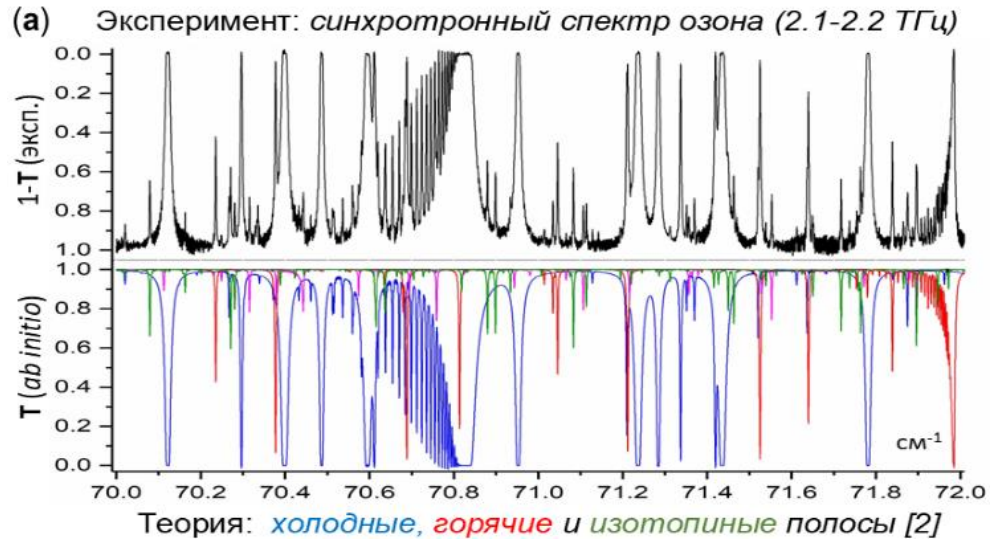


В. Тютерев, Е. Старикова, С. Михайленко, С. Ташкун, С. Васильченко

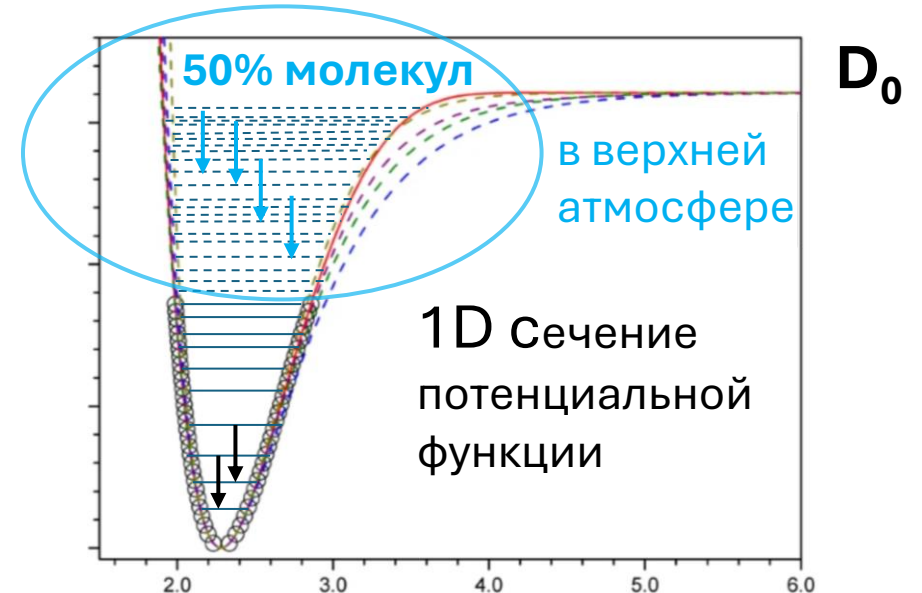
ИОА СО РАН



**Абсолютные интенсивности линий:** Впервые проведены *ab initio* расчеты с точностью **лучше 1 %** для сильных полос в терагерцовых и инфракрасных спектрах озона.

V.Tyuterev, A.Barbe, L.Manceron, B.Grouiez, S.Tashkun, et al. Spectrochim. Acta A: **305**, 123456, 2024;

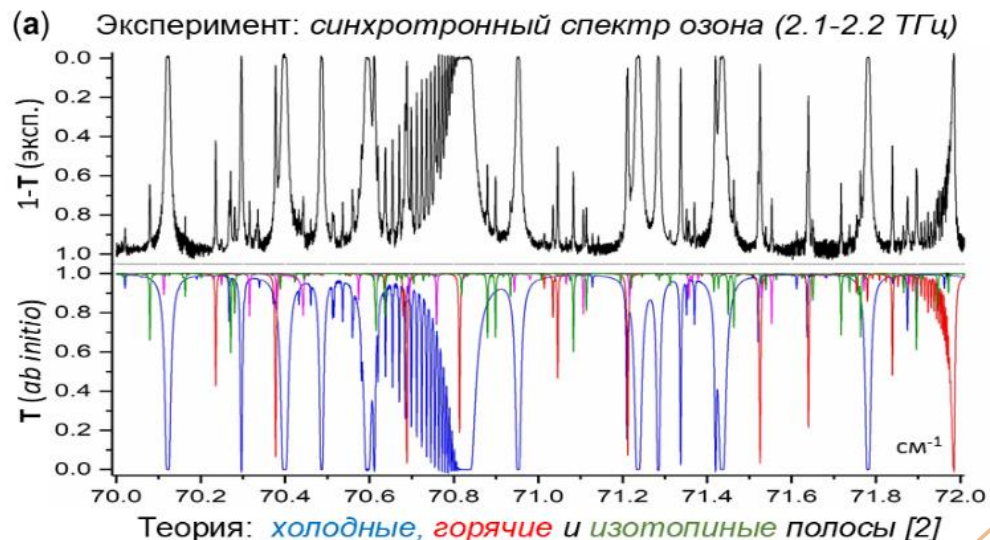
**Квантовые переходы и уровни энергии:** Впервые получен наиболее полный и точный набор 28572 уровней энергии  $^{16}\text{O}_3$  до **96,7% порога диссоциации  $D_0$**  <= из оригинальных анализов по 78290 линиям в экспериментальных спектрах



S.Tashkun, A.Barbe, S.Mikhailenko, E.Starikova, V.Tyuterev. J.Phys.Chem.Ref.Data,**53** ,043101 (December 2024);

В. Тютерев, Е. Старикова, С. Михайленко, С. Ташкун, С. Васильченко

ИОА СО РАН



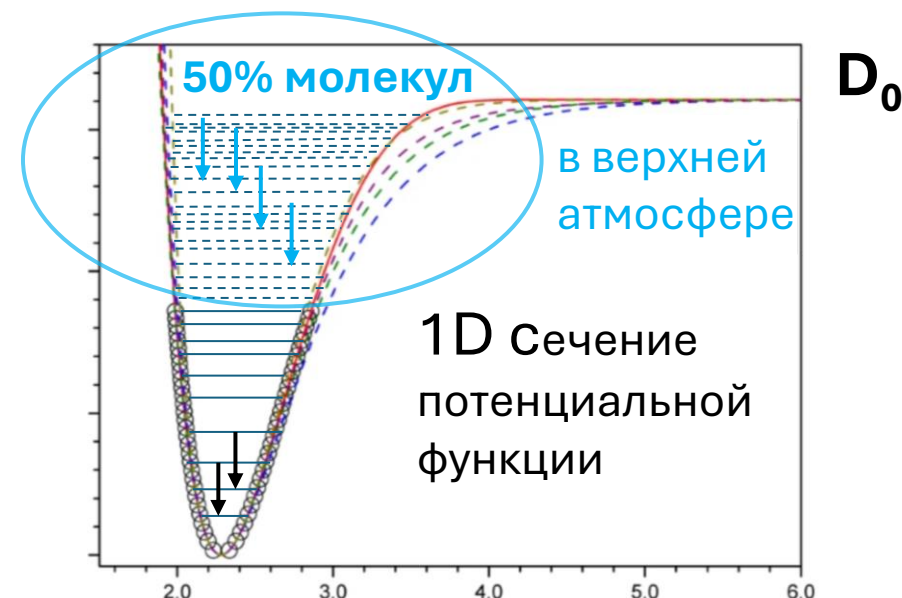
Приложения:

Спектральный анализ глобального 3D спутникового зондирования  $O_3$

**Абсолютные интенсивности линий:** Впервые проведены *ab initio* расчеты с точностью **лучше 1 %** для сильных полос в терагерцовых и инфракрасных спектрах озона.

V.Tyuterev, A.Barbe, L.Manceron, B.Grouiez, S.Tashkun, et al. Spectrochim. Acta A: 305, 123456, 2024;

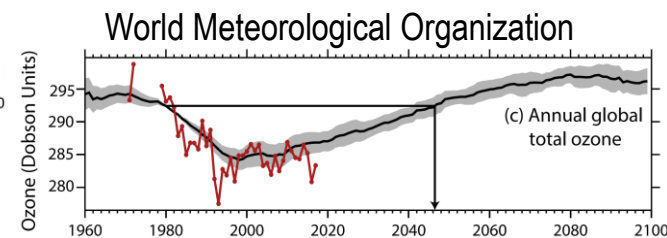
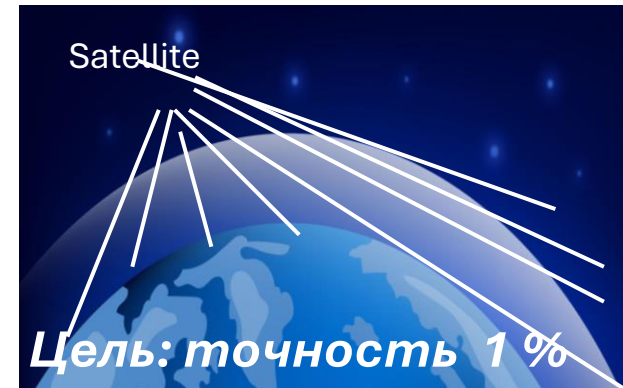
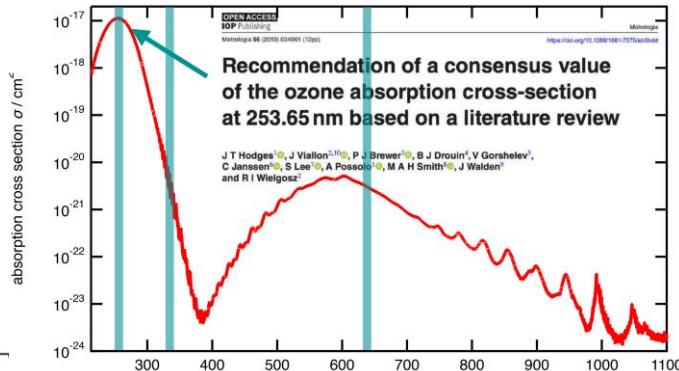
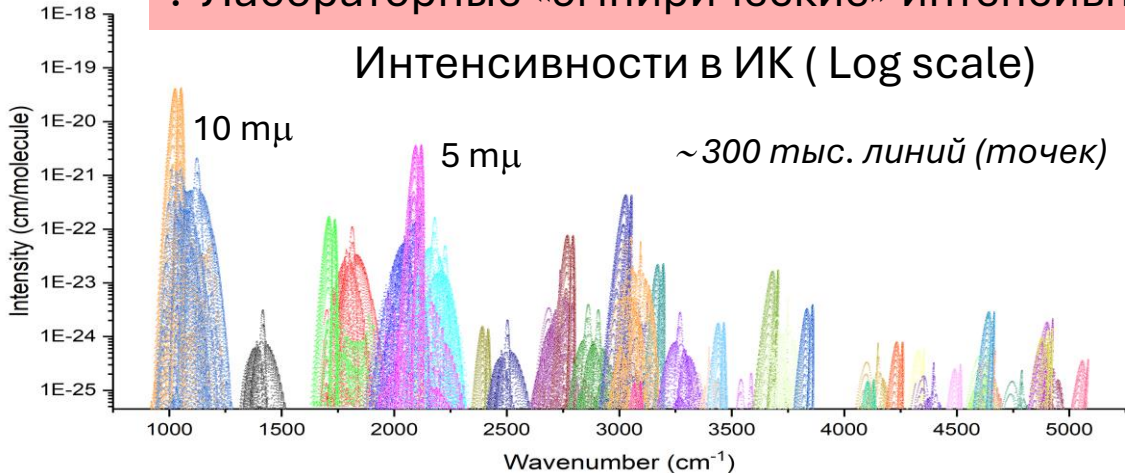
**Квантовые переходы и уровни энергии:** Впервые получен наиболее полный и точный набор 28572 уровней энергии  $^{16}O_3$  до **96,7% порога диссоциации  $D_0$**  <= из оригинальных анализов по 78290 линиям в экспериментальных спектрах



S.Tashkun, A.Barbe, S.Mikhailenko, E.Starikova, V.Tyuterev. J.Phys.Chem.Ref.Data,53 ,043101 (December 2024);

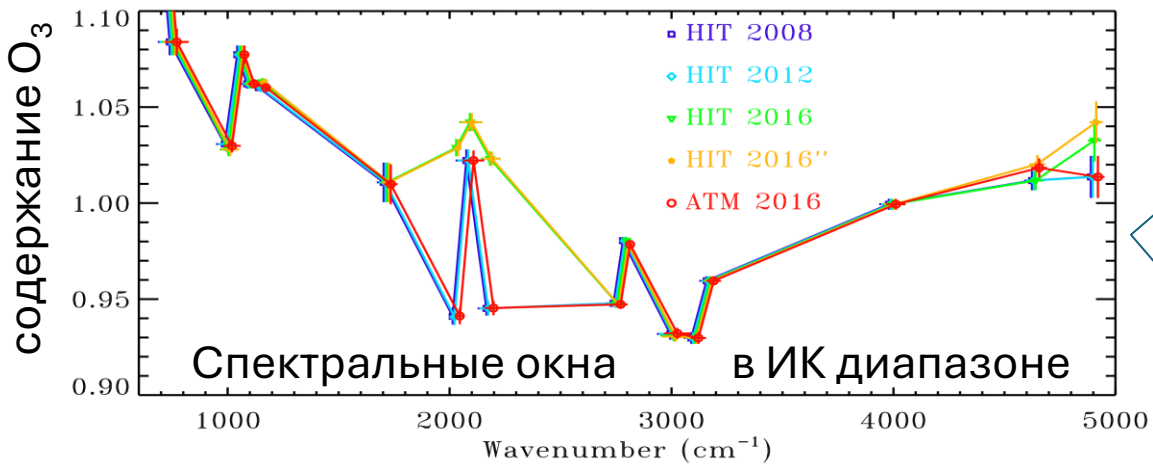
# Проблема само-согласованности спектрального зондирования озона в ТГц, ИК, УФ диапазонах

**! Лабораторные «эмпирические» интенсивности полос не абсолютны !**



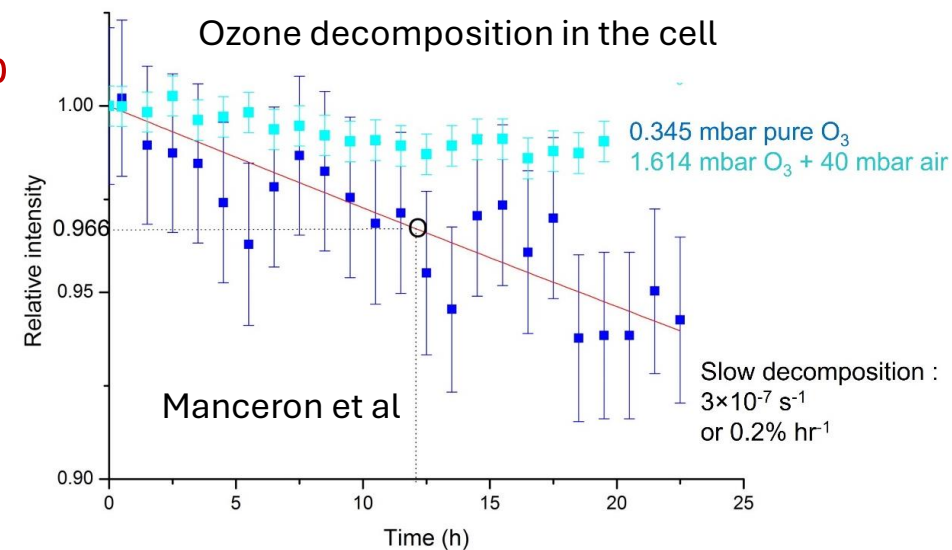
Разброс определения концентрации озона ~ 5-15%

УФ диапазон (нм)



разброс ИК / УФ ~ 4%

Ozone decomposition in the cell

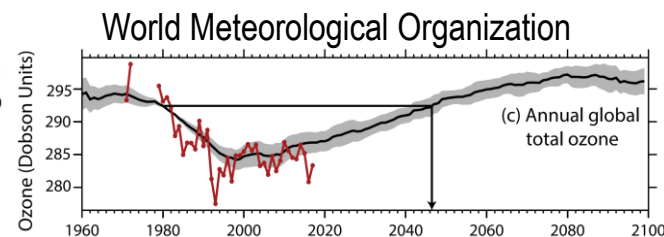
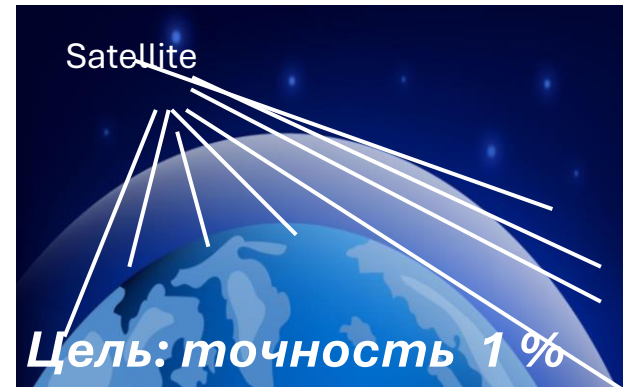
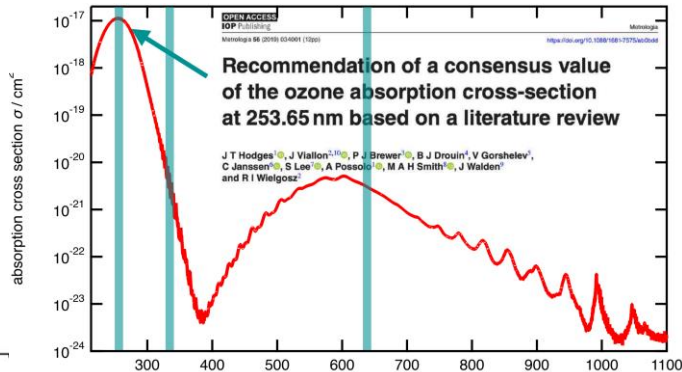
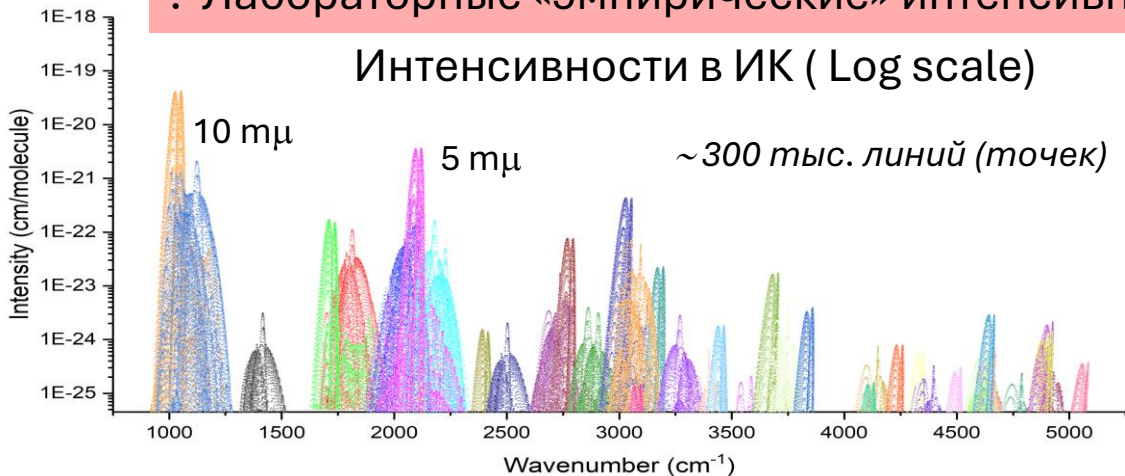


$I_{nm}$  => из баз HITRAN (Harvard) ATMOS (NASA)

Валидация: Cal. Tech. @ JPL NASA (G.Toon, 2016)

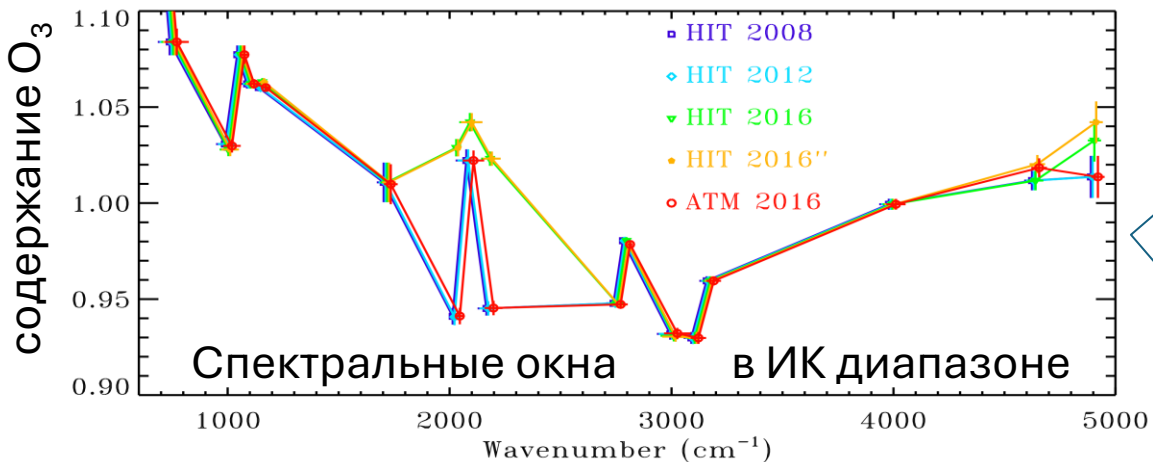
# Проблема само-согласованности спектрального зондирования озона в ТГц, ИК, УФ диапазонах

**! Лабораторные «эмпирические» интенсивности полос не абсолютны !**



Разброс определения концентрации озона ~ **5-15%**

УФ диапазон (нм)



разброс ИК / УФ ~ **4%**

**Европейский проект ESA :**  
 Новые метрологически точные лабораторные измерения в 5 и 10 мкм  
 German Aerospace Center (DLR): Birk, Wagner  
 CNRS France : Janssen, Barbe

**проект NASA (USA):**  
 измерения в THz и 10 мкм ( JPL, Drouin)

$I_{nm}$  => из баз HITRAN( Harvard) ATMOS (NASA)

Валидация : Cal. Tech. @ JPL NASA (G.Toon, 2016)

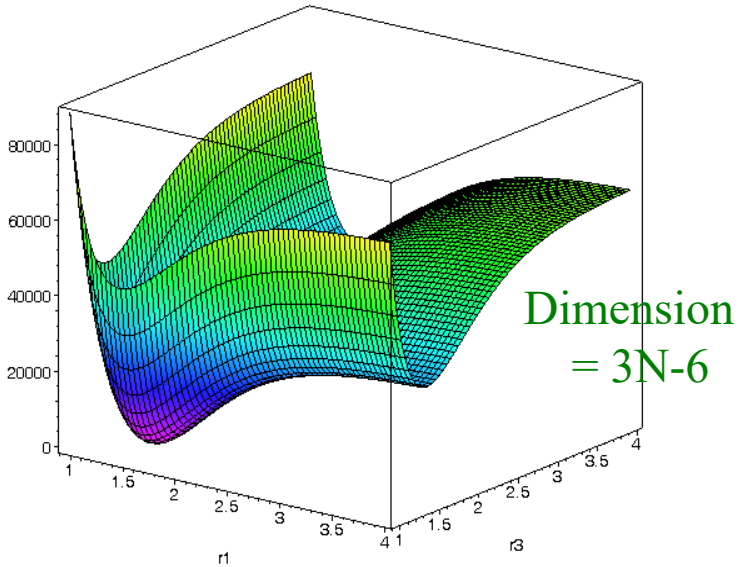
# Fundamental constants ( $c, e, m_e, m_p, h$ ) in *ab initio* calculations

(infinite basis set convergence, electron correlations, relativistic effects, BO-corrections, non-adiabatic interactions, spin-orbit interactions ...)

Quantum nuclear motion

matrix dimension  
 $= (3N-3) \cdot \infty$

Hamiltonian, variational methods



Potential energy surfaces (PES)  
+ kinetic energy

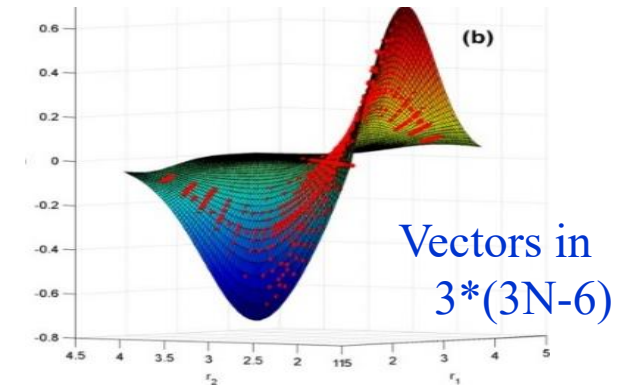
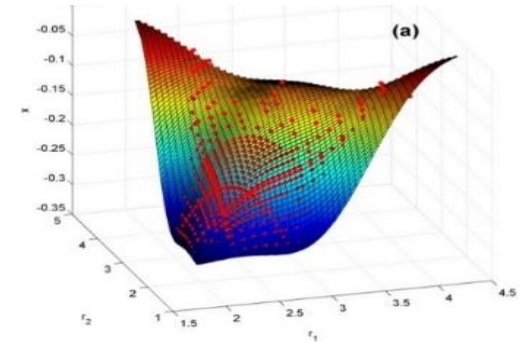
Energy levels + wavefunctions

Line positions

Radiative Einstein coefficients

Line intensities

Transition probabilities



Dipole moment surfaces (DMS)

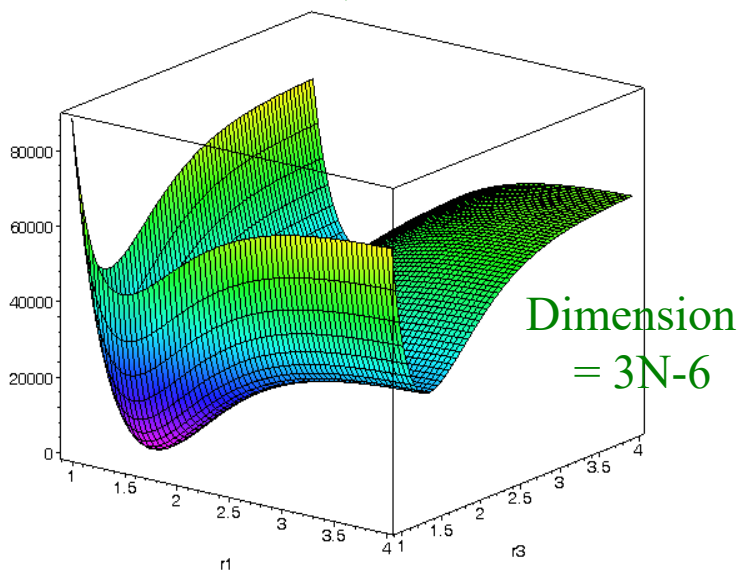
# Fundamental constants ( $c, e, m_e, m_p, h$ ) in *ab initio* spectra calculations

(infinite basis set convergence, electron correlations, relativistic effects, BO-corrections, non-adiabatic interactions, spin-orbit interactions ...)

Quantum nuclear motion

matrix  
dimension  
 $= (3N-3) \cdot \infty$

Hamiltonian, variational methods



Potential energy surfaces (PES)  
+ kinetic energy

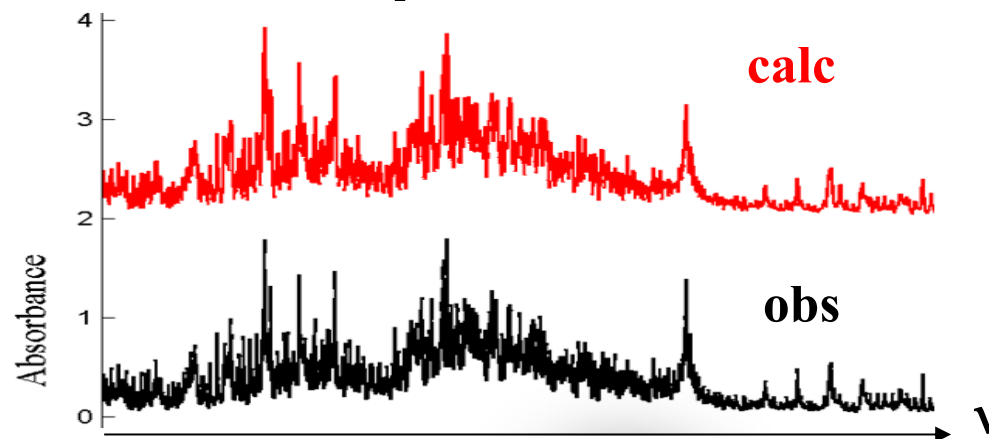
Energy levels + wavefunctions

Line positions

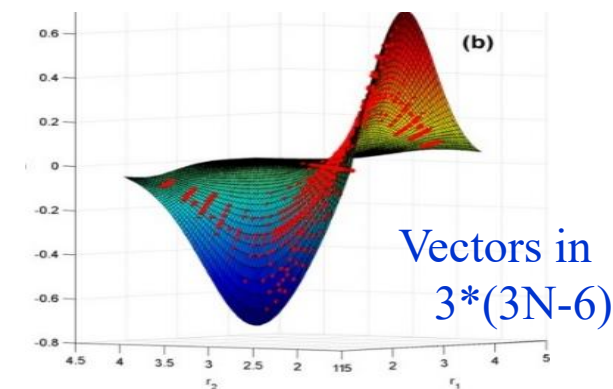
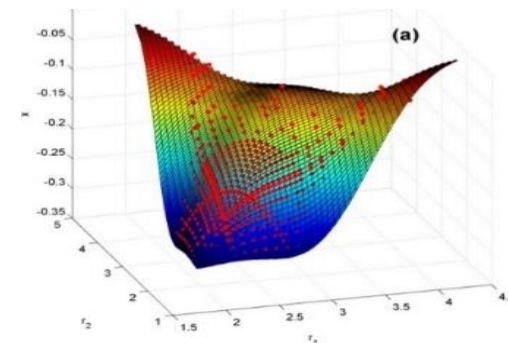
Radiative Einstein coefficients

Line intensities

spectra



Transition probabilities



Dipole moment  
surfaces (DMS)

# Ab initio



fundamental constants ( $c, e, m_e, m_p, h$ )



квантовая теория электронно-ядерной структуры молекулы

$E_{vJKaKc}$

Потенциалы, энергии, волновые функции движения ядер в поле электронов

функции дипольных моментов

Радиационные коэф. Эйнштейна

**ИНТЕНСИВНОСТИ ЛИНИЙ**

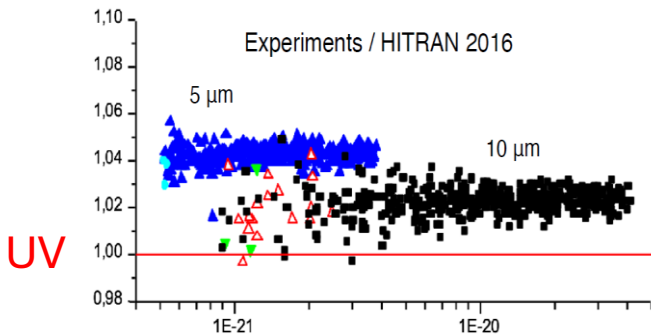
$\Delta$  HIT16: ~ 3-4% strong  
~ 5-15% weak bands

## Сравнение с метрологически точными ESA экспериментами:

V. Tyuterev, A. Barbe, D. Jacquemart, C. Janssen, S. Mikhailenko, E. Starikova

*Ab initio* predictions and laboratory validation for consistent ozone intensities in the MW, 10 and 5  $\mu\text{m}$  ranges *J. Chem. Physics*, 150 (18), 184303

Интенсивности линий в базе HITRAN до начала проекта



Эксперимент: Janssen et al (CNRS)

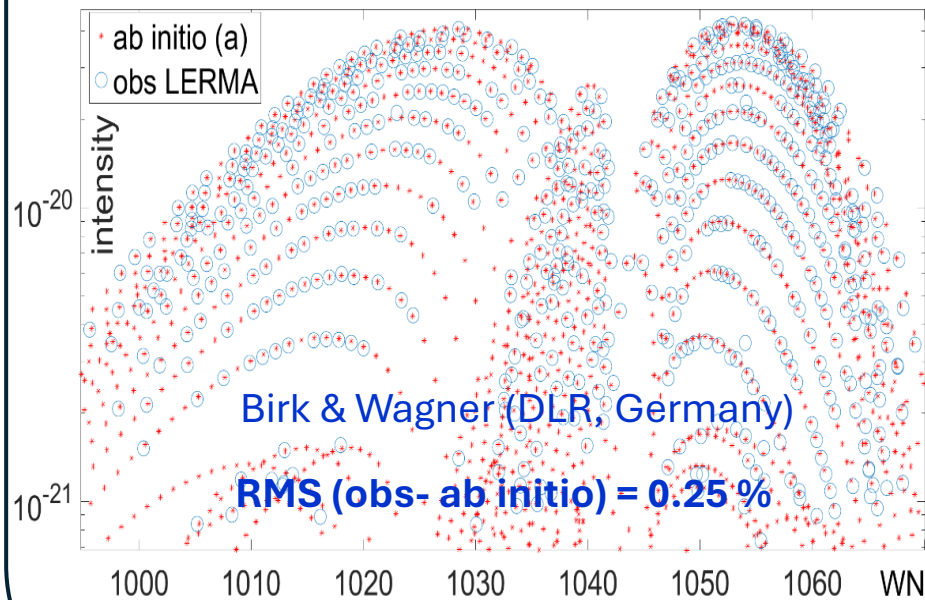
После наших совместных работ

**ИК / УФ  $\leq 1\%$**

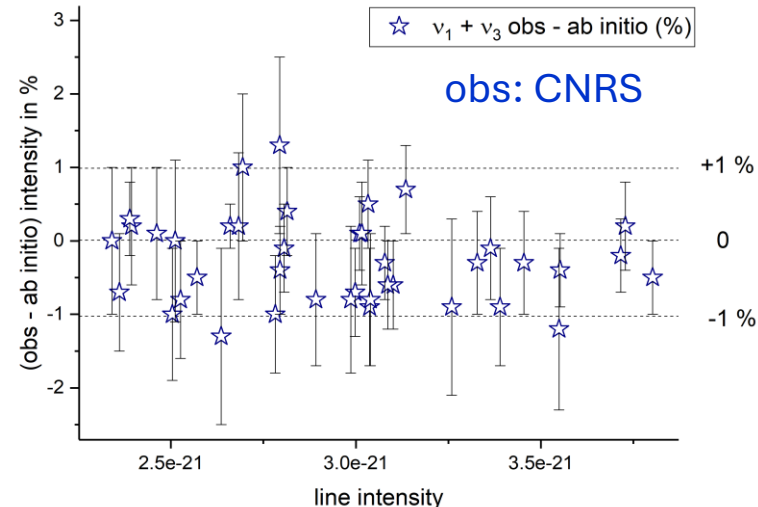
## После наших *ab initio* расчетов и публикаций

Tyuterev V, Barbe B, Mikhailenko S, Starikova E, Babikov Y. Towards the intensity consistency of the ozone bands in the infrared range: *ab initio* corrections to the S&MPO database. *JQSRT* 272, 107801

Barbe, A., Mikhailenko, S., Starikova, E., Tyuterev, V High resolution infrared spectroscopy in support of ozone atmospheric monitoring and validation of the potential energy function // *Molecules*, 27, 911.



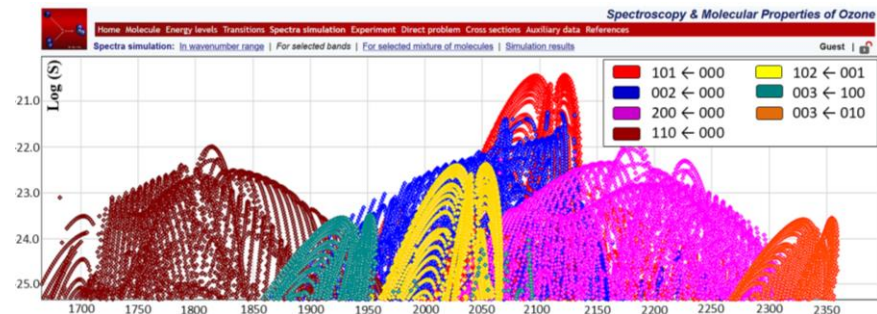
диапазон 10  $\mu\text{m}$



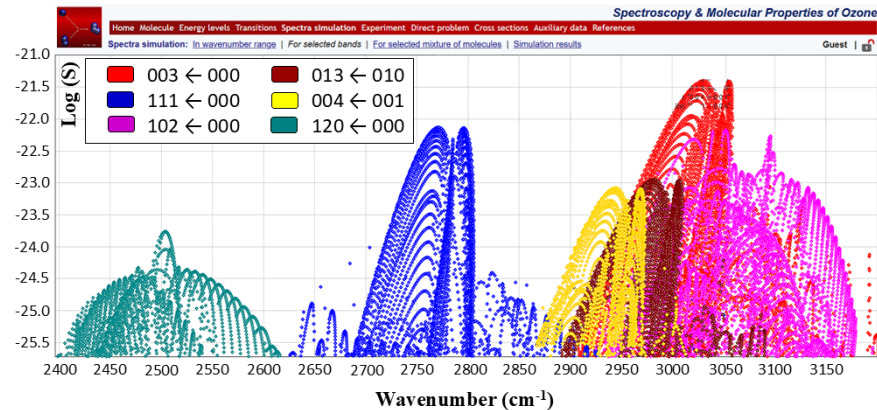
**RMS (obs- ab initio) = 0.6 %**

диапазон 5  $\mu\text{m}$

# Информационная система S&MPO = Spectroscopy & Molecular Properties of Ozone (<http://smpo.iao.ru>)

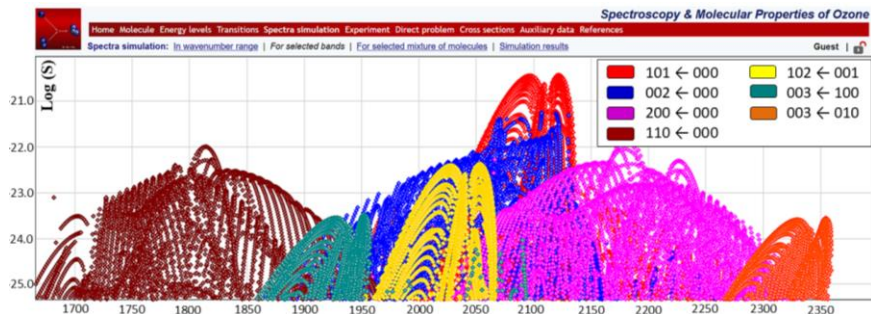


*Ab initio* коррекции 114359 интенсивностей линий 40 полос

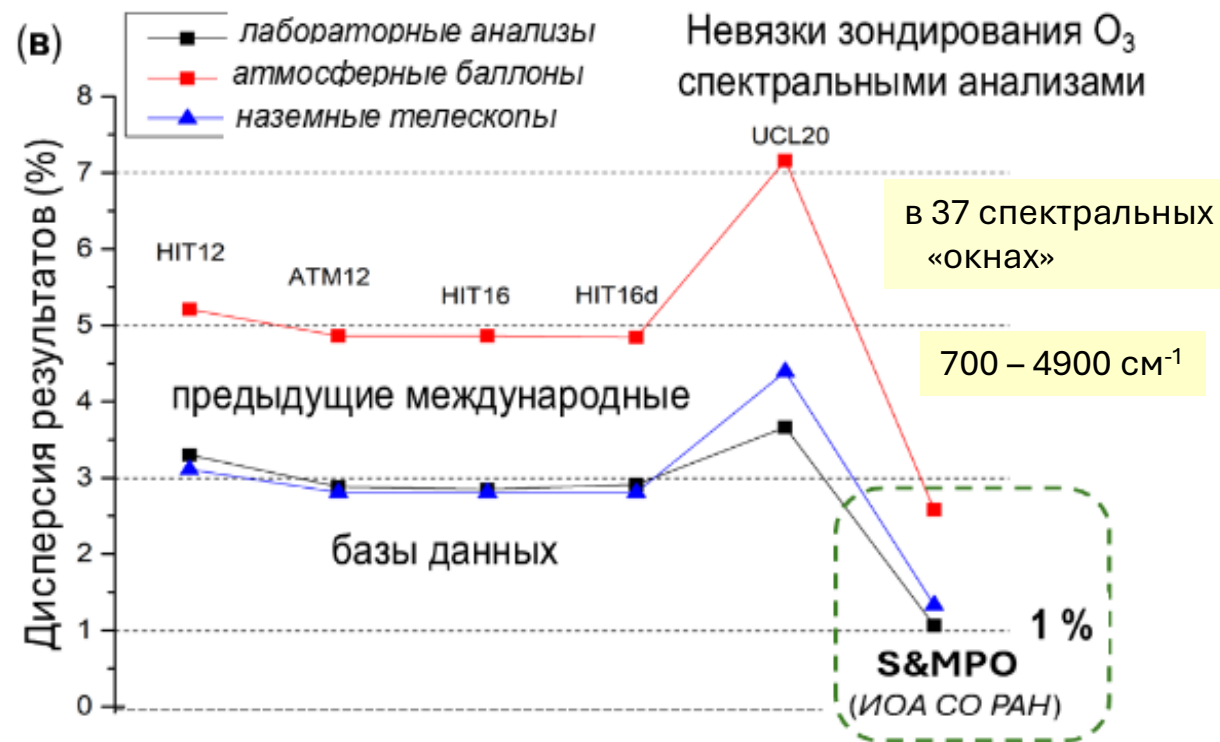
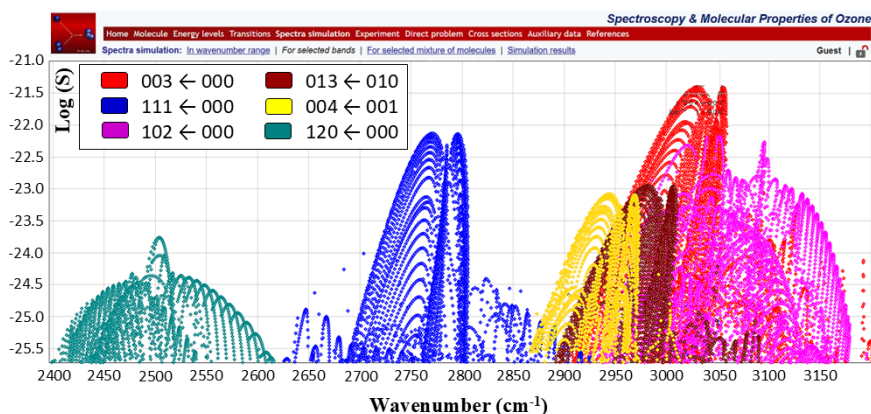


Tyuterev V, Barbe B, Mikhailenko S, Starikova E, Babikov Y. Towards the intensity consistency of the ozone bands in the infrared range: ***ab initio* corrections to the S&MPO database**. JQSRT, 272, 107801

# Информационная система S&MPO = Spectroscopy & Molecular Properties of Ozone (<http://smpo.iao.ru>)



*Ab initio* коррекции 114359 интенсивностей линий 40 полос

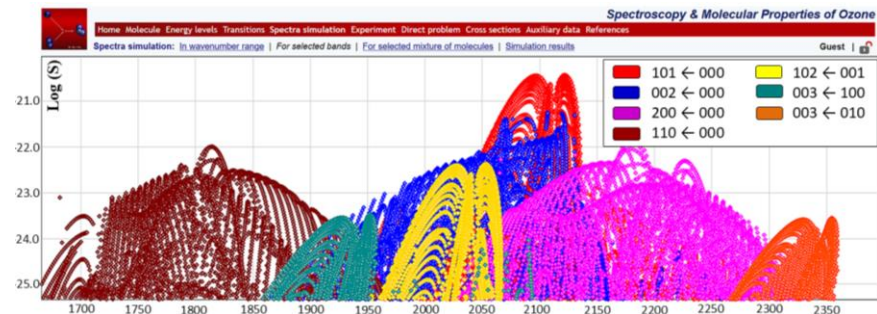


Tyuterev V, Barbe B, Mikhailenko S, Starikova E, Babikov Y. Towards the intensity consistency of the ozone bands in the infrared range: ***ab initio* corrections to the S&MPO database**. JQSRT, 272, 107801

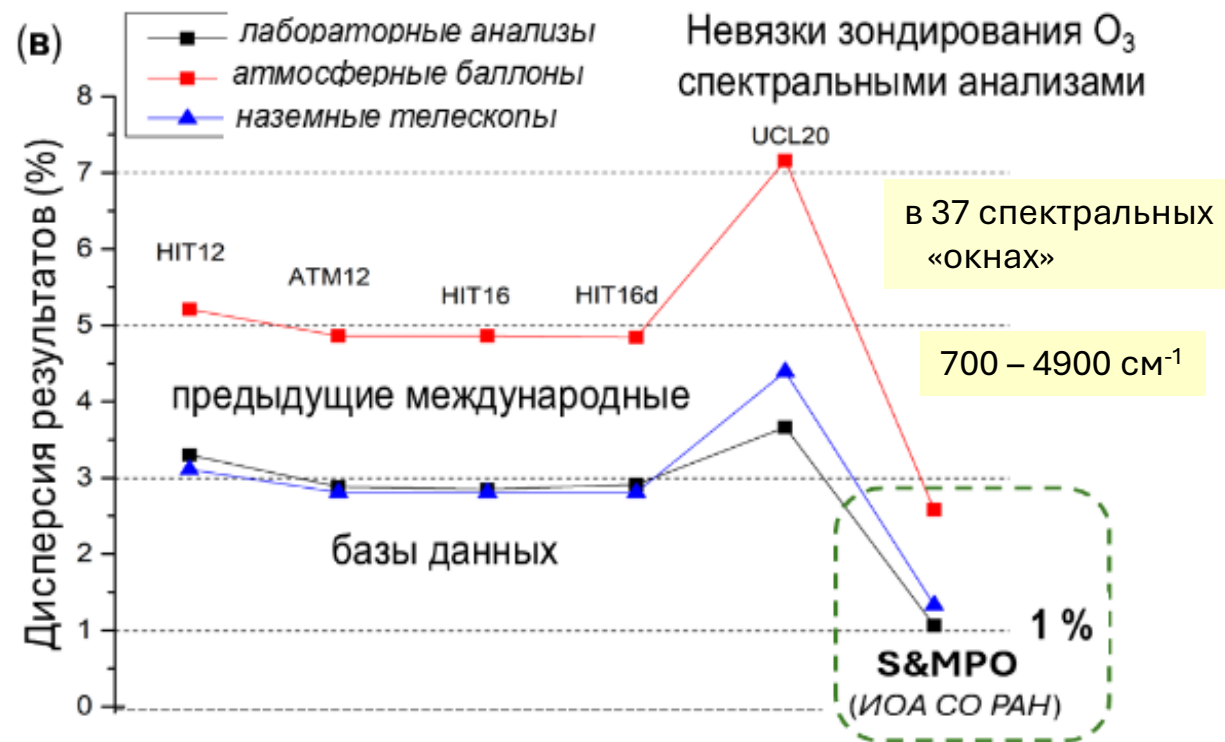
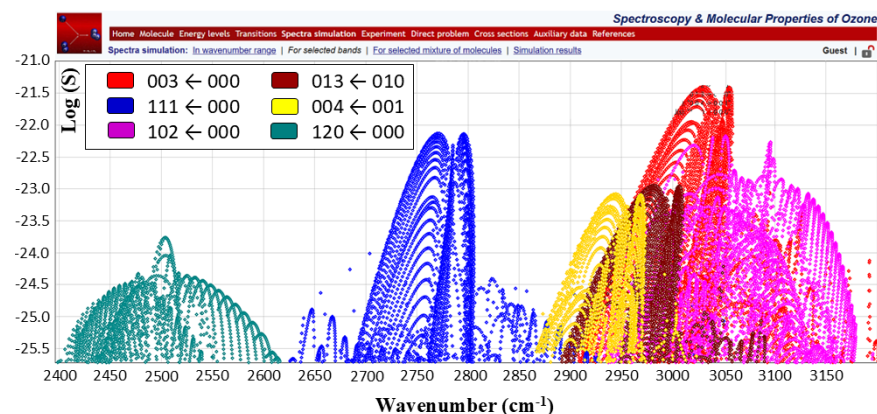
**Валидация : (G.Toon) Cal. Tech. @ JPL NASA**

Наша ***ab initio*** калибровка баз данных S&MPO (ИОА) и HITRAN (Harvard) позволила **решить проблему само-согласованности определения концентраций озона** в 37 спектральных интервалах вплоть до 4900 см<sup>-1</sup>: разногласия уменьшены в 2.7 раза, 1.9 раза и в 2.1 раза для лабораторных, баллонных и наземных измерений телескопами.

# Информационная система S&MPO = Spectroscopy & Molecular Properties of Ozone (<http://smpo.iao.ru>)



*Ab initio* коррекции 114359 интенсивностей линий 40 полос



Tyuterev V, Barbe B, Mikhailenko S, Starikova E, Babikov Y. Towards the intensity consistency of the ozone bands in the infrared range: *ab initio* corrections to the S&MPO database. JQSRT, 272, 107801

Валидация : (G.Toon) Cal. Tech. @ JPL NASA

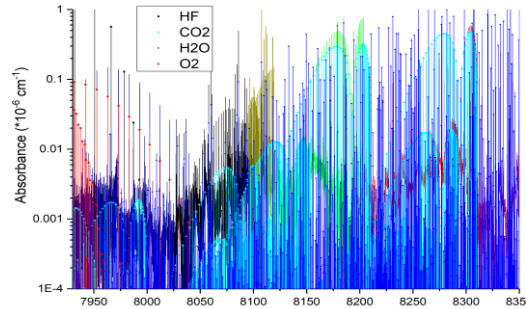
Наша *ab initio* калибровка баз данных S&MPO (ИОА) и HITRAN (Harvard) позволила **решить проблему само-согласованности определения концентраций озона** в 37 спектральных интервалах вплоть до 4900  $\text{cm}^{-1}$ : разногласия уменьшены в 2.7 раза, 1.9 раза и в 2.1 раза для лабораторных, баллонных и наземных измерений телескопами. **( + совместимость < 1% с УФ ! )**

# Уровни энергии до диссоциации

S. Vasilchenko, A. Barbe, E. Starikova,  
S. Kassi, D. Mondelain, A. Campargue,  
V. Tyuterev,

Detection and assignment of ozone bands near 95% of the dissociation threshold:  
Ultrasensitive experiments for probing potential energy function and vibrational dynamics

*Physical Review A*, 102 (5), art. no. 052804,



Спектры 96 источников: МВ, Фурье, с синхротронным излучением + 2 типа CRDS лазерных

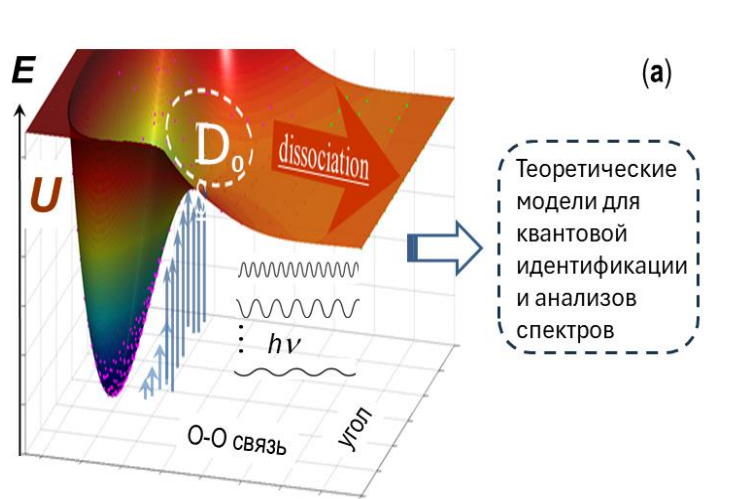
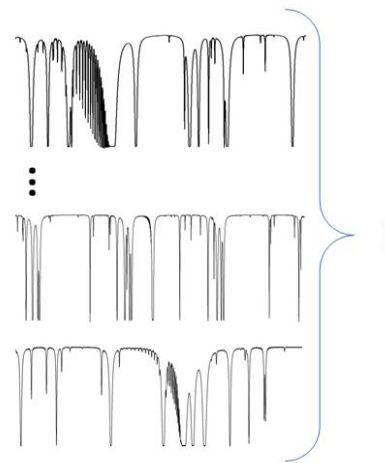
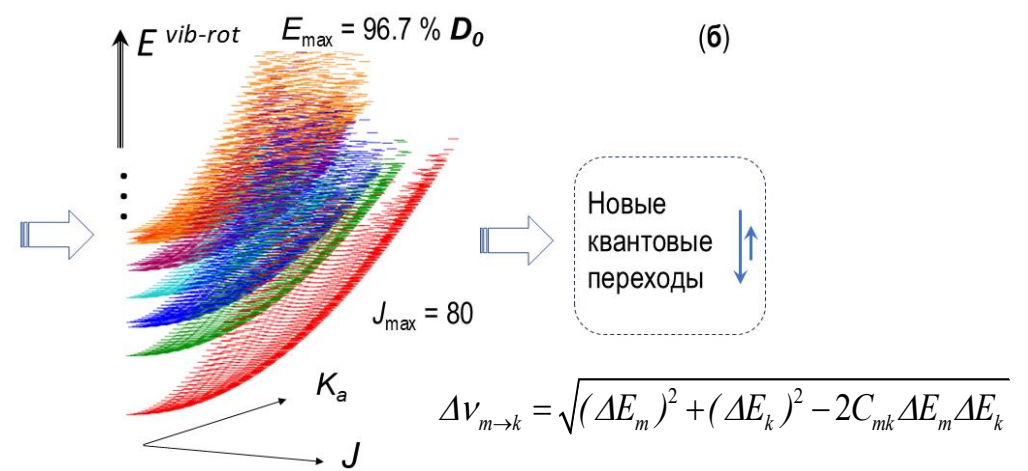


Схема экспериментов по регистрации спектров во всем энергетическом диапазоне потенциальной функции  $U$  до  $D_0$



$h\nu$ : 75290 линий во всех экспериментальных спектрах с учетом индивидуальных  $(\delta\nu)$



28572 уровней энергии,  $(\delta E)$  и их зависимости от квантовых чисел  $(v_1, v_2, v_3; J, K_a)$

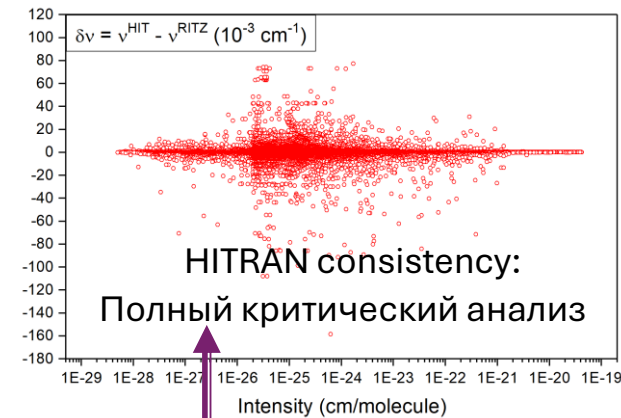
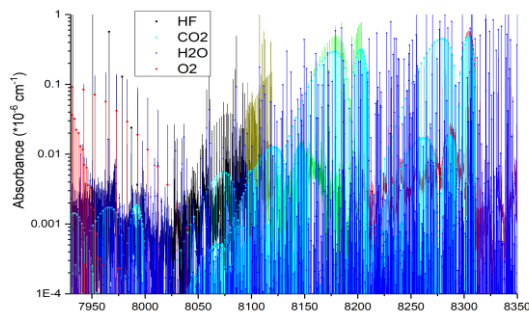
предсказания с учетом корреляций и доверительных  $(\delta\nu)$

# Уровни энергии до диссоциации

**S. Vasilchenko, A. Barbe, E. Starikova, S. Kassi, D. Mondelain, A. Campargue, V. Tyuterev,**

Detection and assignment of ozone bands near 95% of the dissociation threshold: ultrasensitive experiments for probing potential energy function and vibrational dynamics

*Physical Review A*, 102 (5), art. no. 052804,



Спектры 96 источников: МВ, Фурье, с синхротронным излучением + 2 типа CRDS лазерных

**S. Tashkun, A. Barbe, S. Mikhailenko, E. Starikova, V. Tyuterev,**

Complete RITZ set of rovibrational energy levels of 16O3 deduced from experimental spectra: critical analysis of transition frequencies in spectroscopic databases // *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 53, 043101

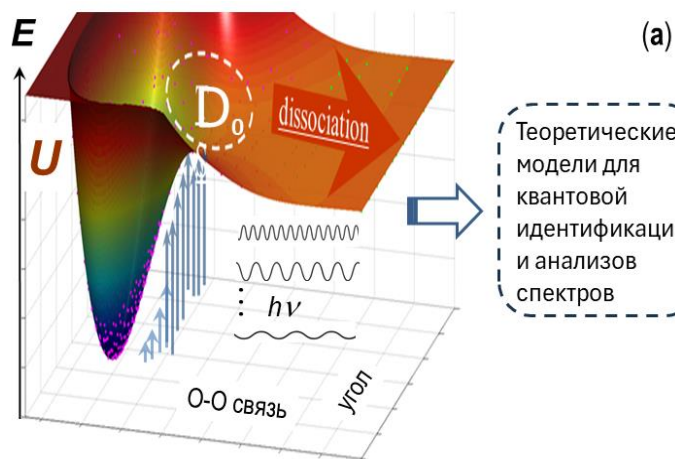
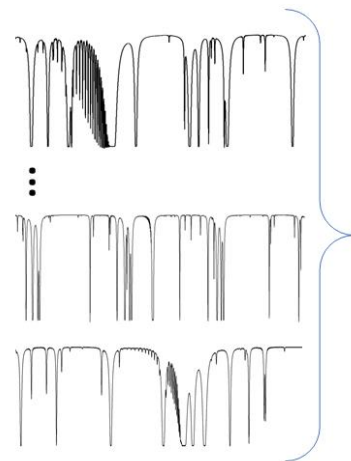
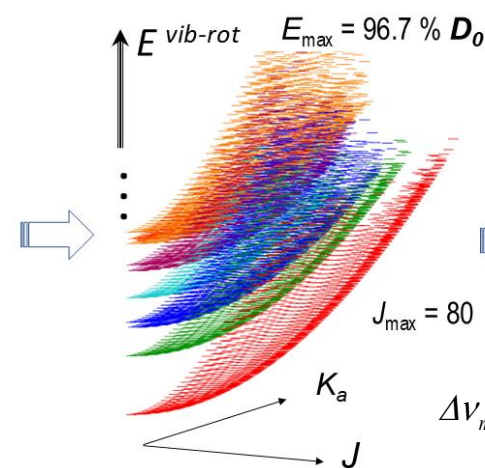


Схема экспериментов по регистрации спектров во всем энергетическом диапазоне потенциальной функции  $U$  до  $D_0$



$h\nu$ : 75290 линий во всех экспериментальных спектрах с учетом индивидуальных ( $\delta\nu$ )



28572 уровней энергии, ( $\delta E$ ) и их зависимости от квантовых чисел ( $\nu_1, \nu_2, \nu_3; J, K_a$ )

Новые квантовые переходы

$$\Delta\nu_{m \rightarrow k} = \sqrt{(\Delta E_m)^2 + (\Delta E_k)^2} - 2C_{mk} \Delta E_m \Delta E_k$$

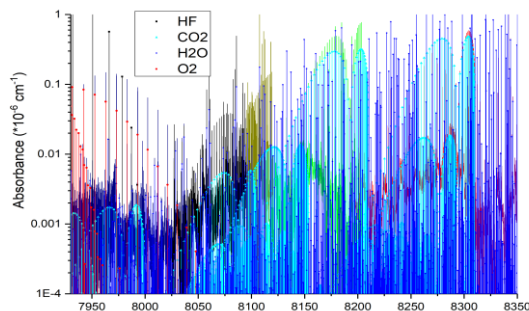
предсказания с учетом корреляций и доверительных ( $\delta\nu$ )

# Уровни энергии до диссоциации

S. Vasilchenko, A. Barbe, E. Starikova,  
S. Kassi, D. Mondelain, A. Campargue,  
V. Tyuterev,

Detection and assignment of ozone bands near 95% of the dissociation threshold:  
Ultrasensitive experiments for probing potential energy function and vibrational dynamics

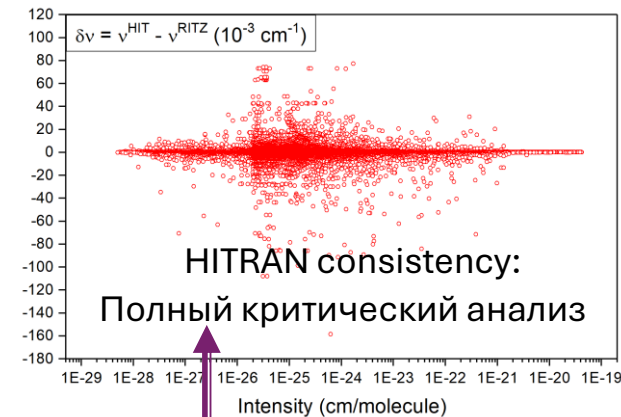
*Physical Review A*, 102 (5), art. no. 052804,



R. Schinke *Max Planck Inst. Goettingen*

Ozone status review (2006):

*“Spectroscopic data slightly below and above dissociation threshold would be instrumental in checking the shape of the potential function and verifying quantum dynamics calculations”*



Спектры 96 источников: МВ, Фурье, с синхротронным излучением + 2 типа CRDS лазерных

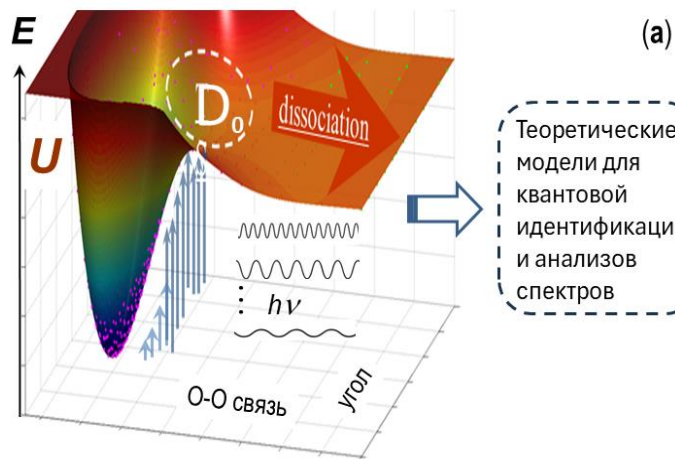
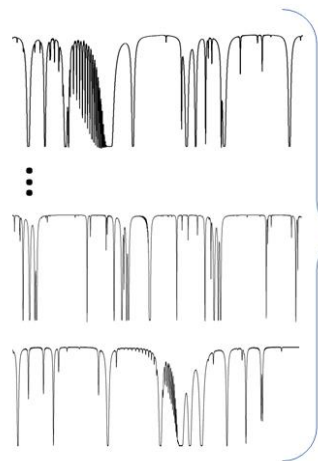
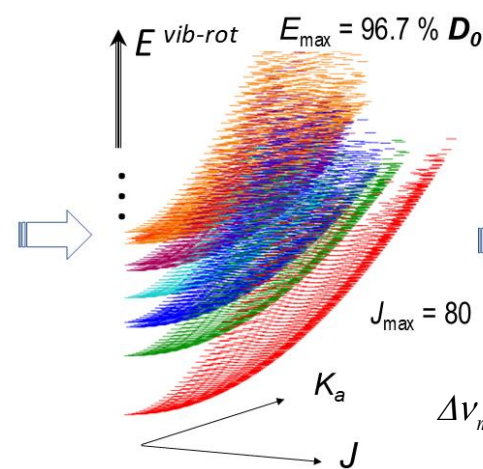


Схема экспериментов по регистрации спектров во всем энергетическом диапазоне потенциальной функции  $U$  до  $D_0$



$h\nu$ : 75290 линий во всех экспериментальных спектрах с учетом индивидуальных  $(\delta\nu)$



28572 уровней энергии,  $(\delta E)$  и их зависимости от квантовых чисел  $(\nu_1, \nu_2, \nu_3; J, K_a)$

Новые квантовые переходы

$$\Delta\nu_{m \rightarrow k} = \sqrt{(\Delta E_m)^2 + (\Delta E_k)^2} - 2C_{mk} \Delta E_m \Delta E_k$$

предсказания с учетом корреляций и доверительных  $(\delta\nu)$

S. Tashkun, A. Barbe, S. Mikhailenko, E. Starikova, V. Tyuterev,

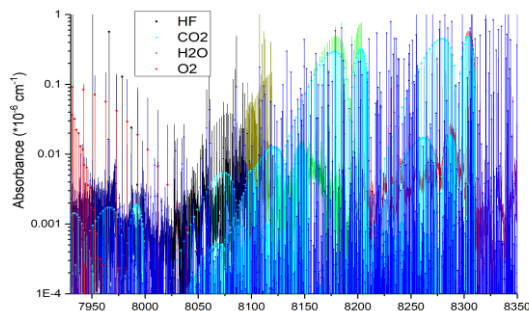
Complete RITZ set of rovibrational energy levels of 16O3 deduced from experimental spectra: critical analysis of transition frequencies in spectroscopic databases // *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 53, 043101

# Уровни энергии до диссоциации

S. Vasilchenko, A. Barbe, E. Starikova,  
S. Kassi, D. Mondelain, A. Campargue,  
V. Tyuterev,

Detection and assignment of ozone bands near 95% of the dissociation threshold:  
Ultrasensitive experiments for probing potential energy function and vibrational dynamics

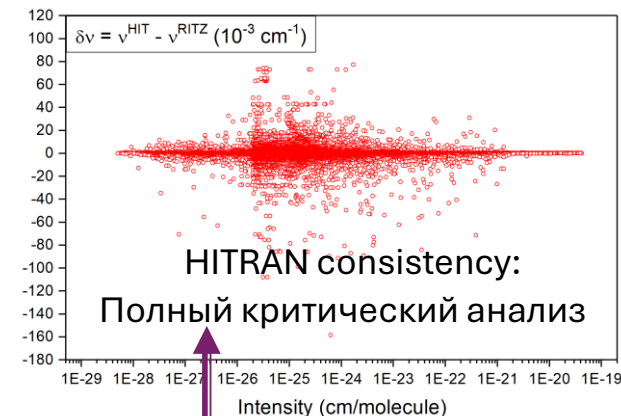
*Physical Review A*, 102 (5), art. no. 052804,



R. Schinke *Max Planck Inst. Goettingen*

Ozone status report (2006):

*“Spectroscopic data slightly below and above dissociation threshold would be instrumental in checking the shape of the potential function and verifying quantum dynamics calculations “*



Спектры 96 источников: МВ, Фурье, с синхротронным излучением + 2 типа CRDS лазерных

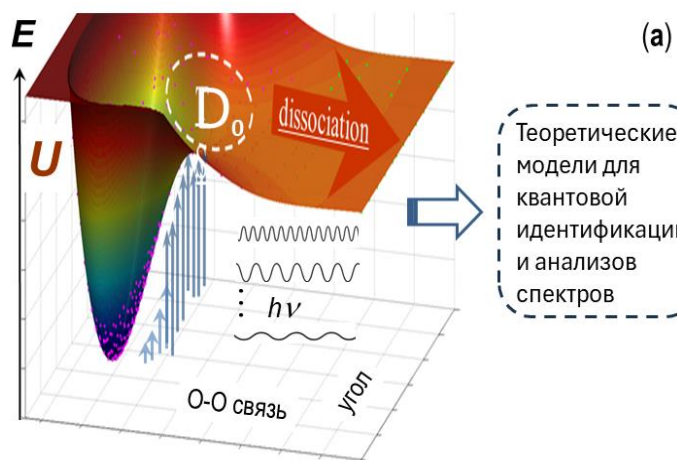
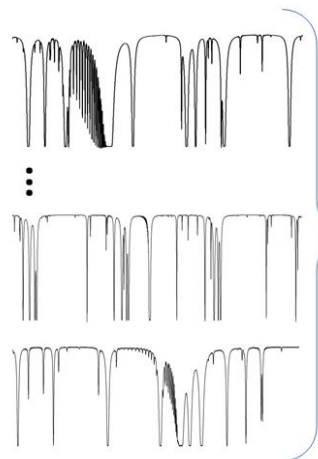
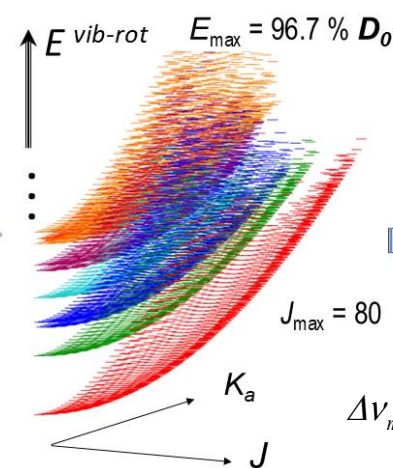


Схема экспериментов по регистрации спектров во всем энергетическом диапазоне потенциальной функции  $U$  до  $D_0$



$h\nu$ : 75290 линий во всех экспериментальных спектрах с учетом индивидуальных ( $\delta\nu$ )



28572 уровней энергии, ( $\delta E$ ) и их зависимости от квантовых чисел ( $\nu_1, \nu_2, \nu_3; J, K_a$ )

Новые квантовые переходы

$$\Delta\nu_{m \rightarrow k} = \sqrt{(\Delta E_m)^2 + (\Delta E_k)^2} - 2C_{mk} \Delta E_m \Delta E_k$$

предсказания с учетом корреляций и доверительных ( $\delta\nu$ )

Результат впервые дает возможность предсказания волновых чисел  $\nu$ , корреляций и доверительных интервалов  $\delta\nu$  **новых спектральных переходов для молекулярной динамики и интерпретации спутниковых наблюдений** в условиях заселенности высоких уровней озона  $E^{vib-rot}$  при нарушении термодинамического равновесия в верхних слоях атмосферы.

# Наиболее полные и точные данные по интенсивностям линий и уровням энергии молекулы озона от терагерцового диапазона до порога диссоциации из экспериментов и *ab initio* теории.

*В. Тютерев, Е. Старикова, С. Михайленко, С. Ташкун, С. Васильченко*

*По циклу работ (в коллаборации с CNRS France и ТГУ): 6 первых авторов ИОА из 7 статей*

5 в журналах Q1 : Physical Review; J. Chemical Physics ; Spectrochimica Acta; Molecule ; JQSRT

2 в журналах Q2 : J. Physical & Chemical Reference Data (*NIST*) ; Molecular Physics

1. **S. Tashkun**, A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, **V. Tyuterev** , *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 53, 043101 (December 2024) (Q2)
2. **V. Tyuterev**, A. Barbe, L. Manceron, B. Grouiez, **S. Tashkun**, J. Burgalat, M. Rotger, *Spectrochim Acta A*: 305, 123456 (2024) (Q1)
3. A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, **V. Tyuterev**, *Molecules*, 27, 911 (2022). (Q1)
4. **V. Tyuterev**, **S. Tashkun**, M. Rey, A. Nikitin, *Molecular Physics*, 120 , e2096140 (2022) (Q2)
5. **V. Tyuterev**, A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, Y. Babikov, *J.Quant.Spectrosc.Radiation Transfer*, 272, 107801 (2021). (Q1)
6. **S. Vasilchenko**, A. Barbe, **E. Starikova**, S. Kassi, D. Mondelain, A. Campargue, **V. Tyuterev**, (2020) *Phys.Rev A*, 102, 052804, (Q1)
7. **V. Tyuterev**, A. Barbe, D. Jacquemart, C. Janssen, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, (2019) *J. Chem. Physics*, 150, 184303, (Q1)

Наиболее полные и точные по интервалам линий в спектрах энергии от терагерцового диапазона порогом дисперсии из экспериментальных данных и *ab initio*.



**В. Тютерев,**  
теория

**Е. Старикова,**  
анализы спектров

**С. Михайленко,**

**С. Ташкун,**  
софт

**С. Васильченко**  
эксперимент

По циклу работ (в коллаборации с CNRS France и ТГУ): **6 первых авторов ИОА** из 7 статей

5 в журналах Q1 : Physical Review; J. Chemical Physics ; Spectrochimica Acta; Molecule ; JQSRT

2 в журналах Q2 : J. Physical & Chemical Reference Data (NIST) ; Molecular Physics

1. **S. Tashkun**, A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, **V. Tyuterev** , *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 53, 043101 (December 2024) (Q2)
2. **V. Tyuterev**, A. Barbe, L. Manceron, B. Grouiez, **S. Tashkun**, J. Burgalat, M. Rotger, *Spectrochim Acta A*: 305, 123456 (2024) (Q1)
3. A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, **V. Tyuterev**, *Molecules*, 27, 911 (2022). (Q1)
4. **V. Tyuterev**, **S. Tashkun**, M. Rey, A. Nikitin, *Molecular Physics*, 120 , e2096140 (2022) (Q2)
5. **V. Tyuterev**, A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, Y. Babikov, *J.Quant.Spectrosc.Radiation Transfer*, 272, 107801 (2021). (Q1)
6. **S. Vasilchenko**, A. Barbe, **E. Starikova**, S. Kassi, D. Mondelain, A. Campargue, **V. Tyuterev**, (2020) *Phys.Rev A*, 102, 052804, (Q1)
7. **V. Tyuterev**, A. Barbe, D. Jacquemart, C. Janssen, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, (2019) *J. Chem. Physics*, 150, 184303, (Q1)

Наиболее полные и точные по интервалам линий в спектрах энергии от терагерцового диапазона порого диссоциации из экспериментальных данных и *ab initio* расчетов.



**В. Тютереv,**  
теория



**Е. Старикова,**  
анализы спектров



**С. Михайленко,**  
софт



**С. Васильченко**  
эксперимент

По циклу работ (в коллаборации с CNRS France и ТГУ): **6 первых авторов ИОА** из 7 статей

5 в журналах Q1 : Physical Review; J. Chemical Physics ; Spectrochimica Acta; Molecule ; JQSRT

2 в журналах Q2 : J. Physical & Chemical Reference Data (NIST) ; Molecular Physics

1. **S. Tashkun**, A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, **V. Tyuterev** , *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 53, 043101 (December 2024) (Q2)
2. **V. Tyuterev**, A. Barbe, L. Manceron, B. Grouiez, **S. Tashkun**, J. Burgalat, M. Rotger, *Spectrochim Acta A*: 305, 123456 (2024) (Q1)
3. A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, **V. Tyuterev**, *Molecules*, 27, 911 (2022). (Q1)
4. **V. Tyuterev**, **S. Tashkun**, M. Rey, A. Nikitin, *Molecular Physics*, 120 , e2096140 (2022) (Q2)
5. **V. Tyuterev**, A. Barbe, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, Y. Babikov, *J.Quant.Spectrosc.Radiation Transfer*, 272, 107801 (2021). (Q1)
6. **S. Vasilchenko**, A. Barbe, **E. Starikova**, S. Kassi, D. Mondelain, A. Campargue, **V. Tyuterev**, (2020) *Phys.Rev A*, 102, 052804, (Q1)
7. **V. Tyuterev**, A. Barbe, D. Jacquemart, C. Janssen, **S. Mikhailenko**, **E. Starikova**, (2019) *J. Chem. Physics*, 150, 184303, (Q1)

### Приложения :

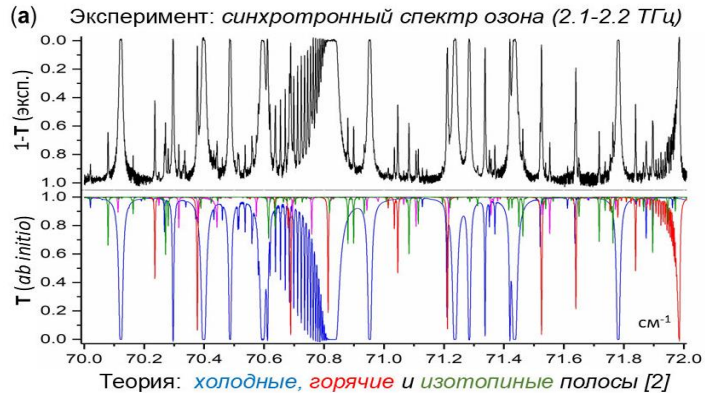
Атмосфера → базы данных S&MPO (СО РАН) HITRAN(Harvard). Проект РФФ

“ Озон: радиационные свойства на пороге диссоциации, процессы формирования, релаксации и распада; **спектроскопическое обеспечение для моделирования спутниковых наблюдений**”.

Квантовая динамика

**V. Tyuterev**, V. Kokoouline, O. Egorov, **S. Vasilchenko**, et al. *A. Phys. Rev. A* ;112, 062820 (2025)

**НАИБОЛЕЕ ПОЛНЫЕ И ТОЧНЫЕ ДАННЫЕ ПО ИНТЕНСИВНОСТЯМ ЛИНИЙ И УРОВНЯМ ЭНЕРГИИ МОЛЕКУЛЫ  
ОЗОНА ОТ ТЕРАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНА ДО ПОРОГА ДИССОЦИАЦИИ ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И *AB INITIO* ТЕОРИИ**



В.Г. Тютерев<sup>1,2</sup>, Е.Н. Старикова<sup>1</sup>, С.Н. Михайленко<sup>1</sup>, С.А. Ташкун<sup>1</sup>, С.С. Васильченко<sup>1</sup>

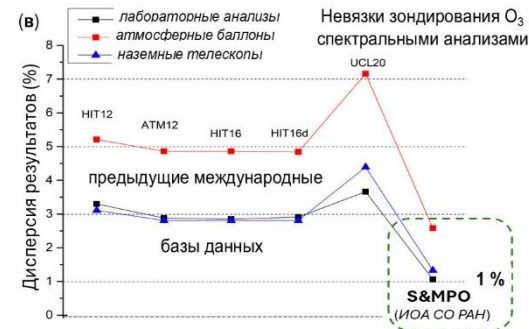


Рис.1. Согласие *ab initio* теории с экспериментом (а). Уменьшение невязки (б) определения концентрации озона из 37 ИК интервалов с использованием S&MPO (ИОА СО РАН)

Впервые проведены *ab initio* расчеты абсолютных интенсивностей линий с погрешностью < 1 % для сильных полос в терагерцовых (ТГц) и инфракрасных (ИК) спектрах озона. Их включение в международные базы данных S&MPO (ИОА) и HITRAN (Harvard) позволило решить проблему самосогласованности зондирования озона в 37 спектральных интервалах вплоть до 4900 см<sup>-1</sup>: разногласия уменьшены в 2.7 раза, 1.9 раза и в 2.1 раза для лабораторных, баллонных и наземных измерений телескопами (Cal. Tech. & JPL NASA).

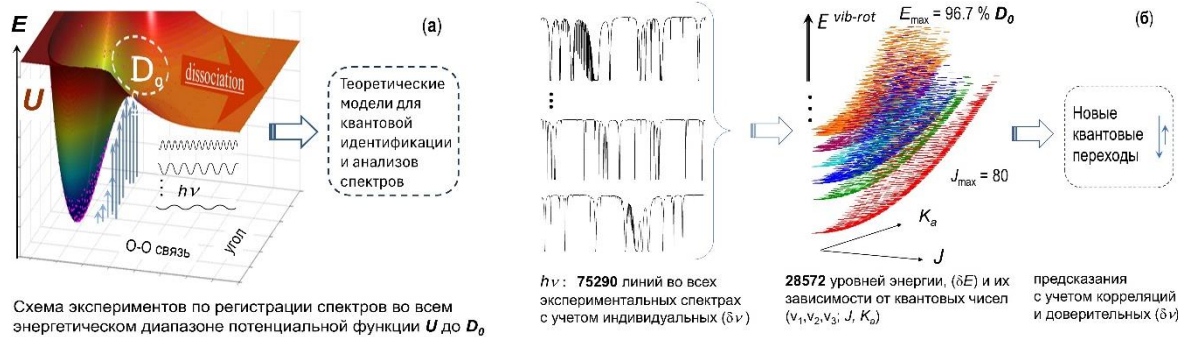


Рис.2. Схема экспериментов (а) и определения квантовых уровней  $E^{vib-rot}$  из спектров (б)

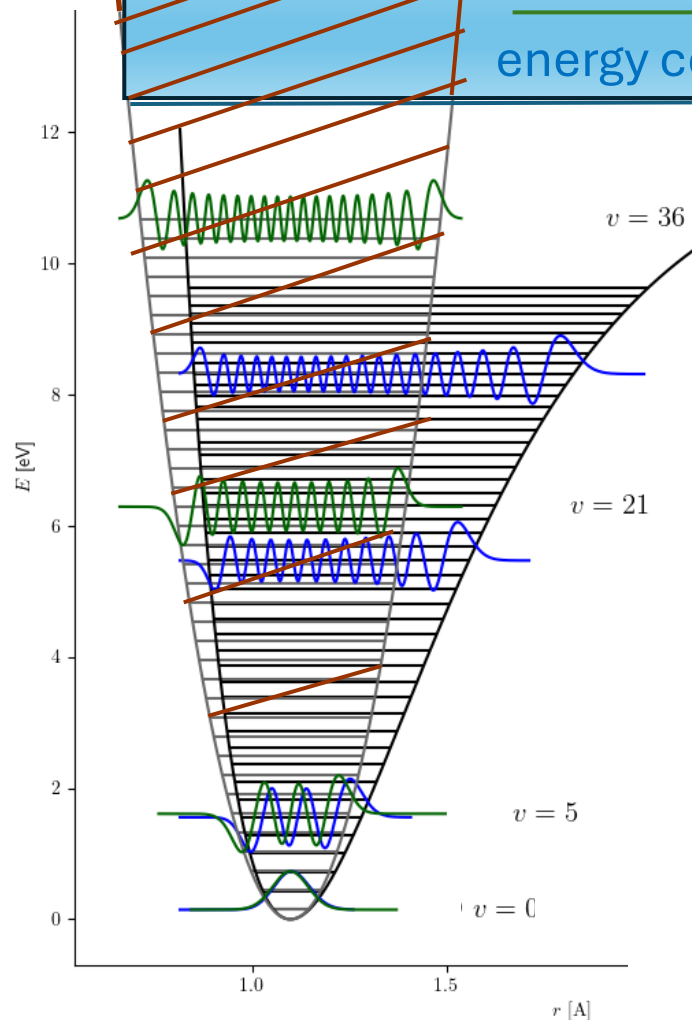
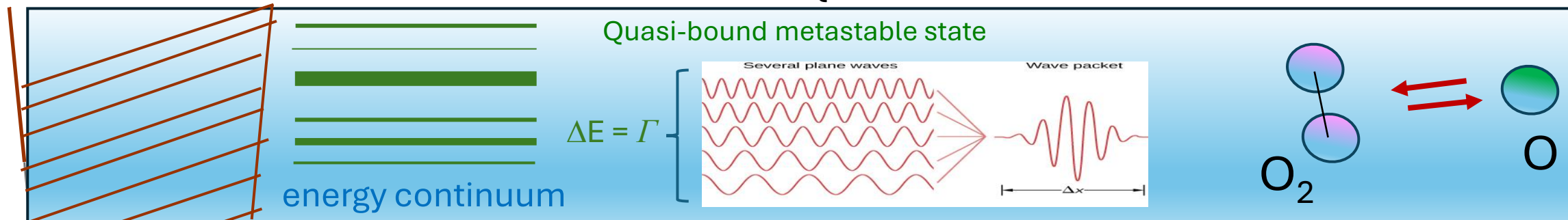
Получен наиболее полный и точный набор 28572 квантовых уровней энергии молекулы <sup>16</sup>O<sub>3</sub> до 96,7% порога диссоциации **D<sub>0</sub>**. Большая часть исходных данных основана на оригинальных анализах экспериментальных синхротронных, Фурье и лазерных спектров с использованием собственных теоретических моделей. Результат впервые дает возможность предсказания новых спектральных переходов и их доверительных интервалов для молекулярной динамики и интерпретации спутниковых наблюдений в верхних слоях атмосферы.

S.Tashkun, A.Barbe, S.Mikhailenko, E.Starikova, V.Tyuterev. JPCRD, **53**,043101,2024 (December 2024); Q2  
V.Tyuterev, A.Barbe, L.Manceron, B.Grouiez, S.Tashkun, et al. Spectro. Acta A: **305**, 123456, 2024; Q1  
V.Tyuterev, S.Tashkun, M.Rey, A.Nikitin, Mol.Phys., **120**,e2096140, 2022; Q2  
A.Barbe, S.Mikhailenko, E.Starikova, V.Tyuterev, Molecules, **27**,911,2022; Q1  
V.Tyuterev, A.Barbe, S.Mikhailenko, E.Starikova, Y.Babikov, JQSRT, **272**,107801,2021; Q1  
S.Vasilchenko, A.Barbe, E.Starikova, S.Kassi, D.Mondelain, A.Campargue, V.Tyuterev. Phys.Rev.A, **102**, 052804,2020; Q1  
V.Tyuterev, A.Barbe, D.Jacquemart, C.Janssen, S.Mikhailenko, E.Starikova. J.Chem.Phys., **150**,184303,2019; Q1



# molecular formation or dissociation

Quasi-bound metastable state



PES dissociation limit

lifetime  $\tau$  of metastable states

$$\tau = \hbar / \Gamma$$

Challenge for quantum theory :  
OZONE formation on a molecular level