

# HIGH-RESOLUTION 1.6 $\mu$ m SPECTRA OF FeH IN M AND L DWARFS

Robert J. Hargreaves<sup>1</sup>, Kenneth H. Hinkle<sup>2</sup>, Charles W. Bauschlicher, Jr.<sup>3</sup>,

Sebastian Wende<sup>4</sup>, Andreas Seifahrt<sup>5</sup>, and Peter F. Bernath<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Chemistry, University of York, Heslington, York, YO10 5DD, UK; [rjh135@york.ac.uk](mailto:rjh135@york.ac.uk), [pfb500@york.ac.uk](mailto:pfb500@york.ac.uk)

## ABSTRACT

Near-infrared bands due to the iron monohydride (FeH) molecule are a characteristic feature of late-M and -L dwarfs.

We have created a line list at 2200 K for the FeH E 4 $\Pi$ –A 4 $\Pi$  electronic transition near 1.58 $\mu$ m (6300 cm<sup>–1</sup>) based on laboratory spectra and an ab initio calculation of the band strength.

A variety of M and L dwarfs were observed near 1.6 $\mu$ m with high spectral resolution ( $R \sim 70,000$ ) using the Phoenix spectrograph on the 8.1 m Gemini South telescope.

The FeH E–A transition made a surprisingly strong contribution to the observed spectral energy distributions and needs to be included in modeling of late-M and L dwarfs.

一水素化鉄 (FeH) 分子による近赤外線バンドは、後期 M 型矮星と後期 L 型矮星の特徴です。

我々は、実験室スペクトルとバンド強度の非経験計算に基づいて、1.58  $\mu$ m (6300 cm<sup>–1</sup>) 付近の FeH E<sup>4</sup> $\Pi$ –A<sup>4</sup> $\Pi$  電子遷移の 2200 K でのラインリストを作成しました。

8.1 m ジェミニ南望遠鏡のフェニックス分光器を使用して、さまざまな M および L 矮星が 1.6  $\mu$ m 付近で高いスペクトル分解能 ( $R \sim 70,000$ ) で観察されました。

FeH E–A 転移は、観測されたスペクトルエネルギー分布に驚くほど強く寄与しており、後期 M 型矮星と後期 L 型矮星のモデル化に含める必要がある。

*Key words:* brown dwarfs – infrared: stars – stars: individual (DENIS 1048-39, GJ 191, GJ 406, GJ 644C, LHS 292, LHS 2065, LHS 3003, LP 944-20, 2MASS J1507-16) – stars: low-mass

*Online-only material:* machine-readable and VO tables

## 1. INTRODUCTION

The **Wing–Ford band** is present in the near-infrared spectra of late-M-type stars near 990 nm (Wing & Ford 1969).

The molecule responsible for this distinctive feature remained elusive until Nordh et al. (1977) were able to correlate the Wing–Ford band with a band of iron monohydride (FeH) at 989.6 nm.

Wing et al. (1977) were also able to identify this band at higher spectral resolution in sunspots.

Phillips et al. (1987) carried out the definitive rotational analysis of several bands and proved that the Wing–Ford band was the 0–0 vibrational band of the F<sup>4</sup> $\Delta_i$ –X<sup>4</sup> $\Delta_i$  electronic transition of FeH.

**ウイング・フォード バンド**は、990 nm 付近の後期 M 型星の近赤外線スペクトルに存在します (Wing & Ford 1969)。この特徴的な特徴の原因となる分子は、Nordh ら (1977) が Wing–Ford バンドを 989.6 nm の一水素化鉄 (FeH) のバンドと関連させることができるまでは解明されていませんでした。

Wing et al. (1977) はこのバンドを高いスペクトル分解能で黒点の中に同定することができました。

フィリップスら (1987) は、いくつかのバンドの決定的な回転解析を実行し、Wing-Ford バンドが FeH の  $F^4\Delta_i-X^4\Delta_i$  電子遷移の 0-0 振動バンドであることを証明しました。

The spectral energy distributions (SEDs) of late-M-type stars and L dwarfs display absorption bands of many molecular species including the metal hydrides CaH, CrH, and FeH (Kirkpatrick 2005; Bochanski et al. 2007).

A strong Wing-Ford band is a characteristic feature of L-type objects (Kirkpatrick 2005).

M-type stars (with surface temperatures around 2300–3900 K) have strong oxide bands due to TiO and VO, but as the temperature decreases to that of L-type objects (~1300–2500 K) the TiO and VO bands become fainter and are replaced by CrH and FeH bands (Kirkpatrick et al. 1999).

The bands from these molecules remain distinguishing features until the temperature reaches that of T-type brown dwarfs (~800–1300 K) and then CrH and FeH fade, vibration-rotation bands of H<sub>2</sub>O strengthen, and CH<sub>4</sub> appears (Burgasser et al. 2006).

後期 M 型星と L 型矮星のスペクトル エネルギー分布 (SED) は、金属水素化物 CaH、CrH、FeH を含む多くの分子種の吸収バンドを示します (Kirkpatrick 2005; Bochanski et al. 2007)。

強い Wing-Ford バンドは、L 型天体の特徴です (Kirkpatrick 2005)。

**M 型星** (表面温度約 2300 ~ 3900 K) は、TiO と VO による強い酸化物バンドを持っていますが、温度が L 型天体 (約 1300 ~ 2500 K) まで低下すると TiO と VO のバンドは薄くなり、そして、CrH バンドと FeH バンドに置き換わりま

す (Kirkpatrick et al. 1999)。  
これらの分子のバンドは、温度が T 型褐色矮星の温度 (約 800 ~ 1300 K) に達するまで顕著な特徴を保ち、その後 CrH と FeH が消え、H<sub>2</sub>O の振動回転バンドが強まり、CH<sub>4</sub> が出現します (Burgasser et al. 2006)。

Wallace&Hinkle (2001b) identified 68 lines of a newinfrared band system of FeH at 1.58 $\mu$ m (6300 cm<sup>-1</sup>) in the spectrum of a cool sunspot (Wallace & Hinkle 2001a) by comparison with a laboratory spectrum.

On the basis of **ab initio** calculations of the properties of the low-lying electronic states by Langhoff & Bauschlicher (1990), the lines were tentatively assigned to the 0–0 vibrational band of the FeH  $E^4\Pi-A^4\Pi$  electronic transition.

Some of these FeH lines were also seen weakly in the spectrum of the early-M star GJ 411 (M2+V) and more strongly in the late-M star GJ 569B (M8.5V).

Cushing et al. (2003) used mediumresolution spectra to show that the FeH absorption features near 1.6 $\mu$ m are prominent in late-M and -L dwarfs (M8 to L7.5).

The 0–0 band of  $E^4\Pi-A^4\Pi$  FeH transition was rotationally analyzed by Balfour et al. (2004), who noticed an additional infrared electronic transition at 1.35 $\mu$ m (7400 cm<sup>-1</sup>) due to the  $E^4\Pi-X^4\Delta$  transition.

Wallace & Hinkle (2001b) は、実験室スペクトルとの比較により、低温黒点のスペクトル (Wallace & Hinkle 2001a) の 1.58  $\mu$  m (6300 cm<sup>-1</sup>) にある FeH の新しい赤外バンド系の 68 本の線を同定しました。

Langhoff & Bauschlicher (1990) による低位電子状態の特性の非経験的計算に基づいて、線は FeH  $E^4\Pi-A^4\Pi$  電子遷移の 0 - 0 振動バンドに暫定的に割り当てられました。

これらの FeH 系統のいくつかは、初期 M 星 GJ 411 (M2+V) のスペクトルでも弱く見られ、後期 M 星 GJ 569B (M8.5 V) ではより強く見られました。

クッシングら。(2003) は、中解像度スペクトルを使用して、1.6  $\mu$  m 付近の FeH 吸収の特徴が後期 M 型および -L 型矮星 (M8 ~ L7.5) で顕著であることを示しました。

$E^4\Pi-A^4\Pi$  FeH 遷移の 0-0 バンドは、Balfour ら (2004) によって回転解析されました。彼らは  $E^4\Pi-X^4\Delta$  遷移による 1.35  $\mu$  m (7400 cm<sup>-1</sup>) でのもう一つの赤外電子遷移に気づきました。

The lines of the Wing-Ford band and  $E^4\Pi-A^4\Pi$  transition show a substantial Zeeman effect in the sunspot spectrum (Wallace & Hinkle 2001b).

Magnetically sensitive lines of these transitions are potentially useful in the determination of magnetic fields in M and L objects because suitable atomic lines become difficult to find in cool sources (Reiners & Basri 2006).

The molecular g values needed are now available for a number of lines in the  $F^4\Delta_i-X^4\Delta_i$  transition based on laboratory Zeeman experiments and the analysis of sunspot data (Harrison et al. 2008a; Harrison & Brown 2008b).

As the suitability of a line for magnetic field determinations increases with wavelength, the E-A lines are also potentially useful if g-values can be determined.

Wing-Ford バンドと  $E^4\Pi-A^4\Pi$  遷移の線は、黒点スペクトルにおけるかなりのゼーマン効果を示しています (Wallace & Hinkle 2001b)。

低温源では適切な原子線を見つけることが困難になるため、これらの遷移の磁気感受性線は、M および L 型天体の磁場の決定に役立つ可能性があります (Reiners & Basri 2006)。

必要な分子 g 値は、実験室でのゼーマン実験と黒点データの分析に基づいて、 $F^4\Delta_i-X^4\Delta_i$  遷移の多くの線で入手可能です (Harrison et al. 2008a; Harrison & Brown 2008b)。

磁場測定に対する線の適合性は波長とともに増加するため、g 値を測定できる場合には E-A 線も潜在的に役立つ可能性があります。

Dulick et al. (2003) provided a line list for the  $F^4\Delta_i-X^4\Delta_i$  transition based on term values derived from the analysis of Phillips et al. (1987) and extrapolated them to higher  $v$ 's and  $J$ 's.

Line intensities were based on an ab initio calculation of the transition dipole moment and calculated Honl-London rotational line strength factors.

They were also able to compute molecular opacities for a range of temperatures and pressures encountered in M and L dwarf atmospheres, and the comparison of a calculated SED with an observed L5 dwarf spectrum showed reasonable agreement at low resolution.

デュリックら(2003)は Phillips ら(1987) の分析から得られた項の値に基づいて、 $F^4\Delta_i-X^4\Delta_i$  遷移の線リストを提供し、それらをより高い  $v$  と  $J$  に外挿しました。

線強度は、遷移双極子モーメントの非経験計算と計算された Honl-London 回転線強度係数に基づいています。

彼らはまた、M および L 矮星大気で遭遇するさまざまな温度と圧力に対する分子の不透明度を計算することもでき、計算された SED と観測された L5 矮星のスペクトルとの比較では、低解像度で合理的な一致が示されました。

In this paper, we report on our line list for the FeH  $E^4\Pi-A^4\Pi$  transition near  $1.58\mu\text{m}$  ( $6300\text{ cm}^{-1}$ ) based on a combination of laboratory spectra and ab initio calculations, and our high-resolution observations of a series of M and L dwarfs.

この論文では、実験室スペクトルと非経験計算の組み合わせ、および一連の M および L 矮星の高解像度観測の組み合わせに基づいて、 $1.58\mu\text{m}$  ( $6300\text{ cm}^{-1}$ ) 付近の FeH  $E^4\Pi-A^4\Pi$  遷移の線リストについて報告します。

## 2. ASTRONOMICAL OBSERVATIONS

High-resolution infrared spectra were obtained for target M and L dwarfs using the 8.1 m Gemini South reflecting telescope and the NOAO Phoenix spectrometer (Hinkle et al. 1998).

The observations (GS-2007A-C-2) were carried out during one night, 2007 March 2.

The program stars, listed in Table 1, were selected to be bright representatives of their spectral subclass.

The sample brackets the mid-M to mid-L spectral types.

In addition, hot stars with no intrinsic spectral lines in the regions observed were observed to remove fringing and telluric lines.

A set of ten flats and darks was also observed.

8.1 m ジェミニ南反射望遠鏡と NOAO フェニックス分光計を使用して、ターゲットの M および L 矮星について高解像度の赤外スペクトルが得られました (Hinkle et al. 1998)。

観測 (GS-2007A-C-2) は、2007 年 3 月 2 日の一晩に実行されました。

表 1 にリストされている番組のスターは、スペクトル サブクラスの明るい代表者として選ばれました。

このサンプルは、中期 M から中期 L のスペクトル タイプを網羅しています。

さらに、観測された領域に固有のスペクトル線がない熱い星では、縞模様や地テル線が除去されることが観察されました。

10 個のフラットとダークのセットも観察されました。

The Phoenix spectrometer is a cryogenically cooled echelle spectrograph that uses order-separating filters to isolate individual echelle orders.

The detector is a 1024×1024 InSb Aladdin II array.

The size of the detector in the dispersion direction limits the wavelength coverage in a single observation to about 0.5% (1550 km s<sup>-1</sup>, or ~80 Å at 1.6μm).

One edge of the detector is blemished, so the wavelength coverage on all but the brightest sources is typically trimmed by a few percent to avoid this area.

The spectra discussed here were observed with the two pixel slit resulting in a spectral resolving power of  $R = \lambda/\Delta\lambda \sim 70,000$ .

The two pixel wide slit is narrow on the sky, 0.18", so there were significant slit losses.

However, the highest possible resolution was felt to be appropriate for this program.

The spectral region observed was centered on 1.6524μm = 6050 cm<sup>-1</sup>.

フェニックス分光計は、次数分離フィルターを使用して個々のエシェル次数を分離する極低温冷却エシェル分光器です。

検出器は 1024 × 1024 InSb Aladdin II アレイです。

分散方向の検出器のサイズにより、1 回の観測での波長範囲は約 0.5% (1550 km s<sup>-1</sup>、または 1.6 μm で約 80 Å) に制限されます。

検出器の一方の端には傷があるため、この領域を避けるために、最も明るい光源を除くすべての光源の波長範囲が通常数パーセントトリミングされます。

ここで説明したスペクトルは、 $R = \lambda/\Delta\lambda \sim 70,000$  のスペクトル分解能をもたらす 2 つのピクセル スリットで観察されました。

2 ピクセル幅のスリットは上空では狭く、0.18 インチであるため、大幅なスリット損失が発生しました。

ただし、このプログラムには可能な限り最高の解像度が適切であると考えられました。

観察されたスペクトル領域の中心は 1.6524μm = 6050 cm<sup>-1</sup> でした。

Each program star was observed at two different positions along the slit separated by 6 on the sky.

While seeing varied during the observations, the typical delivered image quality was subarcsecond so stellar images at different positions on the slit were well separated on the detector.

Each observation was ratioed to an average flat minus an average dark.

Differencing the observations at two different positions along the slit then removed sky and dark backgrounds.

The array image frames were then reduced to one-dimensional spectra using the IRAF routine APALL.

各プログラムの星は、空の 6 で区切られたスリットに沿った 2 つの異なる位置で観察されました。

観察中に見え方は変化しましたが、典型的な画質はサブ秒であったため、スリット上のさまざまな位置にある星像は検出器上で十分に分離されました。

各観測値は、平均フラットから平均ダークを引いたものとの比率で計算されました。

スリットに沿った 2 つの異なる位置での観察結果を差分することで、空と暗い背景が除去されました。

次に、IRAF ルーチン APALL を使用して、アレイ画像フレームを 1 次元スペクトルに変換しました。

The wavelength calibrations were computed by using a set of telluric wavelengths obtained from the hot-star spectra.

A number of telluric lines, mostly fairly weak, are present in the spectral interval observed.

Using the IRAF routine TELLURIC, the program stars were ratioed to the hot-star spectra.

This worked well to remove the telluric spectrum and to remove any fringing present.

In practice, virtually no evidence of telluric absorption is visible in the program star spectra.

波長校正は、ホットスターのスペクトルから得られた一連の地表波長を使用して計算されました。

観察されたスペクトル間隔には、ほとんどがかなり弱い地殻線が多数存在します。

IRAF ルーチン TELLURIC を使用して、プログラムのスターをホットスターのスペクトルに比例させました。

これは、テルルススペクトルを除去し、存在するフリンジを除去するのにうまく機能しました。

実際には、プログラムの星のスペクトルにはテルル吸収の証拠は事実上見られません。

**Table 1**  
Observational Log of Objects

Source	Spectral Type	Magnitude (K)	Total Integration (minutes)
GJ 191	M6	5.1	4
LHS 292	M6	8.0	20
GJ 406	M6	6.1	1
LHS 3003	M6	8.9	20
GJ 644C	M7	8.8	20
LP 944-20	M9	9.5	80
LHS 2065	M9	10.0	80
DENIS 1048-39	M9	8.6	20
2MASS J1507-16	L5	11.3	60

**Note.** The reduced program star spectra are shown in Figure 2.

### 3. AB INITIO CALCULATION OF BAND STRENGTH      バンド強度の第一原理計算 (COMPUTATIONAL APPROACH)

The calculations are very similar to those performed for our study (Dulick et al. 2003) of the FeH F-X transition.

In order to obtain an equivalent treatment of the E, A, and X states, we optimize the orbitals using **the state-averaged completeactive-space self-consistent-field (SA-CASSCF) approach**, with equal weights for each state.

The SA-CASSCF calculations are performed using symmetry and equivalence restrictions and therefore the wave functions have  $C_{\infty v}$  symmetry even though the calculations are performed in  $C_{2v}$  symmetry.

The active space consists of the Fe 3d, 4s, and 4p orbitals and the H 1s orbital plus one additional  $\sigma$  orbital based on preliminary calculations.

In  $C_{2v}$  symmetry, this corresponds to an active space of six a1, two b1, two b2, and one a2 orbitals.

More extensive correlation is included using **the internally contracted multireference configuration interaction approach (IC-MRCI; Werner & Knowles 1988; Knowles & Werner 1988)**.

The CASSCF configurations are used as reference configurations in the IC-MRCI calculations and only the valence electrons are correlated.

We estimate the effect of higher excitations using the Davidson correction, which is denoted by +Q.

We obtain one state of A1 symmetry and three states of B1 symmetry, because there is a  $^4\Phi$  state between the E  $^4\Pi$  and A  $^4\Pi$  states for some internuclear separations.

It is easy to identify the  $\Phi$  state as there is little mixing between the  $\Phi$  and  $\Pi$  states even though the IC-MRCI calculations are performed in  $C_{2v}$  symmetry.

Scalar relativistic effects are included using the oneelectron Douglas-Kroll (DK) approach (Hess 1986).

この計算は、FeH F-X 転移に関する我々の研究 (Dulick et al. 2003) で実行されたものと非常によく似ています。

E、A、X 状態を同等に扱うために、**状態平均完全活性空間自己無撞着場 (SA-CASSCF) 法**を使用して、各状態の重みを等

しい状態で軌道を最適化します。

SA-CASSCF の計算は対称性と等価性を拘束して行われるため、計算が  $C_{2v}$  対称で実行される場合でも、波動関数は  $C_{\infty v}$  対称性を持ちます。

活性空間は、Fe 3d、4s、および 4p 軌道と、H 1s 軌道に、予備計算に基づく 1 つの追加の  $\sigma$  軌道で構成されます。

$C_{2v}$  対称では、これは 6 つの  $a_1$ 、2 つの  $b_1$ 、2 つの  $b_2$ 、および 1 つの  $a_2$  軌道の活性空間に対応します。

内部で契約された**複数参照構成相互作用アプローチ (IC-MRCI; Werner & Knowles 1988; Knowles & Werner 1988)**を使用すると、より広範な相関関係が含まれます。

CASSCF 構成は、IC-MRCI 計算で参照構成として使用され、価電子のみが相関されます。

+Q で示される Davidson 補正を使用して、より高い励起の影響を推定します。

核間分離によっては  $E^4\Pi$  状態と  $A^4\Pi$  状態の間に  $4\Phi$  状態が存在するため、 $A_1$  対称の 1 つの状態と  $B_1$  対称の 3 つの状態が得られます。

IC-MRCI 計算は  $C_{2v}$  対称で実行されますが、 $\Phi$  状態と  $\Pi$  状態の間にはほとんど混合がないため、 $\Phi$  状態を識別するのは簡単です。

スカラー相対論的効果は、1 電子の Douglas-Kroll (DK) アプローチを使用して組み込まれます (Hess 1986)。

The Fe basis set can be described as (20s15p10d6f4g)/ [7s7p5d3f2g].

The **primitive set** is derived from that of Partridge (1989).

The s, p, and d **primitives** are contracted based on a DKSCF calculation of the 5D state of the Fe atom.

The inner 16 s primitives are contracted to three functions and the outermost four are uncontracted, the inner ten p primitives are contracted to two functions and the outermost five are uncontracted, and the inner six d primitives are contracted to one function and the outermost four are uncontracted.

The f and g sets are taken from our averaged atomic natural orbital set (Bauschlicher 1995).

For hydrogen, the correlation-consistent polarized-valence triple zeta set (Dunning 1989) is used, but the contraction coefficients are taken from a DK-SCF calculation.

The CASSCF/IC-MRCI calculations are performed using Molpro (Werner & Knowles 2002).

The computational results are summarized in Table 2 for the equilibrium bond length,  $r_e$ ; the dissociation energy from  $v=0, D_0$ ; the equilibrium vibrational frequency,  $\omega_e$ ; the vibrational anharmonic correction,  $\omega_e x_e$ ; the term energy measured from equilibrium,  $T_e$ .

Table 3 provides the Einstein  $A_{v'v''}$  values for the  $v'-v''$  vibrational bands.

Fe 基底系は (20s15p10d6f4g)/ [7s7p5d3f2g] と記述できます。

**プリミティブ セット**は Partridge (1989) のプリミティブ セットから派生しています。

s、p、および d プリミティブは、Fe 原子の 5D 状態の DKSCF 計算に基づいて短縮されます。

内側の 16 s プリミティブは 3 つの関数に縮小され、最も外側の 4 つは縮小されません。内側の 10 個の p プリミティブは 2 つの関数に縮小され、最も外側の 5 つは縮小されません。また、内側の 6 つの d プリミティブは 1 つの関数に縮小され、最も外側の 4 つは縮小されます。

f セットと g セットは、平均化された原子の自然軌道セット (Bauschlicher 1995) から取得されます。

水素の場合、相関の一貫した分極価電子三重ゼータ集合 (Dunning 1989) が使用されますが、収縮係数は DK-SCF 計算から取得されます。

CASSCF/IC-MRCI 計算は、Molpro を使用して実行されます (Werner & Knowles 2002)。

平衡結合長に関する計算結果を表 2 にまとめます。  $v=0, D_0$  からの解離エネルギー；平衡振動数  $\omega_e$ ；振動非調和補正、 $\omega_e x_e$ ；平衡状態から測定されるエネルギー項、 $T_e$ 。

表 3 は、 $v'-v''$  振動帯域の Einstein  $A_{v'v''}$  値を示しています。

**Table 2**  
Summary of the MRCI+Q Results

State	$r_e$ (Å)	$D_0$ (eV)	$\omega_e$ (cm <sup>-1</sup> )	$\omega_e x_e$ (cm <sup>-1</sup> )	$T_e$ (cm <sup>-1</sup> )
X	1.564	1.54	1777.1	32.3	0
A	1.545	1.58	1799.1	34.3	-408
E	1.645	1.80	1579.1	31.8	7263

#### 4. LINE STRENGTHS AND LINE LISTS

The line list was generated by determining the intensities of all the peaks contained in the E 4Π-A 4Π region (4990–6320 cm<sup>-1</sup>) of the FeH archived spectrum (1983/01/19#2) from the National Solar Observatory (NSO).

The FeH spectrum was recorded in 1983 with the Fourier transform spectrometer of the McMath-Pierce Solar Telescope using InSb detectors at a resolution of 0.05 cm<sup>-1</sup>.

It contains thermal emission from a King-type carbon tube furnace loaded with iron filings and a mixed atmosphere of hydrogen and helium operating at 2400 °C and ~250 Torr (experimental details are taken from the log sheet).

Phillips et al. (1987) used spectra taken at the same time and explain in more detail the experimental setup.

ラインリストは、国立太陽天文台 (NSO) からの FeH アーカイブスペクトル (1983/01/19#2) の E 4Π-A 4Π 領域 (4990 - 6320 cm<sup>-1</sup>) に含まれるすべてのピークの強度を決定することによって生成されました。

FeH スペクトルは、1983 年に McMath-Pierce 太陽望遠鏡のフーリエ変換分光計を使用し、InSb 検出器を使用して分解能 0.05 cm<sup>-1</sup> で記録されました。

これには、鉄を装填したキング型カーボン管状炉と、2400 °C、約 250 Torr で動作する水素とヘリウムの混合雰囲気からの熱放射が含まれます (実験の詳細はログシートから取得されます)。

フィリップスら(1987) は同時に採取されたスペクトルを使用し、実験設定をより詳細に説明しています。

The lines in the NSO spectrum were measured using WSpetra (Carleer 2001) to generate a line list containing the wavenumber and intensity of 6357 lines.

The region studied (4990–6320 cm<sup>-1</sup>) contains lines primarily from the E 4Πi-A 4Πi electronic transition, and includes numerous unidentified lines.

From this list, 262 lines (including Q-branches) were successfully assigned using term values taken from Balfour et al. (2004).

For these identified lines, we have also included in the line list the calculated Einstein A value, lower state J value, branch, Ω value, lower state energy, and lower state e/f parity.

The lower state energy values for all unidentified lines (96% of all lines) are estimated as the average of all the lower state values from the identified lines (i.e., 2250 cm<sup>-1</sup>).

NSO スペクトルの線は、WSpetra (Carleer 2001) を使用して測定され、6357 の線の波数と強度を含む線リストが生成されました。

研究された領域 (4990 ~ 6320 cm<sup>-1</sup>) には、主に E 4Π<sub>i</sub>-A 4Π<sub>i</sub> 電子遷移からの線が含まれており、多数の未確認の線が含まれています。

このリストから、Balfour et al. (2004)から取得した項値を使用して、262 本の線 (Q 分岐を含む) が正常に割り当てられました。

これらの同定された線については、計算されたアインシュタイン A 値、下位状態 J 値、分岐、Ω 値、下位状態エネルギー、および下位状態 e/f パリティも線リストに含めました。

すべての未確認の線 (すべての線の 96%) の下位状態エネルギー値は、識別された線からのすべての下位状態値の平均として推定されます (つまり、2250 cm<sup>-1</sup>)。

The intensity values quoted in the line list are actually line strengths ( $S'$ ) in HITRAN units ( $\text{cm molecule}^{-1}$ ).

In SI units,  $S'$  is defined (Bernath 2005) as

ラインリストに引用されている強度値は、実際には HITRAN 単位 ( $\text{cm 分子}^{-1}$ ) でのライン強度 ( $S'$ ) です。SI 単位では、 $S'$  は次のように定義されます (Bernath 2005)。

$$S' = \frac{2\pi\nu_{10}S_{J'J''}}{3\varepsilon_0hcQ} \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu_{10}}{kT}\right)\right]. \quad (1)$$

The factor  $S_{J'J''}$  is the square of the transition dipole moment and  $Q$  is the internal partition function.

$S'$  values are line intensities as used in the HITRAN database of molecular line parameters (Rothman et al. 2009).

Using  $S'$  the Beer–Lambert law for the transmission,  $\tau$ , of radiation through a path length  $l$  is given by

係数  $S_{J'J''}$  は遷移双極子モーメントの 2 乗で、 $Q$  は内部分配関数です。

$S'$  値は、分子ラインパラメータの HITRAN データベースで使用されるライン強度です (Rothman et al. 2009)。

$S'$  を使用すると、経路長  $l$  を通る放射線の透過率  $\tau$  に関するビーア・ランバートの法則は次のように与えられます。

$$\tau = \frac{I}{I_0} = \exp[-S'g(\nu - \nu_{10})Nl] \quad (2)$$

in which  $g(\nu - \nu_{10})$  is a normalized line shape function and  $N$  is the total concentration (and applies only at a certain temperature,  $T$ ).

ここで、 $g(\nu - \nu_{10})$  は正規化された線形状関数、 $N$  は総濃度 (特定の温度  $T$  でのみ適用されます) です。

The NSO laboratory emission spectrum of FeH was fitted with Voigt lineshape functions using the WSpectra program which provides line positions ( $\text{cm}^{-1}$ ) and line intensities (arbitrary units).

There was no need to calibrate the wavenumber scale as known CN lines were found to agree satisfactorily ( $\pm 0.005 \text{ cm}^{-1}$ ) with previous measurements (Ram et al. 2010).

The intensity scale proved more difficult to calibrate and this was carried out by simulating the spectrum using PGOPHER (Western 2007).

Table 4 lists the constants that were used to calculate the spectrum with PGOPHER.

The transition strength,  $S_{00}$  ( $1.391 \text{ D}^2$ ) was calculated from our Einstein A value for the 0–0 band of the E–A transition ( $A_{00} = 1.458 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ ), by using

from (Bernath 2005).

For this calculation, the estimated band origin  $\tilde{\nu}$  was taken to be  $6216 \text{ cm}^{-1}$  (see Table 4).

FeH の NSO 実験室発光スペクトルは、線位置 ( $\text{cm}^{-1}$ ) と線強度 (任意単位) を提供する WSpectra プログラムを使用して Voigt 線形関数に合わせました。

既知の CN ラインは以前の測定値 (Ram et al. 2010) と十分良く一致 ( $\pm 0.005 \text{ cm}^{-1}$ ) することが判明したため、波数スケールを校正する必要はありませんでした。

強度スケールの校正はより困難であることが判明し、これは PGOPHER (Western 2007) を使用してスペクトルをシミュレートすることによって実行されました。

表 4 に、PGOPHER でスペクトルを計算するために使用された定数を示します。

遷移強度  $S_{00}$  ( $1.391 \text{ D}^2$ ) は、E–A 遷移の 0–0 バンドのアインシュタイン A 値 ( $A_{00} = 1.458 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ ) から次 (Bernath 2005) を使用して計算されました。

$$S_{00} = \frac{3\varepsilon_0hc^3A_{00}}{16\pi^3\nu^3} = \frac{3.188583 \times 10^6 A_{00}}{\tilde{\nu}^3} \quad (3)$$

この計算では、推定バンド原点  $\tilde{\nu}$  は  $6216 \text{ cm}^{-1}$  と取りました (表 4 を参照)。

The simulated spectrum was not a very good match to the observed spectrum, but we only required estimates for the calculated Einstein  $A_{J'-J''}$  values of the observed lines.

The calculated Einstein  $A_{J'-J''}$  values were corrected with a  $\nu^3$  factor for the differences between observed and calculated frequencies.

シミュレートされたスペクトルは観察されたスペクトルとあまりよく一致しませんでした、観察された線の計算されたアインシュタイン  $A_{J'-J''}$  値の推定のみが必要でした。

計算されたアインシュタイン  $A_{J'-J''}$  値は、観測された周波数と計算された周波数の差について  $\nu^3$  係数を使用して補正されました。

In order to calibrate the intensity scale of the NSO laboratory spectrum we first had to select only the transitions which were known (i.e., calculated from Balfour et al. 2004).

This allowed us to determine the integrated cross-section ( $\int \sigma dv$ ) from the  $A_{J'-J''}$  value (Bernath 2005), with

NSO 実験室スペクトルの強度スケールを校正するには、まず既知の遷移 (つまり、Balfour et al. 2004 から計算) のみを選択する必要がありました。

次を用いて、 $A_{J'-J''}$  値 (Bernath 2005) から積分断面積 ( $\int \sigma dv$ ) を決定することができました。

$$\int \sigma dv = \frac{A_{J' \rightarrow J''} c^2}{8\pi \nu^2} \frac{2J' + 1}{2J'' + 1} \quad (4)$$

which was then used to calculate  $S'$  for each line

次に、これを使用して各線の  $S'$  を計算しました。

$$S' = \int \sigma dv \frac{2J'' + 1}{Q} \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)\right]. \quad (5)$$

The equations stated are given in SI units.

In order to allow a conversion of  $S'$  from SI units ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1} \text{ molecule}^{-1}$ ) into HITRAN units ( $\text{cm molecule}^{-1}$ ) a conversion factor of  $100 \text{ c}^{-1}$  has to be applied.

Pugh & Rao (1976) provide information for converting between various possible units for the line intensity  $S'$ .

記載された方程式は SI 単位で与えられます。

$S'$  を SI 単位 ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1} \text{ 分子}^{-1}$ ) から HITRAN 単位 ( $\text{cm 分子}^{-1}$ ) に変換できるようにするには、 $100 \text{ c}^{-1}$  の変換係数を適用する必要があります。

Pugh & Rao (1976) は、線強度  $S'$  のさまざまな単位を変換するための情報を提供しています。

We were then in a position to transform the laboratory intensities into HITRAN intensities by comparing them to the calculated intensities in HITRAN units.

This proved more difficult than it first seemed.

After detailed analysis of the laboratory line intensities it was discovered that they more closely resembled emission from FeH at 2200 K (as oppose to 2673 K) and this was the temperature used to calculate the intensities in HITRAN units.

The corresponding partition function is given by Dulick et al. (2003) as  $Q_{2200\text{K}} = 5534.78$ .

The observed intensities (S<sub>emission</sub>) were converted from emission to absorption (Nassar and Bernath 2003) by

その後、実験室の強度を HITRAN 単位で計算された強度と比較することで、HITRAN 強度に変換できるようになりました。

これは最初に思ったよりも難しいことが判明しました。

実験室の線強度を詳細に分析した結果、(2673 K とは対照的に) 2200 K での FeH からの発光によりよく似ていることが

判明しました。これは、HITRAN 単位で強度を計算するために使用される温度でした。  
 対応する分配関数は Dulick et al. (2003) によって  $Q_{2200K} = 5534.78$  と与えられています。  
 観測された強度 (放射) は、次の方法により放射から吸収に変換されました (Nassar and Bernath 2003)。

$$S_{\text{absorption}} = \frac{S_{\text{emission}}}{\nu^3 \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)} \quad (6)$$

The linear calibration factor was found to be  $7.968 \times 10^{21}$  (Figure 1).

The intensities of all of the lines in the laboratory spectrum of the E  $4\Pi - A \ 4\Pi$  region were then converted into HITRAN units (at 2200 K) for the final line list.

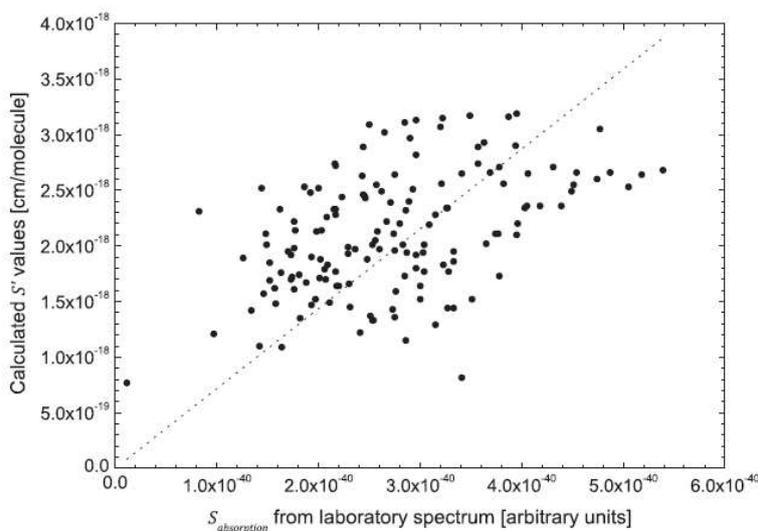
線形校正係数は  $7.968 \times 10^{21}$  であることがわかりました (図 1)。

次に、 $4\Pi - A \ 4\Pi$  領域の実験室スペクトルのすべてのラインの強度が、最終的なライン リスト用の HITRAN 単位 (2200 K) に変換されました。

**Table 5**  
 Sample Line List of the E  $4\Pi - A \ 4\Pi$  Transition of FeH

Wavenumber ( $\text{cm}^{-1}$ )	Intensity ( $\text{cm molecule}^{-1}$ )	E lower ( $\text{cm}^{-1}$ )	Einstein A ( $\text{s}^{-1}$ )	J lower ( $\text{cm}^{-1}$ )	Branch	$\Omega$ & Parity
...	...	...	...	...	...	...
6137.8061523	0.6618295E-18	2250.00				
6137.7275391	0.1444019E-18	2250.00				
6137.5366211	0.1247505E-17	1178.08	0.62512580E+05	0.350E+01	R	1.5f
6137.4711914	0.2174224E-17	3756.22	0.71171470E+05	0.185E+02	R	0.5f
6137.3930664	0.7319333E-19	2250.00				
6137.3613281	0.5026452E-18	2250.00				
6137.2729492	0.3660579E-18	2250.00				
6137.0297852	0.1381187E-17	3247.22	0.72471440E+05	0.175E+02	R	1.5e
6136.9233398	0.6917597E-18	2250.00				
6136.7304688	0.1066923E-17	2250.00				
...	...	...	...	...	...	...

(This table is available in its entirety in machine-readable and Virtual Observatory (VO) forms in the online journal. A portion is shown here for guidance regarding its form and content.)



**Figure 1.** Scatter plot of the calculated line strength values  $S'$  and the observed line strength values  $S_{\text{absorption}}$ . The calibration factor of  $7.968 \times 10^{21}$  is shown as the dotted line.

## 5. STELLAR MODELS

The spectral line synthesis of the FeH line opacity is done with the line formation computer code SYNTH3 (Kochukhov 2007). With this code, we are able to compute large spectral regions, including all lines in the line list and we account for blends. The pressure broadening was approximated by van de Waals broadening, which becomes important at effective temperatures below 3000 K, and is treated in the hydrogenic approximation (Schweitzer et al. 1996, and references therein). For this we need the ionization energy of FeH which we choose at 6 eV (Wende et al. 2009), although this value differs from the actual value, the effects on the model are negligible.

SYNTH3 accounts for H, He, and H<sub>2</sub> as collisional perturbers in the van de Waals broadening.

However to match observed line wings of FeH, it is still necessary to apply an enhancement factor as Schweitzer et al. (1996) did for other molecules.

An enhancement factor is commonly used for spectral synthesis of molecules and helps to account for collisional perturbations (Wende et al. 2010).

We use a factor of 2.5 which has been obtained by comparing model atmospheres to high-resolution spectra.

FeH 線不透明度のスペクトル線合成は、線形成コンピュータコード SYNTH3 (Kochukhov 2007) を使用して行われ  
ます。

このコードを使用すると、ラインリスト内のすべてのラインを含む大きなスペクトル領域を計算でき、ブレンドを考慮  
できます。

圧力広がりファン・デ・ワールス広がりによって近似され、これは 3000 K 未満の有効温度で重要となり、水素近似で  
(Schweitzer et al. 1996 およびその参考文献)扱われる。

このためには、6 eV で選択した FeH のイオン化エネルギーが必要です (Wende et al. 2009)。この値は実際の値とは異な  
りますが、モデルへの影響は無視できます。

SYNTH3 は、ファン・デ・ワールス広がりにおける衝突摂動物質として H、He、および H<sub>2</sub> を説明します。

ただし、観察された FeH のラインウィングと一致させるには、Schweitzer (1996) らが他の分子について行ったように増  
強係数を適用する必要があります。

増強係数は分子のスペクトル合成に一般的に使用され、衝突による摂動を説明するのに役立ちます (Wende et al. 2010)。  
ここではモデル大気を高解像度スペクトルと比較することによって得られた係数 2.5 を使用します。

The underlying atmosphere models are MARCS models (Gustafsson et al. 2008) with solar composition (Grevesse et al. 2007) and in the opacity sampling, all of the available atomic and molecular species were taken into account.

We create a sequence of models with effective temperatures of 2500 K, 2700 K, 2900 K, and 3100 K, and  $\log g = 5.0$ .

No dust is included in these calculations, but it would be important at effective temperatures below 2500 K.

At these low temperatures, we do not expect any significant influence from convective velocity fields and therefore we include no micro- or macro-turbulent broadening in the line formation (Wende et al. 2009).

基礎となる大気モデルは、太陽組成 (Grevesse et al. 2007) を備えた **MARCS モデル** (Gustafsson et al. 2008) であり、  
不透明度サンプリングでは、利用可能な原子および分子種がすべて考慮されました。

実効温度 2500 K、2700 K、2900 K、および 3100 K、 $\log g = 5.0$  の一連のモデルを作成します。

これらの計算には塵は含まれていませんが、2500 K 未満の実効温度では重要になります。

このような低温では、対流速度場からの重大な影響は予想されないため、線の形成に**マイクロまたはマクロ乱流の広がり**は  
**含めません** (Wende et al. 2009)。

## 6. RESULTS AND DISCUSSION

We have successfully produced a line list for the E 4Πi-A 4Πi region of FeH which can be applied to atmospheric models.

The line list contains assigned lines from Balfour et al. (2004) and the remaining lines are unassigned with an estimated average lower state energy of  $2250\text{ cm}^{-1}$ .

An error of  $\pm 5\%$  ( $\pm 112.5\text{ cm}^{-1}$ ) in the estimated lower state energy will result in an error of less than  $\pm 0.5\%$  in the calculated intensity for a temperature shift of  $\pm 100\text{ K}$ .

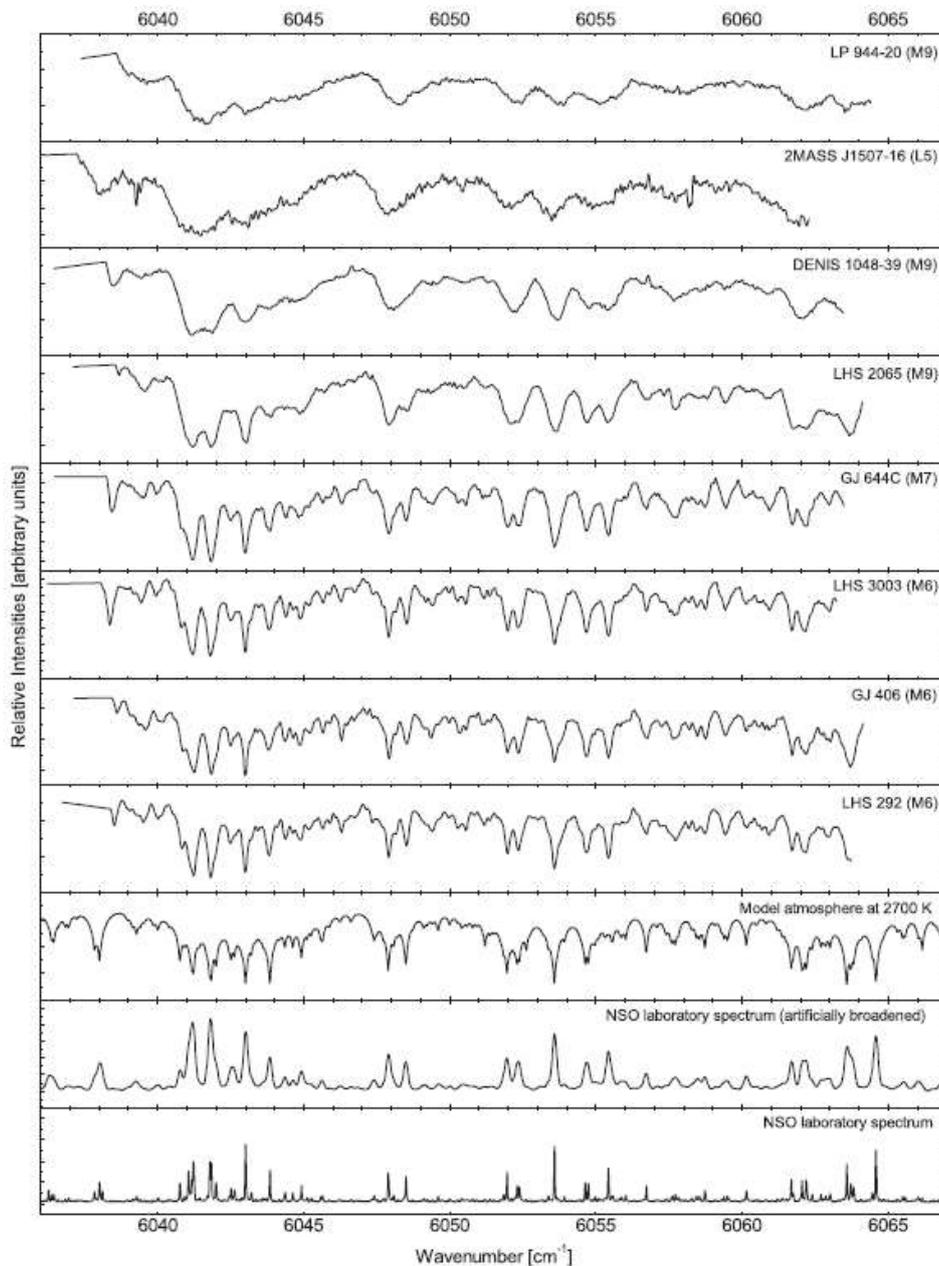
The assigned lines do not include the  $E\ 4\Pi-1/2-A\ 4\Pi-1/2$  subband because the lines could not be assigned with certainty (Balfour et al. 2004).

A sample of the FeH line list is shown in Table 5 and the full line list is available as supplementary material.

私たちは、大気モデルに適用できる FeH の  $E\ 4\Pi_i-A\ 4\Pi_i$  領域の線リストを作成することに成功しました。

線リストには、Balfour ら(2004) から割り当てられた線が含まれています。残りの線は  $2250\text{ cm}^{-1}$  という推定平均低位状態エネルギーは割り当てられていない。

推定された低位状態エネルギーの  $\pm 5\%$  ( $\pm 112.5\text{ cm}^{-1}$ ) の誤差は、 $\pm 100\text{ K}$  の温度シフトに対する計算強度の誤差は  $\pm 0.5\%$  未満になります。



**Figure 2.** Comparison of the SEDs of observations from the Gemini South observatory with the NSO laboratory spectrum and a model atmosphere containing FeH at 2700 K. Each object has been scaled and plotted on an arbitrary absorption axis.

割り当てられたラインには  $E^4\Pi_{-1/2}-A^4\Pi_{-1/2}$  サブバンドは含まれていません。これは、ラインを確実に割り当てることができなかつたためです (Balfour et al. 2004)。

FeH ライン リストのサンプルを表 5 に示します。完全なライン リストは補足資料として入手できます。

Figure 2 shows the observations obtained from the **Phoenix spectrograph on Gemini South**.

What is immediately apparent is the abundance of FeH lines in this region, with almost all of the absorption caused by FeH. Although some of the objects are rapid rotators and the lines suffer from rotational broadening, in particular, LP 944, 2MASS 1507, and DENIS 1048, it is still clear that the FeH absorption lines make a significant contribution to the SED in this region. From these observations, we have been able to successfully identify lines due to the  $E^4\Pi-A^4\Pi$  transition in the near-infrared spectra of L and M dwarfs.

A single setting of the Phoenix spectrograph gave coverage only in the relatively narrow  $6036-6064\text{ cm}^{-1}$  region.

Although the region is not large, comparison of the observed SEDs with the NSO laboratory spectrum and the 2700 K model we are able to assign almost every feature to the FeH molecule.

**If we only include the assigned FeH lines into our model, then the spectra are not reproduced, however, inclusion of the unassigned FeH lines gives a very reasonable agreement with the dwarf spectra (see specifically LHS 292 in Figure 2).**

図 2 は、ジェミニ南のフェニックス分光器から得られた観測結果を示しています。

すぐにわかるのは、この領域に FeH 線が豊富に存在し、吸収のほとんどすべてが FeH によって引き起こされることです。

一部の天体は高速回転体であり、特に LP 944、2MASS 1507、DENIS 1048 などの線は回転広がりを起こしていますが、FeH 吸収線がこの領域の SED に大きく寄与していることは依然として明らかです。

これらの観測から、L 矮星と M 矮星の近赤外スペクトルにおける  $E^4\Pi-A^4\Pi$  遷移による線を特定することに成功しました。

フェニックス分光器の単一設定では、比較的狭い  $6036 \sim 6064\text{ cm}^{-1}$  領域のみをカバーできました。

領域は大きくありませんが、観察された SED を NSO 実験室スペクトルおよび 2700 K モデルと比較すると、ほぼすべての特徴を FeH 分子に割り当てることができます。

**割り当てられた FeH ラインのみをモデルに含めると、スペクトルは再現されませんが、割り当てられていない FeH ラインを含めると、矮星スペクトルとの非常に合理的な一致が得られます (特に図 2 の LHS 292 を参照)。**

The conversion from arbitrary line intensities to HITRAN line intensities as discussed in Figure 1 shows more scatter than expected.

The straight line fit is not as good as we would have liked and there are many reasons why this could be the case.

We analyzed the laboratory spectrum in detail to try and determine the effective temperature, but we obtained different metal hydrides are known to have complicated perturbed spectra and calculations of both line positions and line intensities are unreliable.

The E and A states are not isolated and suffer from extensive perturbations which affect both line positions and line intensities. Calculations with programs based on effective Hamiltonians such as PGOPHER do not work well at high-resolution for FeH.

図 1 で説明したように、任意のライン強度から HITRAN ライン強度への変換では、予想よりも大きなばらつきが見られます。

直線のフィット感は期待したほど良好ではありませんが、これには多くの理由が考えられます。

私たちは実効温度を決定するために実験室スペクトルを詳細に分析しましたが、さまざまな金属水素化合物は複雑な摂動スペクトルを持つことが知られており、線の位置と線の強度の両方の計算は信頼できないことがわかりました。

E 状態と A 状態は分離されておらず、ラインの位置とラインの強度の両方に影響を与える広範な摂動の影響を受けます。PGOPHER などの実効ハミルトニアンに基づくプログラムによる計算は、FeH の高解像度ではうまく機能しません。

The intensity calibration factor ( $7.968 \times 1021$ ) was obtained by fitting the points shown in Figure 1. Although the points show considerable scatter, the relative intensities of the lines are based mainly on experimental observations of a sample with a temperature close to that of a late-M or early-L dwarfs. The ab initio calculation of the Einstein  $A_{00}$  value is used to provide an absolute intensity calibration. Due to the clear influence of FeH on the SEDs of late-M and -L dwarfs our E  $4\Pi$ -A  $4\Pi$  ( $6320$ - $4990$   $\text{cm}^{-1}$ ) line list should find application in spectral simulations.

強度校正係数 ( $7.968 \times 10^{21}$ ) は、図 1 に示す点をフィッティングすることによって取得されました。点にはかなりのばらつきが見られますが、線の相対強度は主に、M 後期または L 初期の矮星の温度に近い温度のサンプルの実験的観察に基づいています。

アインシュタイン  $A_{00}$  値の ab initio 計算は、絶対強度の校正を行うために使用されます。

後期 M 型および後期 L 型矮星の SED に対する FeH の明らかな影響により、E  $4\Pi$ -A  $4\Pi$  ( $6320$ - $4990$   $\text{cm}^{-1}$ ) 線リストはスペクトル シミュレーションに応用できるはずで

## 7. CONCLUSION

We have obtained a line list at  $2200\text{K}$  for the E  $4\Pi$ -A  $4\Pi$  FeH transition near  $1.6\mu\text{m}$  based on experimental measurements and an ab initio calculation of the band strength.

The FeH line list can be used in model atmospheres of cool stars and brown dwarfs.

The line list contains assigned lines from Balfour et al. (2004) and additional unassigned lines which are included with an estimated average lower state energy ( $2250$   $\text{cm}^{-1}$ ).

実験測定とバンド強度の非経験的計算に基づいて、 $1.6\mu\text{m}$  付近の E  $4\Pi$ -A  $4\Pi$  FeH 遷移の  $2200\text{K}$  での線リストを取得しました。

FeH ラインリストは、クールスターや褐色矮星の大気モデルに使用できます。

線リストには、Balfour ら(2004)から割り当てられた線が含まれています。それと、推定平均低位状態エネルギー ( $2250$   $\text{cm}^{-1}$ ) に含まれる追加の未割り当ての行があります。

Observations near  $1.6\mu\text{m}$  were made at high-resolution with the Phoenix spectrograph at Gemini South on L and M dwarfs and almost every feature can be assigned to FeH.

When we include the FeH line list in a model atmosphere we are able to match the observed SEDs.

We believe that this shows the need to include the E - A FeH line list when modeling late-M and -L dwarfs.

ジェミニ南にあるフェニックス分光器を使用して、L 矮星と M 矮星を高解像度で  $1.6\mu\text{m}$  付近の観測が行われ、ほぼすべての特徴が FeH に帰属することができました。

FeH ラインリストをモデル大気中に含めると、観測された SED と一致させることができます。

これは後期 M 型矮星と後期 L 型矮星をモデル化する際に E-A FeH ラインリストを含める必要があることを示していると考えられます。

We thank the Gemini South Observatory staff for their technical support during observations. Support for this work was provided by the NASA laboratory astrophysics program and a Department of Chemistry (University of York) studentship. R. J. Hargreaves thanks the Institute of Physics (IOP) and the Department of Physics (University of York) for travel support. A. Seifahrt acknowledges financial support from DFG under grant RE 1664/4-1 and from NSF under grant AST07-08074. S. Wende acknowledges financial support from the DFG Research Training Group GrK-1351 "Extrasolar Planets and Their Host Stars."

Facility: Gemini:South (Phoenix)

## REFERENCES

- Balfour, W. J., Brown, J. M., & Wallace, L. 2004, *J. Chem. Phys.*, **121**, 7735
- Bauschlicher, C. W. 1995, *Theor. Chim. Acta*, **92**, 183
- Bernath, P. F. 2005, *Spectra of Atoms and Molecules* (2nd. ed.; Oxford: Oxford Univ. Press)
- Bochanski, J. J., West, A. A., Hawley, S. L., & Covey, K. R. 2007, *AJ*, **133**, 531
- Burgasser, A. J., Geballe, T. R., Leggett, S. K., Kirkpatrick, J. D., & Golimowski, D. A. 2006, *ApJ*, **637**, 1067
- Carleer, M. R. 2001, *Proc. SPIE*, **4168**, 337
- Cushing, M. C., Rayner, J. T., Davis, S. P., & Vacca, W. V. 2003, *ApJ*, **582**, 1066
- Dulick, M., Bauschlicher, Jr., C. W., Burrows, A., Sharp, C. M., Ram, R. S., & Bernath, P. 2003, *ApJ*, **594**, 651
- Dunning, T. H. 1989, *J. Chem. Phys.*, **90**, 1007
- Grevesse, N., Asplund, M., & Sauval, A. J. 2007, *Space Sci. Rev.*, **130**, 105
- Gustafsson, B., Edvardsson, B., Eriksson, K., Jørgensen, U. G., Nordlund, Å., & Plez, B. 2008, *A&A*, **486**, 951
- Harrison, J. J., & Brown, J. M. 2008, *ApJ*, **686**, 1426
- Harrison, J. J., Brown, J. M., Chen, J., Steimle, T. C., & Sears, T. J. 2008, *ApJ*, **679**, 854
- Hess, B. A. 1986, *Phys. Rev. A.*, **33**, 3742
- Hinkle, K. H., Cuberly, R., Gaughan, N., Heynssens, J., Joyce, R., Ridgway, S., Schmitt, P., & Simmons, J. E. 1998, *Proc. SPIE*, **3354**, 810
- Kirkpatrick, J. D. 2005, *ARA&A*, **43**, 195
- Kirkpatrick, J. D., et al. 1999, *ApJ*, **519**, 802
- Knowles, P. J., & Werner, H.-J. 1988, *Chem. Phys. Lett.*, **145**, 514
- Kochukhov, O. P. 2007, *Proc. Int. Conf. Physics of Magnetic Stars*, ed. I. I. Romanyuk & D. O. Kudryavtsev, 109
- Langhoff, S. R., & Bauschlicher, C. W. 1990, *J. Mol. Spectrosc.*, **141**, 243
- Nassar, R., & Bernath, P. 2003, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **82**, 279
- Nordh, H. L., Lindgren, B., & Wing, R. F. 1977, *A&A*, **56**, 1
- Partridge, H. 1989, *J. Chem. Phys.*, **90**, 1043
- Phillips, J. G., Davis, S. P., Lindgren, B., & Balfour, W. J. 1987, *ApJS*, **65**, 721
- Pugh, L. A., & Rao, K. N. 1976, *Molecular Spectroscopy: Modern Research*, Vol. III (New York: Academic)
- Ram, R. S., Wallace, L., & Bernath, P. F. 2010, *J. Mol. Spectrosc.*, in press
- Reiners, A., & Basri, G. 2006, *AJ*, **131**, 1806
- Rothman, L. S., et al. 2009, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **110**, 533
- Schweitzer, A., Hauschildt, P. H., Allard, F., & Basri, G. 1996, *MNRAS*, **283**, 821
- Wallace, L., & Hinkle, K. 2001a, NSO Technical Report 01-001 (Tucson, AZ: NSO)
- Wallace, L., & Hinkle, K. 2001b, *ApJ*, **559**, 424
- Wende, S., Reiners, A., & Ludwig, H.-G. 2009, *A&A*, **508**, 1429
- Wende, S., Reiners, A., Seifahrt, A., & Bernath, P. F. 2010, *A&A*, in press
- Werner, H.-J., & Knowles, P. J. 1988, *J. Chem. Phys.*, **89**, 5803
- Werner, H.-J., & Knowles, P. J. 2002, MOLPRO, Univ. Birmingham (with contributions from Amos R. D. et al.)
- Western, C. M. 2007, PGOPHER (v5.2.977), A Program for Simulating Rotational Structure, School of Chemistry, Univ. Bristol (<http://pgopher.chm.bris.ac.uk/>)
- Wing, R. F., Cohen, J., & Brault, J. W. 1977, *ApJ*, **216**, 659
- Wing, R. F., & Ford, W. K. 1969, *PASP*, **81**, 527