М., Мнацаканян А.Х., Якубов И.Т. Ионизационная релаксация за сильными ударными волнами в газах // УФН. 1970. Т.102. Вып.3. С.431-462.

## References

1. Kozlov P. V., Experimental Investigation of Air Radiation up to 10 km/s, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2016, vol. 17, no. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-1/articles/624/>
2. Cruden B. A., Brandis A. V., Measurement of radiative nonequilibrium for Air Shocks Between 7 and 9 km/s, *Journal Thermophysics and Heat Transfer*, 2019. <https://doi.org/10.2514/1.T5735>
3. Zeldovich Ya. B., Raizer Yu. P., *Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena*, М.: Nauka, 1966, 686 p. [in Russian].
4. Stupochenko E. V., Losev S. A., Osipov A. I., *Relaxation processes in shock waves*, М.: Nauka Publishing House, Editor-in-Chief of the Phys.-Math. Literature, 1965, 484 p. [in Russian]
5. Park C., *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*, Wiley-Inter-science Publication. J.Wiley & Sons. New York. 1990.
6. Agafonov V. P., Vertushkin V. K., Gladkov A. A., et al., *Nonequilibrium physical and chemical processes in aerodynamics*, М.: Mashinostroenie, 1972, 344 p. [in Russian].
7. Keck C. K., Camm J. C., Kivel B., and Wentink T. Jr., Radiation from Hot Air Part II. Shock Tube Study of Absolute Intensities, *Annals of Physics*, 1959, vol. 7, pp. 1–38.
8. Thomas G. M., and Menard W. A., Experimental Measurements of Nonequilibrium and Equilibrium Radiation from Planetary Atmospheres, *AIAA Journal*, 1966, vol. 4, no. 2, pp. 227–237.
9. Wilson J., Ionization rate of air behind high-speed shock waves, *Phys. Fluids*, 1965, vol. 9, no. 10.
10. Zheleznyak M. V., Mnatsakanyan A. Kh., Yakubov I. T., Relaxation and nonequilibrium radiation behind shock waves in air, *Fluid Dynamics*, 1970, no. 4, pp. 161–174 [in Russian].
11. Gorelov V. A., Kildusheva L. A., Kireev A. Yu., Ionization Particularities Behind Intensive Shock Waves in Air at Velocities of 8–15 km/s, AIAA Paper 94-2051, 1994, 11 p.
12. Losev S. A., Makarov V. N., Pogosbekyan M. Yu., Model of physicochemical kinetics behind the front of a very strong shock wave in air, *Fluid Dynamics*, 1995, no. 2, pp. 169–182.
13. Zalogin G. N., Kozlov P. V., Kuznetsova L. A., Losev S. A., Makarov V. N., Romanenko Yu. V., Surzhikov S. T., Radiation of a CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>-Ar mixture in shock waves: experiment and theory, *J. Tech. Phys.*, 2001, vol. 46, no. 6, pp. 10–16 [in Russian].
14. Kuznetsova L. A., Surzhikov S. T., Spectral Radiation of Shock Waves and Radiative Models of Diatomic Molecules, AIAA Paper 97-2564, 1997, 10 p.
15. Surzhikov S. T., Application of Quasi-Stationary eRC Models for the Calculation of Non-Equilibrium Radiation of Shock Waves at Velocity about 10 km/s, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2022, vol. 23, issue 4 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-4/articles/1015/>

16. Kusov A. L., Kozlov P. V., Bykova N. G., Zabelinsky I. E., Gerasimov G. Ya., Levashov V. Yu., Direct statistical simulation of oxygen radiation behind shock wave, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2022, vol. 23, issue. 3 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-3/articles/1000/>
17. Surzhikov S. T., Introduction to the Theory of the eRC-Models of High-Speed Aerophysics. The General Concepts, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, issue 6 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/967/>
18. Surzhikov S. T. Introduction to the theory of eRC-models of high-speed aerophysics. Electronic kinetics of diatomic molecules, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, issue 6 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/968/>
19. Surzhikov S. T., Model of nonequilibrium emissivity of diatomic molecules averaged over the rotational structure, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2023, vol. 24, issue 6 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2023-24-6/articles/1078/>
20. Surzhikov S. T., Radiative-Collisional Models of Non-Equilibrium Aerothermodynamics of Entry Probes, *ASME J. of Heat and Mass Transfer*, 2012, vol. 134, issue 3. <https://doi.org/10.1115/1.4005127>
21. Park Ch., Review of Chemical-Kinetic Problems of Future NASA Missions, I: Earth Entries, *JTHT*, 1993, vol.7, no. 3, pp. 385–398.
22. *Physicochemical processes in gas dynamics. Computerized reference book. In 3 volumes. Volume I. Dynamics of physicochemical processes in gas and plasma*, Ed. G. G. Cherny and S. A. Losev. M.: Publishing house of Moscow University, 1995, 350 p. [in Russian].
23. Surzhikov S. T., *Computer aerophysics of descent spacecraft. Two-dimensional models*, M.: Fizmatlit, 2018, 543 p. [in Russian].
24. Gurvich L. V., Veits I. V., Medvedev V. A., et al., *Thermodynamic properties of individual substances*, M.: Nauka, 1978, 495 p. [in Russian].
25. Kuznetsova L. A., Surzhikov S. T., Information and computing complex MSRT-RADEN. I. Basic model of absorption coefficients, *Mathematical modeling*, 1998, vol. 36, no. 3, pp. 15–26 [in Russian].
26. Kuznetsova L. A., Surzhikov S. T., Information and computing complex MSRT-RADEN. 2. Models of absorption coefficients, *Mathematical modeling*, 1998, vol. 36, no. 4, pp. 30–40. [in Russian]
27. Kuznetsova L. A., Surzhikov S. T., Information and computing complex MSRT-RADEN. 3. Database, *Mathematical modeling*, 1998, vol. 36, no. 5, pp. 15–26 [in Russian].
28. Park C., Rate Parameters for Electronic Excitation of Diatomic Molecules I. Electron Impact Processes, AIAA Paper 2008-1206. 15 p.
29. Park C., Rate Parameters for Electronic Excitation of Diatomic Molecules: II Heavy Particle Impact Processes, AIAA Paper 2008-1446. 16 p.
30. Teulet P., Sarrette J.P., Gomes A. M., Calculation of Electron Impact Inelastic Cross Sections and Rate Coefficients for Diatomic Molecules. Application to Air Molecules, *JQSRT*, 1998, vol. 62, p. 549.
31. Cartwright D. C., Rate Coefficients and Inelastic Momentum Transfer Cross-Sections for Electronic Excitation of N<sub>2</sub> by Electrons, *J. Appl. Phys.*, 1978, vol. 49, issue 7, p. 3855.
32. Drawin H. W., *Collision and Transport Cross Sections*, Report EUR-CEA-FC 383, 1967.
33. Drawin H. W., Elementary Reactions and the Interpretation of Measurements of Chemically Reacting Non LTE Plasmas, *Pure & Appl. Chem.*, 1976, vol. 48, pp. 133–153.
34. Semiokhin I. A., *Elementary processes in low-temperature plasma*, M.: Moscow State University Publishing House, 1988, 141 p. [in Russian].
35. Surzhikov S. T., Sharikov I., Capitelli M., Colonna G., Kinetic Models of Non-Equilibrium Radiation of Strong Air Shock Waves, AIAA Paper 2006-0586. 2006. 11 p.
36. Gorelov V. A., Kireev A. Yu., Shilenkov S., Surzhikov S. T., Prediction of Nonequilibrium Ionization and Emission at Superorbital Flight in Air, AIAA Paper 04-2380, 2004, 11 p.
37. Biberman L. M., Mnatsakanyan A. Kh., Yakubov I. T., Ionization relaxation behind strong shock waves in gases, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 1970, vol. 102, issue 3, pp.431–462 [in Russian].

Статья поступила в редакцию 29 ноября 2024 г.

## Приложение

Таблица П.1

### Кинетическая модель констант прямых и обратных реакций

No.	====...					$A_f$	$n_f$	$E_f$	$A_r$	$n_r$	$E_r$
1	O2	O2	O	O	O2	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.26705E+17	-0.50000E+00	0.00000E+00
2	O2	NO	O	O	NO	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.26705E+17	-0.50000E+00	0.00000E+00
3	O2	N2	O	O	N2	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.26705E+17	-0.50000E+00	0.00000E+00
4	O2	O	O	O	O	0.10000E+23	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.13353E+18	-0.50000E+00	0.00000E+00
5	O2	N	O	O	N	0.10000E+23	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.13353E+18	-0.50000E+00	0.00000E+00
6	O2	N+	O	O	N+	0.10000E+23	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.13353E+18	-0.50000E+00	0.00000E+00
7	O2	O+	O	O	O+	0.10000E+23	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.13353E+18	-0.50000E+00	0.00000E+00
8	O2	N2+	O	O	N2+	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.26705E+17	-0.50000E+00	0.00000E+00
9	O2	O2+	O	O	O2+	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.26705E+17	-0.50000E+00	0.00000E+00
10	O2	NO+	O	O	NO+	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.26705E+17	-0.50000E+00	0.00000E+00
11	NO	O2	N	O	O2	0.50000E+16	0.00000E+00	0.75500E+05	0.25807E+12	0.10000E+01	0.00000E+00
12	NO	NO	N	O	NO	0.11000E+18	0.00000E+00	0.75500E+05	0.56774E+13	0.10000E+01	0.00000E+00
13	NO	N2	N	O	N2	0.50000E+16	0.00000E+00	0.75500E+05	0.25807E+12	0.10000E+01	0.00000E+00
14	NO	O	N	O	O	0.11000E+18	0.00000E+00	0.75500E+05	0.56774E+13	0.10000E+01	0.00000E+00
15	NO	N	N	O	N	0.11000E+18	0.00000E+00	0.75500E+05	0.56774E+13	0.10000E+01	0.00000E+00
16	NO	N+	N	O	N+	0.11000E+18	0.00000E+00	0.75500E+05	0.56774E+13	0.10000E+01	0.00000E+00
17	NO	O+	N	O	O+	0.11000E+18	0.00000E+00	0.75500E+05	0.56774E+13	0.10000E+01	0.00000E+00
18	NO	N2+	N	O	N2+	0.50000E+16	0.00000E+00	0.75500E+05	0.25807E+12	0.10000E+01	0.00000E+00
19	NO	O2+	N	O	O2+	0.50000E+16	0.00000E+00	0.75500E+05	0.25807E+12	0.10000E+01	0.00000E+00
20	NO	NO+	N	O	NO+	0.50000E+16	0.00000E+00	0.75500E+05	0.25807E+12	0.10000E+01	0.00000E+00
21	N2	O2	N	N	O2	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.74287E+17	-0.60000E+00	0.00000E+00
22	N2	NO	N	N	NO	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.74287E+17	-0.60000E+00	0.00000E+00
23	N2	N2	N	N	N2	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.74287E+17	-0.60000E+00	0.00000E+00
24	N2	O	N	N	O	0.30000E+23	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.31837E+18	-0.60000E+00	0.00000E+00
25	N2	N	N	N	N	0.30000E+23	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.31837E+18	-0.60000E+00	0.00000E+00
26	N2	N+	N	N	N+	0.30000E+23	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.31837E+18	-0.60000E+00	0.00000E+00
27	N2	O+	N	N	O+	0.30000E+23	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.31837E+18	-0.60000E+00	0.00000E+00
28	N2	N2+	N	N	N2+	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.74287E+17	-0.60000E+00	0.00000E+00
29	N2	O2+	N	N	O2+	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.74287E+17	-0.60000E+00	0.00000E+00
30	N2	NO+	N	N	NO+	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.74287E+17	-0.60000E+00	0.00000E+00
31	N2	E-	N	N	E-	0.12000E+26	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.12735E+21	-0.60000E+00	0.00000E+00
32	N2	O	NO	N		0.64000E+18	-0.10000E+01	0.38400E+05	0.13159E+18	-0.10000E+01	0.49744E+03

33	NO	O	O2	N	0.84000E+13	0.00000E+00	0.19450E+05	0.32469E+14	0.00000E+00	0.34780E+04
34	N	O	NO+	E-	0.88000E+09	0.10000E+01	0.31900E+05	0.36997E+13	0.10000E+01	0.00000E+00
35	N	N	N2+	E-	0.44000E+08	0.15000E+01	0.67500E+05	0.48044E+11	0.15000E+01	0.00000E+00
36	O	O	O2+	E-	0.71000E+03	0.27000E+01	0.80600E+05	0.21358E+07	0.27000E+01	0.00000E+00
37	N	E-	N+	E- E-	0.25000E+35	-0.38200E+01	0.16860E+06	0.32819E+33	-0.28200E+01	0.00000E+00
38	O	E-	O+	E- E-	0.39000E+34	-0.37800E+01	0.15850E+06	0.20798E+33	-0.27800E+01	0.00000E+00
39	O	NO+	N+	O2	0.10000E+13	0.50000E+00	0.77200E+05	0.23385E+12	0.50000E+00	0.00000E+00
40	N	O2+	N+	O2	0.87000E+14	0.14000E+00	0.28600E+05	0.28434E+14	0.14000E+00	0.00000E+00
41	NO	O+	N+	O2	0.14000E+06	0.19000E+01	0.26600E+05	0.13322E+06	0.19000E+01	0.00000E+00
42	N2	O2+	N2+	O2	0.99000E+13	0.00000E+00	0.40700E+05	0.28561E+13	0.00000E+00	0.00000E+00
43	O	O2+	O+	O2	0.40000E+13	-0.90000E-01	0.18000E+05	0.53106E+13	-0.90000E-01	0.00000E+00
44	N	NO+	O+	N2	0.34000E+14	-0.10800E+01	0.12800E+05	0.40638E+14	-0.10800E+01	0.00000E+00
45	O2	NO+	O2+	NO	0.24000E+14	0.41000E+00	0.32600E+05	0.44426E+13	0.41000E+00	0.00000E+00
46	O	NO+	O2+	N	0.72000E+13	0.29000E+00	0.48600E+05	0.51518E+13	0.29000E+00	0.00000E+00
47	N2	O+	N2+	O	0.91000E+12	0.36000E+00	0.22800E+05	0.19774E+12	0.36000E+00	0.59851E+03
48	N	NO+	N2+	O	0.72000E+14	0.00000E+00	0.35500E+05	0.18700E+14	0.00000E+00	0.00000E+00

Таблица П.2

Кинетическая модель с участием возбужденных электронных состояний двухатомных молекул

No.	====-.....:.....				$A_f$	$n_f$	$E_f$	$A_r$	$n_r$	$E_r$
01	N2	N2	N2A	N2	7.01100E+12	0.00000E+00	0.72294E+05	7.01100E+12	0.00000E+00	0.00000E+00
02	N2	E-	N2A	E-	1.50000E+15	0.00000E+00	0.71600E+05	1.50000E+14	0.00000E+00	0.00000E+00
03	N2	E-	N2B	E-	1.80000E+13	0.50000E+00	0.85800E+05	1.80000E+12	0.50000E+00	0.00000E+00
04	N2	E-	N2C	E-	2.10000E+14	0.50000E+00	0.12820E+06	2.70000E+14	0.50000E+00	0.00000E+00
05	N2	E-	N2D	E-	0.23900E+14	0.50000E+00	0.10357E+06	0.23900E+14	0.50000E+00	0.00000E+00
06	N2	E-	N2b1	E-	0.12600E+13	0.30600E+00	0.10450E+06	0.12600E+13	0.30600E+00	0.00000E+00
07	N2	E-	N2b2	E-	0.16300E+13	0.30400E+00	0.10168E+06	0.16300E+13	0.30400E+00	0.00000E+00
08	N2A	N2	N2	N2	2.64968D+07	0.00000D+00	0.00000E+00	2.64968D+07	0.00000D+00	72294.
09	N2A	O2	N2	O2	1.68616D+12	0.00000D+00	0.00000E+00	1.68616D+12	0.00000D+00	72294.
10	N2A	NO	N2	NO	2.38471D+13	0.00000D+00	0.00000E+00	2.38471D+13	0.00000D+00	72294.
11	N2A	N2	N	N N2	6.00000E+18	-1.00000E+00	0.41000E+05	3.00000E+16	-0.50000E+00	0.00000E+00
12	N2A	NO	NOA	N2	4.00000E+13	0.00000E+00	0.00000E+00	8.00000E+14	0.00000E+00	0.80000E+04
13	N2A	E-	N2B	E-	1.50000E+13	0.50000E+00	0.13600E+05	1.00000E+13	0.50000E+00	0.00000E+00
14	N2A	N	N2	N	8.91256D+12	0.00000D+00	0.00000E+00	8.91256D+12	0.00000D+00	72294.
15	N2A	O	N2	O	6.62420D+12	0.00000D+00	0.00000E+00	6.62420D+12	0.00000D+00	72294.
16	N2A		N2	Phot	9.55000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
17	N2B	N	N2A	N	5.54024D+13	0.00000D+00	0.00000E+00	5.54024D+13	0.00000D+00	13557.
18	N2B	O	N2A	O	4.71852D+13	0.00000D+00	0.00000E+00	4.71852D+13	0.00000D+00	13557.

19	N2B	N2	N2A	N2	5.55228D+12	0.00000D+00	0.00000E+00	5.55228D+12	0.00000D+00	13557.
20	N2B	O2	N2A	O2	8.55124D+12	0.00000D+00	0.00000E+00	8.55124D+12	0.00000D+00	13557.
21	N2B	NO	N2A	NO	1.19235D+14	0.00000D+00	0.00000E+00	1.19235D+14	0.00000D+00	13557.
22	N2B		N2A	Phot	0.35900E+07	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
23	N2B	E-	N2C	E-	0.11100E+17	0.03190E+00	0.29518E+05	0.11100E+17	0.03190E+00	0.00000E+00
24	N2B	E-	N2D	E-	0.61300E+15	0.13100E+00	0.44028E+05	0.61300E+15	0.13100E+00	0.00000E+00
25	N2C		N2B	Phot	0.13400E+09	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
26	N2C	N2	N2A	N2B	2.60000E+15	0.00000E+00	0.30000E+05	3.00000E+14	0.00000E+00	0.00000E+00
27	N2D		N2B	Phot	0.70700E+08	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
28	N2b1		N2	Phot	0.42600E+11	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
29	N2b2		N2	Phot	0.51600E+09	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
30	N2+	E-	N2+A	E-	1.30000E+14	0.50000E+00	0.13200E+05	6.50000E+13	0.50000E+00	0.00000E+00
31	N2+	E-	N2+B	E-	3.80000E+14	0.50000E+00	0.36600E+05	3.80000E+14	0.50000E+00	0.00000E+00
32	N2+	E-	N2+C	E-	0.15100E+13	0.22900E+00	0.64608E+05	0.15100E+13	0.22900E+00	0.00000E+00
33	N2+	N2	N2+A	N2	1.81100E+06	0.00000E+00	0.13200E+05	1.81100E+06	0.00000E+00	0.00000E+00
34	N2+A		N2+	Phot	0.29900E+07	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
35	N2+A	E-	N2+B	E-	2.60000E+14	0.50000E+00	0.23430E+05	5.20000E+14	0.50000E+00	0.00000E+00
36	N2+B		N2+	Phot	0.17900E+09	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
37	N2+B	N	N2+	N	4.93804D+14	0.00000D+00	0.00000E+00	4.93804D+14	0.00000D+00	33501.
38	N2+B	O	N2+	O	4.93804D+14	0.00000D+00	0.00000E+00	4.93804D+14	0.00000D+00	33501.
39	N2+B	N2	N2+	N2	4.93804D+14	0.00000D+00	0.00000E+00	4.93804D+14	0.00000D+00	33501.
40	N2+B	O2	N2+	O2	4.93804D+14	0.00000D+00	0.00000E+00	4.93804D+14	0.00000D+00	33501.
41	N2+B	NO	N2+	NO	4.93804D+14	0.00000D+00	0.00000E+00	4.93804D+14	0.00000D+00	33501.
42	N2+C		N2+	Phot	0.24200E+09	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
43	NO	N2	NOB	N2	1.00000E+12	0.00000E+00	0.66400E+05	3.00000E+11	0.00000E+00	0.00000E+00
44	NO	N2	NOC	N2	7.56000E+12	0.50000E+00	0.75000E+05	7.56000E+12	0.50000E+00	0.00000E+00
45	NO	N2	NOD	N2	7.56000E+12	0.50000E+00	0.76400E+05	1.51000E+13	0.50000E+00	0.00000E+00
46	NO	O2	NOA	O2	1.70000E+13	0.00000E+00	0.63500E+05	5.00000E+13	0.00000E+00	0.00000E+00
47	NO	O2	NOB	O2	2.70000E+13	-0.50000E+00	0.65400E+05	1.30000E+13	-0.50000E+00	0.00000E+00
48	NO	NO	NOA	NO	2.00000E+14	0.50000E+00	0.63500E+05	9.00000E+12	0.50000E+00	0.00000E+00
49	NO	NO	NOB	NO	7.00000E+15	-0.50000E+00	0.65400E+05	2.50000E+15	-0.50000E+00	0.00000E+00
50	NO	O	NOA	O	3.00000E+13	0.00000E+00	0.63500E+05	1.00000E+14	0.00000E+00	0.00000E+00
51	NO	O	NOB	O	5.40000E+11	0.50000E+00	0.65400E+05	2.00000E+12	0.50000E+00	0.00000E+00
52	NO	E-	NOA	E-	7.40000E+12	0.50000E+00	0.63500E+05	2.10000E+12	0.50000E+00	0.00000E+00
53	NO	E-	NOB	E-	2.40000E+12	0.50000E+00	0.65700E+05	8.80000E+11	0.50000E+00	0.00000E+00
54	NO	E-	NOC	E-	7.20000E+13	0.50000E+00	0.75000E+05	7.20000E+13	0.50000E+00	0.00000E+00
55	NO	E-	NOD	E-	7.20000E+13	0.50000E+00	0.76400E+05	1.44000E+13	0.50000E+00	0.00000E+00
56	NOA	N	NO	N	9.51476D+10	0.00000D+00	0.00000E+00	9.51476D+10	0.00000D+00	63222.
57	NOA	N2	NO	N2	9.51476D+10	0.00000D+00	0.00000E+00	9.51476D+10	0.00000D+00	63222.

58	NOA	E-		NOB	E-	4.40000E+12	0.50000E+00	0.00000E+00	8.80000E+11	0.50000E+00	0.00000E+00
59	NOA			NO	Phot	0.46000E+08	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
60	NOA	E-		NOC	E-	1.64000E+17	-0.80000E+00	0.15550E+05	1.64000E+17	-0.80000E+00	0.36350E+04
61	NOB			NO	Phot	0.86100E+08	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
62	NOB	E-		NOC	E-	3.98000E+15	-0.65000E+00	0.13463E+05	3.98000E+15	-0.65000E+00	0.43760E+04
63	NOC	N		NOA	N	1.38506D+15	0.00000D+00	0.00000E+00	1.38506D+15	0.00000D+00	11915.
64	NOC	O		NOA	O	1.38506D+15	0.00000D+00	0.00000E+00	1.38506D+15	0.00000D+00	11915.
65	NOC	N2		NOA	N2	1.98726D+15	0.00000D+00	0.00000E+00	1.98726D+15	0.00000D+00	11915.
66	NOC	O2		NOA	O2	1.38506D+15	0.00000D+00	0.00000E+00	1.38506D+15	0.00000D+00	11915.
67	NOC	NO		NOA	NO	7.82860D+14	0.00000D+00	0.00000E+00	7.82860D+14	0.00000D+00	11915.
68	NOC			NO	Phot	0.96300E+08	0.00000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
69	O2	E-		O2B	E-	2.00000E+14	0.50000E+00	0.71000E+05	2.60000E+14	0.50000E+00	0.00000E+00
70	O	O		O2B		4.30000E+06	0.00000E+00	0.14500E+05	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
71	N	N	N2	N2B	N2	4.90000E+07	-0.35000E+00	0.00000E+00	1.00000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00
72	N	O		NOA		5.23000E+07	-0.35000E+00	0.00000E+00	5.23000E+07	-0.35000E+00	0.00000E+00
73	N	O		NOB		3.02200E+07	-0.35000E+00	0.00000E+00	3.02200E+07	-0.35000E+00	0.00000E+00

=====