

На правах рукописи



Чжан Фанцэ

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛ ТИПА
АСИММЕТРИЧНОГО ВОЛЧКА: СЕРОВОДОРОД, ЭТИЛЕН И ИХ ИЗОТОПОЛОГИ**

01.04.05 – Оптика

**Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Томск–2021

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор

Уленков Олег Николаевич

Официальные оппоненты:

Быков Александр Дмитриевич, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория молекулярной спектроскопии, главный научный сотрудник;

Черепанов Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», физический факультет, кафедра оптики и спектроскопии, заведующий кафедрой.

Защита диссертации состоится «**14**» декабря 2021 г. в **14** час. **30** мин.

на заседании диссертационного совета ДС.ТПУ.02, созданного на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 2, стр. 32, аудитория 11.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» и на сайте: dis.tpu.ru

Автореферат разослан « » _____ 2021 г.

Ученый секретарь диссертационного совета ДС.ТПУ.02:



Фомченко Анна Леонидовна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Спектроскопия, которая развивается с непрерывным технологическим прогрессом в науке, является традиционным, но перспективным научным направлением. Она играет очень важную роль в понимании человечеством микромира. Спектроскопия является широко используемым экспериментальным методом исследования малых частиц, таких как ядра, атомы и молекулы. Она основана на взаимодействии фотона и частицы, которая имеет квантованные внутренние энергии.

Начало изучения спектроскопии восходит к 17 веку, когда Ньютон разделил белый свет на семь цветов от красного до фиолетового с помощью призмы. В 1850-х годах Кирхгоф и Бунзен определили качественный химический состав сложных смесей по виду их спектров. Затем учёные начали изучать количественную связь между линиями излучения атомов и получили некоторые эмпирические формулы. До тех пор, пока Бор не ввел понятие кванта в спектроскопию, спектроскопия развивалась как эмпирическая наука. Спектр связан со структурой микроскопических частиц (молекул, атомов, ядер) вещества, поэтому спектроскопия занимается изучением взаимодействия вещества и электромагнитного излучения. Создание квантовой механики в начале 20-го века дало спектроскопии прочную теоретическую основу и позволило ей процветать. Спектроскопия стала мощным инструментом изучения структуры вещества. Изучение спектров началось с двухатомных молекул. Люди проводили систематические исследования двухатомных молекул, и в результате, на основе обширных и правильных экспериментов, была создана полная и надежная теория. Затем, в 1930-х годах, развилась многоатомная молекулярная спектроскопия. В 1940-х годах Герцберг систематически изложил теорию молекулярных спектров и молекулярной структуры в своих книгах [1], которые до сих пор являются важными источниками изучения молекулярной спектроскопии.

Данная диссертация посвящена изучению газообразных многоатомных молекул. Молекулярный спектр содержит большой объём информации, включая положение (центральную частоту), интенсивность и форму линии спектра. Эта информация связана с уровнем энергии, дипольным моментом перехода изучаемой молекулы, температурой и давлением образца. Изучение многоатомных молекул веществ, находящихся в газообразной фазе, позволяет не только получить информацию о внутренних свойствах молекул, но и разработать различные инструменты контроля. Регистрация спектра практически не повреждает образец, поэтому метод исследования свойств вещества с помощью спектроскопии имеет много преимуществ: он селективен, высокочувствителен и бесконтактен. При более глубоких исследованиях молекулярной структуры необходимы более точные экспериментальные данные, а также более чувствительные методы спектрального обнаружения. Всё это требует усовер-

шенствования техники спектроскопии для более высокой точности измерения, следовательно изучение молекулярной спектроскопии высокого разрешения является актуальной задачей.

Хорошо известно, что кванты определённой частоты имеют определённые энергии. Если энергия кванта поглощается при прохождении через исследуемое вещество, это означает, что его энергия передаётся веществу. Переход происходит между двумя состояниями с разными энергиями, при этом частица поглощает или испускает квант излучения. Измерив энергию этого кванта, можно получить информацию о внутренней структуре и силовых полях частицы. В зависимости от причин возникновения этого физического явления, например, в результате ядерного, атомного или молекулярного процесса, энергия кванта будет различна. Область науки, которая изучает такого рода процессы, происходящие в молекулах, на основе исследования их экспериментальных спектров называется спектроскопией.

Возможные переходы между уровнями энергии для молекулы, которые происходят: (А) чисто вращательные переходы, когда поглощение излучения приводит к более высокому уровню вращательной энергии в пределах одного колебательного состояния; (Б) вращательно-колебательные переходы, которые приводят к изменению колебательных энергетических уровней; (С) вращательно-колебательные-электронные переходы, то есть, изменение электронной энергии молекулы.

Уровни энергии можно оценивать в следующем порядке: (А) < (Б) < (С). Та часть спектроскопии, которая занимается исследованием колебательно-вращательных переходов, расположенных в инфракрасной области, называется инфракрасной (ИК) спектроскопией. ИК-спектроскопия может использоваться для определения функциональных групп в образцах, поскольку разные функциональные группы поглощают ИК-излучение с разной частотой. Кроме того, каждая молекула имеет характерный спектр. Молекулы можно идентифицировать путём сравнения пиков поглощения с информацией в спектральных базах данных, поэтому ИК-спектроскопия широко используется для идентификации и анализа структуры различных веществ (включая органические и неорганические соединения). Можно сказать, что ИК-спектроскопия является одним из наиболее распространённых и широко используемых спектроскопических методов.

Колебательно-вращательная спектроскопия высокого разрешения является одним из основных методов изучения молекулярной структуры и молекулярной динамики. Среди различных методов спектроскопии высокого разрешения Фурье-спектроскопия обладает такими характеристиками, как высокое разрешение, низкий уровень шума и т.д., поэтому она является широко распространённым методом спектрального исследования в инфракрасном диапазоне. Фурье-спектрометр разработан на основе интерферометра Майкельсона, который

изучает спектр путём измерения интерферограммы пучка и выполнения на нём преобразования Фурье. Фурье-спектрометр имеет большой диапазон измерения и высокую скорость регистрации, и поэтому в настоящее время является высоко коммерциализированным научно-исследовательским инструментом. Спектры, используемые в диссертационном исследовании, были зарегистрированы с помощью Фурье-спектрометров Bruker IFS-120HR и Bruker IFS-125HR.

В данной диссертации на основе высокоточных экспериментальных спектральных данных определяются переходы между колебательно-вращательными состояниями различных многоатомных молекул. Вращательные и колебательные движения молекул, а также их энергии, не являются независимыми друг от друга. Кроме того, согласно классической механике, отдельные межмолекулярные движения могут быть связаны друг с другом. Связь приводит к передаче энергии между состояниями и, как следствие, к перераспределению интенсивностей линий в спектре. Описать эту связь позволяет анализ резонансных взаимодействий различных колебательных состояний, который является одним из основных пунктов данной диссертации.

Объект исследования.

Диссертационная работа посвящена теоретическому и экспериментальному анализу спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка: полностью дейтерированной модификации молекулы этилена C_2D_4 и различных изотопозамещённых модификаций молекулы сероводорода $H_2^M S$ ($M = 32, 33$ и 34).

Этилен, простейший олефин, является одним из наиболее производимых химических продуктов в мире. С точки зрения синтетических материалов, этилен широко используют в производстве синтетических волокон, синтетического каучука (этилен-пропилен-каучук) и синтетических пластмасс (полиэтилен, поливинилхлорид, полистирол и т.д.). В органическом синтезе этилен широко используется в синтезе многих основных сырьевых материалов для органического синтеза, таких как этанол, этиленгликоль, ацетальдегид, уксусная кислота, пропионовый альдегид, пропионовая кислота и т.д. Таким образом, этиленовая промышленность является основной отраслью нефтехимической промышленности. В области экологии и сельского хозяйства этилен является признанным гормоном растений, который можно использовать как средство для созревания фруктов и овощей. Он также имеет исключительную важность в пищевой и органической химии. Этилен существует не только на Земле, но и в космосе. Молекула C_2H_4 была обнаружена в околозвездном газе, окружающем сверхгигантскую звезду IRC +10216 (отметим, что две линии колебательно-вращательной полосы ν_7 около 949 см^{-1} были зарегистрированы в поглощении и информация о температуре и

плотности рассчитывалась по интенсивностям этих линий).

Сероводород – это газообразное соединение, присутствующее в земной атмосфере. Вместе с различными сероорганическими газами H_2S играет ключевую роль в формировании климата Земли. Естественным источником газа являются вулканы и геотермальные источники, водно-болотные угодья и солончаки, где он производится бактериями во время анаэробного разложения органических соединений серы. Помимо природных источников, атмосферный H_2S возникает в результате животноводства и промышленных процессов, таких как сжигание биомассы и ископаемого топлива. Сероводород в атмосфере оказывает большое влияние на физиологические функции растений. Высокие концентрации сероводорода могут отрицательно сказаться на росте растений, но сероводород, поглощаемый листьями, способствует серному питанию растений. Сероводород присутствует в сверхгигантской звезде IRC +10216, а также наблюдался над облаками в атмосфере Урана, так что его роль в исследовании внеземных галактик весьма существенна.

Именно потому, что этилен и сероводород занимают важное место в различных областях науки и приложениях, необходимо изучать указанные молекулы разными способами. В рамках данной диссертации они изучаются методом молекулярной спектроскопии высокого разрешения. Причина выбора изотопозамещённых модификаций молекул (в том числе полностью дейтерированной молекулы этилена – C_2D_4 , H_2^{33}S и H_2^{34}S) заключается в том, что исследование изотопологов позволяет увеличить количество информации из эксперимента о спектроскопических параметрах и, следовательно, параметрах гамильтониана и получить зависимость между молекулярными и спектроскопическими постоянными основной и изотопозамещённой модификаций молекулы.

Все вышесказанное определяет **актуальность выполненных исследований**.

Степень изученности проблемы.

Исследование колебательно-вращательных спектров высокого разрешения молекулы C_2D_4 выполнялось ранее в работах [2–10]. Впервые полностью дейтерированная модификация молекулы этилена рассматривалась в работе [2]. В этом исследовании были определены молекулярные константы и спектроскопические параметры основного колебательного состояния из анализа полосы ν_{11} . Дункан и Райт [3] улучшили параметры основного состояния молекулы C_2D_4 путём комбинированного анализа данных инфракрасного спектра [2] и спектров комбинационного рассеяния [4]. Были исследованы спектры комбинационного рассеяния фундаментальных полос ν_1 и ν_5 молекулы C_2D_4 с учётом резонанса Кориолиса с-типа между двумя исследуемыми полосами [5]. В работе [6] были изучены спектры пяти полос молекулы C_2D_4 (фундаментальные полосы: ν_{11} , ν_9 и комбинационные полосы $\nu_1 + \nu_{11}$, $\nu_5 + \nu_{11}$, $\nu_7 + \nu_9$

в диапазоне выше 2000 см^{-1} с разрешением $0,02\text{ см}^{-1}$. В работе [7] рассматривался инфракрасный спектр молекулы C_2D_4 в диапазоне ниже 800 см^{-1} с разрешением $0,05\text{ см}^{-1}$. Спустя несколько лет, в работе [8] исследовался инфракрасный спектр высокого разрешения молекулы этилена C_2D_4 в диапазоне ниже 1200 см^{-1} . Тан и др. [9] провели анализ инфракрасного спектра фундаментальной полосы ν_{12} молекулы C_2D_4 в диапазоне $1030\text{--}1130\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,004\text{ см}^{-1}$. Спустя более чем 10 лет, Тан и соавторы [10] представили результаты дальнейших измерений и анализа полосы ν_{12} молекулы C_2D_4 в диапазоне $1017\text{--}1137\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,0063\text{ см}^{-1}$.

Обширные спектроскопические исследования молекулы сероводорода проводились в течение многих лет в микроволновом, субмиллиметровом и инфракрасном диапазонах [11–17]. В последний раз вторая гексада (полосы $2\nu_1+\nu_2$, $\nu_1+\nu_2+\nu_3$, $\nu_1+3\nu_2$, $3\nu_2+\nu_3$, $5\nu_2$, $\nu_2+2\nu_3$) молекулы H_2^{32}S рассматривалась в [11], где проводился анализ их энергетической структуры (ранее некоторые из этих полос обсуждались в [12–15]). Молекула H_2^{34}S обсуждалась только в [14]. Насколько нам известно, спектры молекулы H_2^{33}S ранее не исследовались. Ранее полоса $4\nu_2$ молекулы H_2S обсуждалась в работе Быкова и др. [15], а информация о колебательно-вращательных энергетических уровнях колебательного состояния (040) представлена в [16, 17].

Исходя из вышеизложенного, **целью** диссертации является исследование спектров молекул типа асимметричного волчка на примере молекул C_2D_4 и H_2^MS ($M = 32, 33$ и 34).

Для реализации поставленной цели необходимо было решить следующие конкретные **задачи**:

- усовершенствование подхода, позволяющего описывать сложную колебательно-вращательную структуру спектров исследуемых молекул, и на основе этого подхода усовершенствование алгоритма и компьютерной программы;
- формулировка экспериментальных условий для регистрации (впервые или с лучшими характеристиками, чем ранее) спектров высокого разрешения исследуемых молекул и интерпретация полученных спектров.
- уточнение вращательных постоянных и параметров центробежного искажения основного состояния молекулы C_2D_4 ;
- решение обратной спектроскопической задачи для исследуемых полос молекул C_2D_4 и H_2^MS ($M = 32, 33$ и 34) с целью определения параметров эффективного гамильтониана;
- измерение экспериментальных интенсивностей спектральных линий поглощения полос $4\nu_2$ и $5\nu_2$ молекулы H_2^{32}S и на этой основе определение параметров эффективного дипольного момента.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Описание колебательно-вращательной структуры полос взаимодействующих состояний ($v_4 = 1$), ($v_7 = 1$), ($v_{10} = 1$) и ($v_{12} = 1$) молекулы C_2D_4 с точностью близкой к экспериментальной возможно лишь при учёте между ними резонансных взаимодействий Кориолиса различных типов, а также уточнения параметров основного состояния.
2. Применительно к молекуле H_2^MS модифицированный алгоритм и созданная на его основе программа для анализа спектров молекулы симметрии типа C_{2v} позволяют корректно описывать колебательно-вращательную структуру полос с точностью, сопоставимой с погрешностью эксперимента.
3. Набор параметров эффективного дипольного момента, определённый на основе разработанного пакета программ, позволяет восстанавливать абсолютные значения интенсивностей линий высоко-возбуждённых полос $4\nu_2$ и $5\nu_2$ молекулы $H_2^{32}S$ с точностью не хуже, чем 3-4 %.

Степень достоверности научных положений и результатов, полученных в работе, подтверждается:

- строгостью физико-математических моделей и методов;
- согласованностью теоретически рассчитанных результатов и экспериментальных данных, как впервые полученных в настоящем исследовании, так и ранее известных в литературе;
- приведёнными обоснованными выводами причин расхождения теоретических результатов и экспериментальных данных;
- возможностью с помощью полученных параметров, позволяющих восстанавливать спектры с точностями порядка эксперимента, предсказывать переходы, не идентифицированные в эксперименте.

Научная новизна представленных результатов определяется следующими моментами:

- на основе разработанного алгоритма усовершенствована программа для анализа вращательной структуры молекул типа асимметричного волчка с учётом различного типа резонансных взаимодействий между колебательными состояниями;
- уточнены параметры основного состояния молекулы этилена C_2D_4 с учётом максимальных значений квантовых чисел $J^{max.} = 44$ и $K_a^{max.} = 22$;
- впервые проведено исследование вращательной структуры “запрещённой” полосы ν_4 молекулы C_2D_4 ;

- определены параметры диагональных блоков эффективного гамильтониана для четырёх колебательных состояний ($v_4 = 1$), ($v_7 = 1$), ($v_{10} = 1$) и ($v_{12} = 1$) молекулы C_2D_4 , а также параметры резонансных взаимодействий;
- проведено исследование второй гексады молекулы $H_2^M S$ ($M = 32, 33$ и 34). Следует отметить, что переходы полосы $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ молекулы $H_2^{33}S$ были проинтерпретированы впервые;
- проведено исследование полосы $4\nu_2$ молекул $H_2^{32}S$ и $H_2^{34}S$. Следует отметить, что для молекулы $H_2^{34}S$ переходы полосы $4\nu_2$ найдены впервые. Определены параметры эффективного гамильтониана полосы $4\nu_2$;
- измерены экспериментальные интенсивности линий полос $4\nu_2$ и $5\nu_2$ молекулы $H_2^{32}S$ и определены параметры эффективного дипольного момента.

Научная ценность:

- усовершенствование методики решения обратной задачи для сильно взаимодействующих колебательных состояний позволило достигнуть точности близкой к экспериментальной;
- получена новая информация о вращательной структуре спектров высокого разрешения молекулы C_2D_4 в диапазоне $600-1150\text{ см}^{-1}$, включая структуру “запрещённой” полосы ν_4 ;
- параметры эффективного гамильтониана молекул C_2D_4 и $H_2^M S$ ($M = 32, 33$ и 34) можно использовать для предсказания частот переходов, относящихся к полосам в ранее не изученных диапазонах.

Практическая значимость:

- уточненные параметры основного состояния позволяют получить более точные результаты для исследования всех типов полос молекулы этилена C_2D_4 ;
- полученная из спектров высокого разрешения молекул C_2D_4 и $H_2^M S$ ($M = 32, 33$ и 34) высокоточная информация является важным дополнением к имеющейся информации в базах спектральных данных.

Внедрение результатов.

Результаты, полученные в рамках данного диссертационного исследования использовались при выполнении работ по программе повышения конкурентоспособности Национального исследовательского Томского политехнического университета ВИУ-ИШФВП-189/2020 и гранту Российского фонда фундаментальных исследований № 19-32-90069. Разработанный в

ходе выполнения настоящей диссертационной работы метод исследования тонкой энергетической структуры спектров молекул и вычислительные пакеты программ, могут использоваться в организациях, специализирующихся в области спектроскопии высокого разрешения молекул, проблем мониторинга атмосферы и газоанализа, например, в таких как: Томский государственный университет, Институт оптики атмосферы СО РАН (г. Томск), Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, Институт прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институт спектроскопии РАН (г. Троицк Московской области).

Личный вклад автора при выполнении работы:

- формирование цели и постановка задачи осуществлялись совместно с научным руководителем д. ф.-м. н., проф. О.Н. Уленевым;
- разработка алгоритма и создание на его основе программы для молекул типа асимметричного волчка, применяемая для исследования спектров сильно взаимодействующих полос, выполнены совместно с д. ф.-м. н., доцентом Е.С. Бехтеревой;
- уточнение параметров эффективного гамильтониана основного состояния молекулы C_2D_4 сделано совместно с к. ф.-м. н., PhD О.В. Громовой;
- исследование вращательной структуры 4 колебательных состояний молекулы C_2D_4 в диапазоне $600-1150\text{ см}^{-1}$ проводилось совместно с к. ф.-м. н., PhD А.Л. Фомченко;
- проведение исследований вращательной структуры второй гексады молекулы $H_2^M S$ ($M = 32, 33$ и 34) выполнено совместно с О.Н. Уленевым и О.В. Громовой;
- проведение исследований вращательной структуры $4\nu_2$ молекул $H_2^{32}S$ и $H_2^{34}S$ выполнено совместно с О.Н. Уленевым и Е.С. Бехтеревой;
- решение обратных спектроскопических задач для всех исследуемых состояний было выполнено совместно с О.Н. Уленевым и О.В. Громовой;
- измерение интенсивностей линий полос $4\nu_2$ и $5\nu_2$ молекулы $H_2^{32}S$ и определение соответствующих параметров эффективных дипольных моментов выполнены совместно с Е.С. Бехтеревой и к. ф.-м. н. Н.И. Распоповой.

Работа выполнялась при финансовой поддержке:

- ВИУ-ИШФВП-189/2020 «Разработка физических основ и приложения метода определения парциальных давлений (концентраций) отдельных изотопологов молекул в их смеси в интересах проблем астрофизики и планетологии»;
- РФФИ № 19-32-90069 «Исследование спектров высокого разрешения сероводорода и его изотопологов: энергетическая структура, интенсивности и полуширины линий колебательно-вращательных спектров».

Апробация результатов.

Основные результаты диссертации опубликованы в трудах российских и международных конференций, где они были представлены как в виде устных, так и в виде постерных докладов, а именно на:

- 12-ой международной конференции «перспективы развития фундаментальных наук» (Томск, Россия, 2015);
- 21-ой всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Омск, Россия, 2015);
- 24-ом международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Дижон, Франция, 2015);
- 22-ой всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Ростов-на-Дону, Россия, 2016);
- 25-ой международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Бильбао, Испания, 2018);
- 25-ой всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Крым, Россия, 2019);
- 26-ом международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Дижон, Франция, 2019);
- 26-ой всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Уфа, Россия, 2020);
- международной конференции Физика.СПб/2020 (Санкт-Петербург, Россия, 2020);
- 18-ой международной конференции «Перспективы развития фундаментальных наук» (Томск, Россия, 2021).

Публикации.

По материалам диссертации опубликовано 16 работ, в том числе 6 статей в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в котором должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук (из них 3 статьи в зарубежных научных журналах Q1, индексируемых Web of Science и Scopus, и 3 статьи в российских научных журналах, переводные версии которых индексируются Web of Science и Scopus) и 10 публикаций в сборниках материалов международных и российских научных конференций.

Структура и объём диссертации.

Диссертационная работа состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы из 87 наименований. Общий объём работы – 133 страницы, включая 20 рисунков и 34 таблицы.

Содержание работы.

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформированы цели и задачи диссертационной работы, представлены научные положения, выносимые на защиту, научная ценность, новизна, практическая значимость и краткий обзор литературы о степени изученности проблемы другими исследователями. а также изложены структура диссертации и описание содержания глав.

Первая глава носит обзорный характер. Глава содержит пять параграфов. Описаны основные подходы и некоторые методы теории колебательно-вращательной спектроскопии, лежащие в основе оригинальной части работы, в частности, описан метод построения колебательно-вращательного гамильтониана, описывающего произвольную многоатомную молекулярную систему, переход к моделям эффективных операторов гамильтониана и теория изотопозамещения, в связи с тем, что изотопозамещённые модификации молекул исследованы в данной работе. Также приведены основные сведения из теории интенсивностей спектральных линий и эффективного дипольного момента.

Вторая глава посвящена теоретическому анализу экспериментальных колебательно-вращательных спектров молекулы C_2D_4 , зарегистрированных с существенно лучшими экспериментальными характеристиками, чем ранее. Глава содержит четыре параграфа.

В *параграфе 2.1* описываются теоретические характеристики молекулы C_2D_4 , представлена таблица симметрии и характеров неприводимых тензорных операторов, применимых для точечной группы симметрии D_{2h} . Описаны правила отбора для каждого типа полосы и модель гамильтониана, которая учитывает резонансные взаимодействия между четырьмя колебательными состояниями.

В *параграфе 2.2* описаны детали эксперимента при регистрации инфракрасных спектров молекулы C_2D_4 в диапазоне $600-1150\text{ см}^{-1}$. Приводится описание и интерпретация полученных экспериментальных спектров.

В *параграфе 2.3* представлены результаты улучшения параметров основного колебательного состояния молекулы C_2D_4 . Как хорошо известно, корректная информация об основном колебательном состоянии в спектроскопии является базой, с которой начинается исследование любого спектра молекулы. Поэтому структура основного колебательного состояния должна быть известна с хорошей точностью.

Информация о вращательной структуре основного состояния молекулы C_2D_4 , известная до этого исследования (см., например, недавнюю работу [18]), являлась недостаточно точной. Параметры основного состояния в работе [18] были определены из анализа только a -типа полосы ν_{12} . По этой причине значения квантового числа K_a нижних вращательных состояний разрешённых переходов в P -, Q - и R -ветвях одинаковы. На самом деле это эквивалентно использованию комбинационных разностей только с $\Delta K_a = 0$. В данном исследовании вращательная структура основного состояния рассмотрена на основе анализа полос как ν_{12} , так и ν_7 . В этом случае, поскольку полоса ν_7 относится к полосе c -типа, мы смогли добавить в анализ многочисленные комбинационные разности со значением $\Delta K_a = \pm 2$. Было использовано около 600 комбинационных разностей со значениями $J^{max.} = 44$ и $K_a^{max.} = 22$. На этой основе определены одиннадцать параметров. Приведено сравнение параметров основного состояния с результатами, известными в литературе.

Параграф 2.4 посвящён теоретическому исследованию колебательно-вращательной структуры спектров высокого разрешения молекулы C_2D_4 в диапазоне $600-1150\text{ см}^{-1}$. Интерпретация переходов осуществлялась методом комбинационных разностей. В таблице 1 приведена статистическая информация об исследуемых полосах (ν_{10} , ν_7 , ν_4 и ν_{12}) молекулы C_2D_4 , расположенных в диапазоне $600-1150\text{ см}^{-1}$. Следует отметить, что вращательная структура полосы ν_4 исследована впервые. Полученные энергии вращательных уровней использовались в качестве исходных данных при решении обратной задачи. В результате исследования приведены таблицы со спектроскопическими параметрами диагональных и недиагональных блоков эффективного гамильтониана, описывающего вращательную структуру всех исследуемых полос.

Третья глава посвящена теоретическому анализу колебательно-вращательных спектров сероводорода и его изотопологов на основе ряда спектров, зарегистрированных с существенно лучшими экспериментальными характеристиками, чем ранее.

В *параграфе 3.1* описываются теоретические характеристики молекулы H_2S , представлена таблица симметрии и характеров неприводимых тензорных операторов, применимых для точечной группы симметрии C_{2v} . Описаны правила отбора для каждого типа полосы.

В *параграфе 3.2* описаны детали эксперимента при регистрации инфракрасных спектров молекулы $H_2^M S$ ($M = 32, 33$ и 34) в диапазоне $3400-10400\text{ см}^{-1}$.

Параграф 3.3 посвящён теоретическому исследованию колебательно-вращательного спектра второй гексады молекулы $H_2^M S$ ($M = 32, 33$ и 34). На основе теории изотопозамещения оценены начальные значения главных спектроскопических параметров для изотопологов $H_2^{33}S$ и $H_2^{34}S$, которые использованы в предсказании положения линий для интерпретации

Таблица 1. Статистическая информация для исследуемых полос молекулы C_2D_4 в диапазоне 600-1150 cm^{-1} .

Полоса	Центр / cm^{-1}	J^{max}	K_a^{max}	$N_{tr}^{a)}$	$N_l^{b)}$	$m_1^{c)}$	$m_2^{c)}$	$m_3^{c)}$
1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\nu_{10}(B_{2u})$, [8]	593,3444	34	21					
$\nu_{10}(B_{2u})$, дан. раб.	593,3412	40	23	907	649	60,6	25,2	14,2
$\nu_7(B_{1u})$, [8]	719,7708	40	24					
$\nu_7(B_{1u})$, дан. раб.	719,7701	59	33	5551	2105	76,8	16,8	6,4
$\nu_4(A_u)$, [8]	729,9580							
$\nu_4(A_u)$, дан. раб.	729,8672	37	8	143	37	59,5	29,7	10,8
$\nu_{12}(B_{3u})$, [8]	1076,9883	40	16					
$\nu_{12}(B_{3u})$, [10]	1076,9848	46	17	1247				
$\nu_{12}(B_{3u})$, [18]	1076,9848	58	21	3950				
$\nu_{12}(B_{3u})$, дан. раб.	1076,9831	60	28	2849	1614	80,9	15,5	3,6
Итого, [8]				3058				
Итого, дан. раб.				9450	4405			
$d_{rms} \times 10^4$ ^{d)} , [8]	70,0							
$d_{rms} \times 10^4$ ^{d)} , дан. раб.	1,9							

a) N_{tr} – это число найденных переходов.

b) N_l – это число полученных энергией верхних колебательных состояний.

c) Здесь $m_i = n_i/N_l \times 100$ % ($i = 1, 2, 3$); n_1, n_2 и n_3 – числа энергий верхнего состояния, для которых разности $\delta = E^{exp} - E^{calc}$ удовлетворяют условиям $\delta \leq 2 \times 10^{-4} cm^{-1}$, $2 \times 10^{-4} cm^{-1} < \delta \leq 4 \times 10^{-4} cm^{-1}$ и $\delta > 4 \times 10^{-4} cm^{-1}$, соответственно.

d) в cm^{-1} .

спектра и приняты в качестве начального приближения в дальнейшем решении обратной спектроскопической задачи. В таблице 2 приведена статистическая информация о полосах второй гексады для трёх изотопологов. А также имеются таблицы с полученными параметрами эффективного гамильтониана для каждого изотополога.

Параграф 3.4 посвящён теоретическому исследованию колебательно-вращательной структуры спектра полосы $4\nu_2$ молекулы $H_2^M S$ ($M = 32, 34$). Несмотря на то, что полоса $4\nu_2$ расположена отдельно от других полос первой гексады, была использована модель эффективного гамильтониана, учитывающая резонансные взаимодействия между тремя колебательными состояниями: (021), (120) и (040), чтобы результаты анализа были более корректными. Полученные спектроскопические параметры для каждого изотополога занесены в таблицы.

Параграф 3.5 посвящен исследованию интенсивностей спектральных линий полосы $4\nu_2$ молекулы $H_2^{32}S$.

При рассмотрении интенсивности колебательно-вращательных линий необходимо учитывать форму линий (контур). На сегодняшний день контур Армана-Тран (НТР) рекомендуется в качестве стандартной модели формы линии. Профиль НТР обобщает многие модели профиля (например, Фойгт; Раутиан; Фойгт, зависящий от скорости; Раутиан, зависящий от

Таблица 2. Статистическая информация о полосах второй гексады молекулы H_2^MS ($M = 32, 33, 34$).

Полоса	Центр/см ⁻¹	$J^{max.}$	$K_a^{max.}$	$N_t^a)$	$N_e^b)$	$m_1^c)$	$m_2^c)$	$m_3^c)$
1	2	3	4	5	6	7	8	9
H_2^{32}S								
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3^d)$	6289,1739	19	11	876	216	64,4	19,0	16,6
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3^e)$	6289,1741	18	9	709	165	34,3	20,2	45,5
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3^f)$	6289,1738	18	10	950 ^{g)}	185	62,1 ^{h)}	19,0 ^{h)}	18,9 ^{h)}
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3^i)$	6289,1735	8	7		60			
$2\nu_1 + \nu_2^d)$	6288,1465	18	10	710	194	62,9	18,6	18,5
$2\nu_1 + \nu_2^e)$	6288,1456	18	9	579	152	31,6	14,5	53,9
$2\nu_1 + \nu_2^f)$	6288,1428	17	10		153			
$2\nu_1 + \nu_2^i)$	6288,1462	8	7		67			
$\nu_2 + 2\nu_3^d)$	6385,3720	11	5	37	9	22,2	11,1	66,7
$\nu_2 + 2\nu_3^e)$	6385,1381	9	4	24	6	33,3	16,7	50,0
$\nu_2 + 2\nu_3^f)$	6388,73	10	5		5			
$\nu_2 + 2\nu_3^i)$								
$\nu_1 + 3\nu_2^d)$	6074,5814	13	8	331	108	59,3	22,2	18,5
$\nu_1 + 3\nu_2^e)$	6074,5824	13	8	196	79	17,7	17,7	64,6
$\nu_1 + 3\nu_2^f)$								
$\nu_1 + 3\nu_2^i)$	6074,5823	8	7		63			
$3\nu_2 + \nu_3^d)$	6077,5953	14	11	288	104	56,7	24,0	19,2
$3\nu_2 + \nu_3^e)$	6077,5942	11	9	158	69	30,4	13,1	56,5
$3\nu_2 + \nu_3^f)$								
$3\nu_2 + \nu_3^i)$	6077,5954	8	7		65			
$5\nu_2^d)$	5797,2335	14	7	210	90	43,3	18,9	37,8
$5\nu_2^e)$	5797,2372	13	4	57	34	26,5	14,7	58,8
$5\nu_2^f)$								
$5\nu_2^i)$	5797,235	12	5		65			
$d_{rms}^d)$	$7,1 \times 10^{-4}$ см ⁻¹							
$d_{rms}^e)$	$18,4 \times 10^{-4}$ см ⁻¹							
$d_{rms}^f)$	не представлена							
H_2^{34}S								
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3^d)$	6283,9584	16	8	350	111	74,8	17,1	8,1
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3^f)$	6283,9572	12	7		76	90,4 ^{h)}	8,7 ^{h)}	0,9 ^{h)}
$2\nu_1 + \nu_2^d)$	6283,0124	12	9	184	86	72,1	11,6	16,3
$2\nu_1 + \nu_2^f)$	6283,0123	10	7		39			
$d_{rms}^d)$	$5,8 \times 10^{-4}$ см ⁻¹							
$d_{rms}^f)$	не представлена							
H_2^{33}S								
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$	6286,4841	12	8	177	70	62,9	14,3	22,8
$d_{rms}^d)$	$7,9 \times 10^{-4}$ см ⁻¹							

^{a)} N_t – это число найденных переходов. ^{b)} N_e – это число верхних энергией. ^{c)} Здесь $m_i = n_i/N_e \times 100$ % ($i = 1, 2, 3$); n_1, n_2 , and n_3 – числа энергий верхнего состояния, для которых разности $\delta = E^{exp} - E^{calc}$ удовлетворяют условиям $\delta \leq 4 \times 10^{-4}$ см⁻¹, 4×10^{-4} см⁻¹ < $\delta \leq 7 \times 10^{-4}$ см⁻¹ и $\delta > 7 \times 10^{-4}$ см⁻¹. ^{d)} данная работа. ^{e)} из работы [11]. ^{f)} из работы [14]. ^{g)} 950 переходов в двух полосах $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ и $2\nu_1 + \nu_2$. ^{h)} Соответствует информации из работы [14] для всех трёх рассматриваемых полос: $\delta \leq 50 \times 10^{-4}$ см⁻¹, 50×10^{-4} см⁻¹ < $\delta \leq 150 \times 10^{-4}$ см⁻¹ и $\delta > 150 \times 10^{-4}$ см⁻¹. ⁱ⁾ из работы [15].

Таблица 3. Статистическая информация для полосы $4\nu_2$ молекулы H_2^MS ($M = 32, 34$).

Изотополог	Центр/см ⁻¹	$J^{max.}$	$K_a^{max.}$	$N_t^a)$	$N_l^b)$	$d_{rms}^{\Delta c)}$	$m_1^d)$	$m_2^d)$	$m_3^d)$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H_2^{32}S , tw ^{e)}	4661,67291	17	8	505	132	2,6	75,0	12,1	12,9
H_2^{32}S , [15] ^{f)}	4661,6770	9	7		54				
H_2^{32}S , [16] ^{f)}		13	7		102				
H_2^{32}S , [17] ^{f)}		16	8	419	137	10,7	2,9	17,4	79,7
H_2^{34}S , tw ^{e)}	4657,49340	13	5	69	38	4,1	39,5	39,5	21,0

^{a)} N_t – это число найденных переходов. ^{b)} N_l – это число верхних энергией. ^{c)} d_{rms}^{Δ} – среднее квадратичное значение “экспериментальных” погрешностей значений колебательно-вращательных энергий в 10^{-4} см⁻¹. ^{d)} Здесь $m_i = n_i/N_l \times 100$ % ($i = 1, 2, 3$); n_1, n_2 , and n_3 – числа энергий верхнего состояния, для которых разности $\delta = E^{exp} - E^{calc}$ удовлетворяют условиям $\delta \times 10^4 \leq 2$ см⁻¹, 2 см⁻¹ < $\delta \times 10^4 \leq 4$ см⁻¹ и $\delta \times 10^4 > 4$ см⁻¹. ^{e)} “tw” означает “эта работа”. ^{f)} Соответствует данным из работ [15–17].

скорости и т.д.) и позволяет корректно учитывать столкновительное сужение для изолированных спектральных линий при давлениях менее 100 торр. На рисунке 1 показаны примеры аппроксимации контуров линий. На этой основе были определены интенсивности 287 переходов в полосе $4\nu_2$ молекулы H_2^{32}S . Чтобы сделать анализ более корректным, были учтены резонансные взаимодействия отдельных колебательно-вращательных состояний полосы $4\nu_2$ с колебательно-вращательными состояниями полос $\nu_1 + 2\nu_2$ и $2\nu_2 + \nu_3$ (на основе интенсивностей их переходов с $J \leq 2$ и $K_a \leq 2$). 235 экспериментальных интенсивностей линий затем использовались в фитинге для определения параметров эффективного дипольного момента этой полосы. Полученные параметры занесены в таблицу.

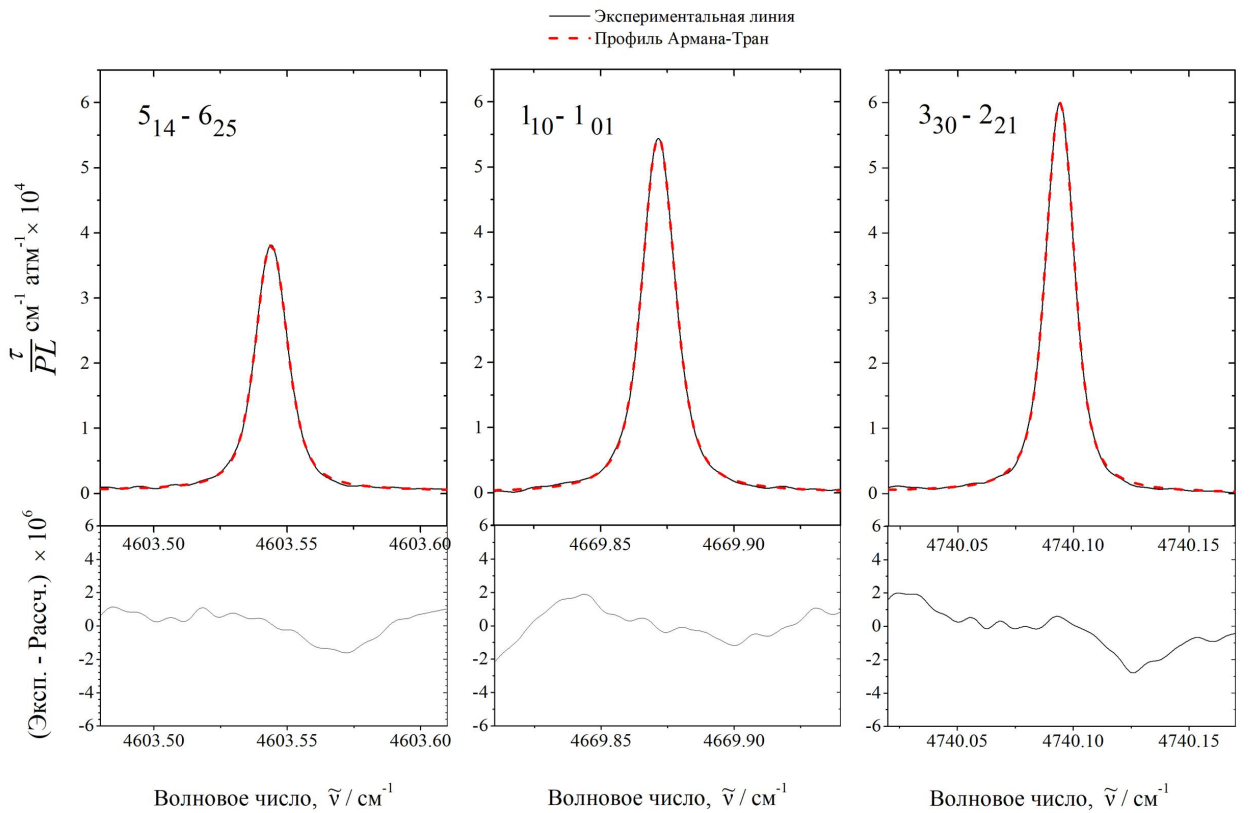


Рис. 1. Контурные некоторых экспериментальных колебательно-вращательных линий полосы $4\nu_2$ молекулы H_2^{32}S . Контурные экспериментальных линий была построена с помощью профиля Армана-Тран. Сплошные и штриховые линии соответствуют экспериментальному и рассчитанному значению $\tau(\nu)$. В нижней части показаны “экспериментальные - рассчитанные” значения.

В параграф 3.6 приводятся результаты сравнения нашего исследования полосы $4\nu_2$ молекулы H_2^MS ($M = 32, 34$) с данными HITRAN и вариационными расчётами.

Параграф 3.7 посвящен исследованию интенсивностей спектральных линий полосы $5\nu_2$ молекулы H_2^{32}S . Форма экспериментальных линий аппроксимирована контуром Армана-Тран. Определены интенсивности 176 переходов в полосе $5\nu_2$ молекулы H_2^{32}S . Полученные

параметры эффективного дипольного момента занесены в таблицу.

В **заключении** сформулированы выводы по диссертационной работе, а также предложения по дальнейшему развитию проведённых исследований. Основные результаты сформулированы в следующем виде:

Для молекулы C_2D_4 :

1. Проведена интерпретация спектров в диапазоне $600-1150\text{ см}^{-1}$, где расположены полосы ν_{10} , ν_7 , ν_4 и ν_{12} . Уточнены параметры основного колебательного состояния (3 вращательные постоянные и 8 параметров центробежного искажения) с $d_{rms} = 0,6 \times 10^{-4}\text{ см}^{-1}$, которые можно применяться для исследования любых полос этой молекулы.
2. Решена обратная спектроскопическая задача и получен набор из 63 параметров эффективного гамильтониана (31 параметр диагональных блоков и 32 параметра недиагональных блоков), который воспроизводит 4405 экспериментальных значений колебательно-вращательных энергий с $d_{rms} = 2,1 \times 10^{-4}\text{ см}^{-1}$, что близко к точностям эксперимента. Следует отметить, что вращательная структура полосы ν_4 была определена впервые.

Для второй гексады $H_2^M S$ ($M = 32, 33$ и 34):

1. Для молекулы $H_2^{32}S$: 2452 перехода с максимальными значениями квантовых чисел $J^{max.} = 18/19/13/14/14/11$ и $K_a^{max.} = 10/11/8/11/7/5$ были найдены в экспериментальных спектрах для полос $2\nu_1 + \nu_2$, $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$, $\nu_1 + 3\nu_2$, $3\nu_2 + \nu_3$, $5\nu_2$ и $\nu_2 + 2\nu_3$. На этой основе были получены 194/216/108/104/90/9 верхних колебательных энергий (более чем в 1,4 раза большее количество переходов и верхних значений энергии по сравнению с предыдущими исследованиями) для верхних колебательных состояний (210), (111), (130), (031), (050) и (012). Решена обратная задача и получен набор из 172 параметров эффективного гамильтониана, воспроизводящий экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $d_{rms} = 7,1 \times 10^{-4}\text{ см}^{-1}$.
2. Для молекулы $H_2^{34}S$: были определены 534 перехода с $J^{max.} = 16$ и $K_a^{max.} = 9$ для полос $2\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ и получены 197 верхних энергий (около 1,5 раз больше для полосы $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ и более чем в 2 раза больше для полосы $2\nu_1 + \nu_2$ чем в предыдущих работах) для колебательных состояний (210) и (111). Решена обратная задача и получен набор из 35 параметров эффективного гамильтониана, воспроизводящий экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $d_{rms} = 5,8 \times 10^{-4}\text{ см}^{-1}$.
3. Для молекулы $H_2^{33}S$: впервые были определены 177 переходов и 70 верхних колебательно-вращательных энергий для полосы $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$. Набор из 14 параметров эффек-

тивного гамильтониана получен в результате решения обратной задачи, воспроизводящий экспериментальные данные с $d_{rms} = 7,9 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

4. Определены интенсивности 176 переходов в полосе $5\nu_2$ молекулы H_2^{32}S путём аппроксимации контуров линий профилем Армана-Транн. Полученный набор из 7 параметров эффективных дипольных моментов воспроизводит экспериментальные данные с $d_{rms} = 3,4\%$.

Для полосы $4\nu_2$ H_2^MS ($M = 32,34$):

1. Для молекулы H_2^{32}S найдены 505 переходов с максимальными значениями квантовых чисел $J^{max.} = 17$ и $K_a^{max.} = 8$ и на этой основе были получены 132 верхних колебательных энергии (что в 2,5 раза больше, чем в предыдущих исследованиях) в экспериментальном спектре. Решена обратная задача и получены 28 варьируемых параметров, которые воспроизводят 132 экспериментальных значения колебательно-вращательных энергий с $d_{rms} = 3,5 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.
2. Для молекулы H_2^{34}S впервые найдены 69 переходов. Решена обратная задача и набор из семи параметров воспроизводит начальные 38 значений энергии с $d_{rms} = 4,3 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.
3. Определены интенсивности 287 переходов в полосе $4\nu_2$ молекулы H_2^{32}S путём аппроксимации контуров линий профилем Армана-Транн. Полученный набор из 8 параметров эффективных дипольных моментов воспроизводит экспериментальные данные с $d_{rms} = 3,1\%$.
4. Приведены результаты сравнения нашего исследования полосы $4\nu_2$ молекулы H_2^MS ($M = 32, 34$) с данными HITRAN и вариационными расчетами.

Полученные результаты данной диссертации являются дополнением к имеющейся информации о молекуле этилена, сероводорода и их изотопологах и можно использоваться для пополнения как российских, так и международных баз данных, таких как SPECTRA, GEISA, HITRAN.

Цитируемая литература

1. Герцберг, Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг. — М. : ИЛ., 1965. — 648 с.
2. Allen, H. C. The Structure of Ethylene from Infrared Spectra / H. C. Allen, E. K. Plyler // J. Am. Chem. Soc. — 1958. — Vol. 80. — No. 11. — P. 2673-2676.
3. Duncan, J. L. Ground state rotational constants of H₂CCD₂ and C₂D₄ and geometry of ethylene / J. L. Duncan, I. J. Wright, D. Van Lerberghe // J. Mol. Spectrosc. — 1972. — Vol. 42. — Is. 3. — P. 463-477.
4. Dowling, J. M. High resolution Raman spectroscopy of gases: XII. Rotational spectra of C₂H₄ and C₂D₄ and the structure of the ethylene molecule / J. M. Dowling, B. P. Stoicheff // Can. J. Phys. — 1959. — Vol. 37. — No. 6. — P. 703-721.
5. Hegelund, F. The Raman spectrum of the 2200 cm⁻¹ wavenumber region of gaseous ethylene-d₄ / F. Hegelund // J. Raman Spectrosc. — 1979. — Vol. 8. — No. 2. — P.95-102.
6. Duncan, J. L. High resolution infrared spectrum and rotational constants of ethylene-D₄ / J. L. Duncan, E. Hamilton, A. Fayt, D. Van Lerberghe, et al. // Mol. Phys. — 1981. — Vol. 43. — Is. 4. — P. 737-752.
7. Harper, J. High resolution analysis of the infrared active ν_7 wagging fundamental of C₂D₄ / J. Harper, J. L. Duncan // Mol. Phys. — 1982. — Vol. 46. — No. 1. — P. 139-149.
8. Mose, A. -K. The high-resolution infrared spectrum of ethylene-d₄ below 1200 cm⁻¹ / A. -K. Mose, F. Hegelund, F. M. Nicolaisen // J. Mol. Spectrosc. — 1989. — Vol. 137. — Is. 2. — P. 286-295.
9. Tan, T. L. High-resolution Fourier transform infrared spectroscopy and analysis of the ν_{12} fundamental band of ethylene-d₄ / T. L. Tan, K. L. Goh, P. P. Ong, H. H. Teo // Chem. Phys. Lett. — 1999. — Vol. 315. — Is. 1-2. — P. 82-86.
10. Tan, T. L. The ν_{12} band of C₂D₄ / T. L. Tan, M. G. Gabona, G. B. Lebron // J. Mol. Spectrosc. — 2011. — Vol. 266. — Is. 2. — P. 113-115.
11. Ulenikov, O. N. High-resolution Fourier transform spectrum of H₂S in the region of the second hexade / O. N. Ulenikov, A. -W. Liu, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, et al. // J. Mol. Spectrosc. — 2005. — Vol. 234. — Is. 2. — P. 270-278.
12. Allen, H. C. Infrared Spectrum of Hydrogen Sulfide / H. C. Allen, E. K. Plyler // J. Chem. Phys. — 1956. — Vol. 25. — Is. 6. — P. 1132-1136.
13. Edwards, T. H. Ground-State Molecular Constants of Hydrogen Sulfide / T. H. Edwards, N. K. Moncur, L. E. Snyder // J. Chem. Phys. — 1967. — Vol. 46. — Is. 6. — P. 2139-2142.

14. Lechuga-Fossat, L. The H₂S spectrum in the 1.6 μm spectral region / L. Lechuga-Fossat, J. -M. Flaud, C. Camy-Peyret, P. Arcas, et al. // *Mol. Phys.* — 1987. — Vol. 61. — Is. 1. — P. 23-32.
15. Bykov, A. D. The infrared spectrum of H₂S from 1 to 5 μm / A. D. Bykov, O. V. Naumenko, M. A. Smirnov, L. N. Sinitsa, et al. // *Can. J. Phys.* — 1999. — Vol. 72. — No. 11-12. — P. 989-1000.
16. Brown, L.R. First hexad of interacting states of H₂S molecule / L. R. Brown, J. A. Crisp, D. Crisp, O. V. Naumenko, et al. // *Proc. SPIE 3090, 12th Symposium and School on High-Resolution Molecular Spectroscopy.* — 1997. — P. 111-113.
17. Chubb, K.L. Marvel analysis of the measured high-resolution rovibrational spectra of H₂³²S / K. L. Chubb, O. Naumenko, S. Keely, S. Bartolotto, et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* — 2018. — Vol. 218. — P. 178-186.
18. Tan, T. L. Rovibrational constants of the ground and $v_{12} = 1$ states of C₂D₄ by high-resolution synchrotron FTIR spectroscopy / T. L. Tan, M. G. Gabona, D. R. T. Appadoo, P. D. Godfrey, et al. // *J. Mol. Spectrosc.* — 2014. — Vol. 303. — P. 42-45.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук:

1. Фомченко, А. Л. Определение параметров основного колебательного состояния молекулы C_2D_4 / А. Л. Фомченко, **Ф. Чжан**, О. В. Громова, Т. Буттерсак // Известия вузов. Физика. — 2016. — Т. 59. — № 3. — С. 61-65. — 0,38 / 0,30 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:

- Fomchenko, A. L. Determination of the ground vibrational state parameters of the C_2D_4 molecule / A. L. Fomchenko, **F. Zhang**, O. V. Gromova, T. Buttersack // Russian Physics Journal. — 2016. — Vol. 59. — № 3. — P. 387-391. — DOI: 10.1007/s11182-016-0784-x.
2. Ulenikov, O. N. High resolution analysis of C_2D_4 in the region of 600-1150 cm^{-1} / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, A. L. Fomchenko, **Fangce Zhang**, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. — 2016. — Vol. 182. — P. 55-70. — DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.04.026. — 2,08 / 1,04 а.л.
 3. Ulenikov, O. N. Extended FTIR high resolution analysis of hydrogen sulfide in the region of the second hexad: Line positions and ro-vibrational energies of $H_2^M S$ ($M = 32, 33, 34$) / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **F. Zhang**, C. Maul, C. Sydow, S. Bauerecker // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. — 2020. — Vol. 240. — P. 106710. — DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.106710. — 2,21 / 1,41 а.л.
 4. Ulenikov, O. N. Ro-vibrational analysis of the first hexad of hydrogen sulfide: Line position and strength analysis of the $4\nu_2$ band of $H_2^{32}S$ and $H_2^{34}S$ for HITRAN applications / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **F. Zhang**, N. I. Raspopova, C. Sydow, S. Bauerecker // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. — 2020. — Vol. 255. — P. 107236. — DOI: 10.1016/j.jqsrt.2020.107236. — 2,60 / 1,30 а.л.
 5. **Чжан, Ф.** Исследование спектра высокого разрешения полосы $5\nu_2$ молекулы H_2S / Ф. Чжан, П. А. Глушков, Е. С. Бехтерева // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2020. — Т. 63. — № 7. — С. 174-175. — 0,19 / 0,15 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:

- Zhang, F.** Study of a high-resolution spectrum of the $5\nu_2$ band of the H_2S molecule / F. Zhang, P. A. Glushkov, E. S. Bekhtereva // Russian Physics Journal. — 2020. — Vol. 63. — № 7. — P. 1296-1298. — DOI: 10.1007/s11182-020-02145-w.

6. **Чжан, Ф.** Колебательно-вращательный анализ первой гексады сероводорода: полоса $4\nu_2$ H_2S / Ф. Чжан, Н. И. Распопова // Оптика и спектроскопия. — 2021. — Т. 129. — № 1. — С. 10-15. — DOI: 10.21883/OS.2021.01.50432.190-20. — 0,45 / 0,35 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:

Zhang, F. An Analysis of Vibrations and Rotations in the First Hydrogen Sulfide Hexade: the $4\nu_2$ H_2S Band / F. Zhang, N. I. Raspopova // Optics and Spectroscopy. — 2021. — Vol. 129. — № 1. — P. 6-11. — DOI: 10.1134/S0030400X21010045.

Публикации в прочих научных изданиях:

7. **Чжан, Ф.** Исследование колебательно-вращательной тонкой структуры спектра полосы ν_7 молекулы C_2D_4 / Ф. Чжан // XII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук»: Сборник научных трудов. 21 – 24 Апреля 2015. — Томск. — 2015. — С. 305-307. — 0,16 а.л.
8. **Чжан, Ф.** Анализ колебательно-вращательной структуры спектра полосы ν_7 молекулы C_2D_4 / Ф. Чжан, А. Л. Фомченко // 21-ая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: Сборник научных трудов. 26 Марта – 02 Апреля 2015. — Омск. — 2015. — С. 416-417. — 0,08 / 0,06 а.л.
9. Ulenikov, O. N. High resolution analysis of the ν_4 , ν_7 and ν_{12} vibrational bands of C_2D_4 / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, A. L. Fomchenko, **F. Zhang**, S. Bauerecker, C. Maul // The 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. 24-28 August 2015. — Dijon. — 2015. — P. 110. — 0,05 / 0,03 а.л.
10. **Чжан, Ф.** Анализ спектра высокого разрешения молекулы C_2D_4 в диапазоне 600 – 1150 cm^{-1} / Ф. Чжан // 22-ая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: Сборник научных трудов. 21 – 28 Апреля 2016. — Ростов-на-Дону. — 2016. — С. 293-294. — 0,08 а.л.
11. **Zhang, F.** High resolution study of Hexades of H_2^MS / F. Zhang, P. A. Glushkov, A. S. Belova, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, S. Bauerecker, C. Sydow, C. Maul, O. N. Ulenikov // 25th International Conference of High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. 03-07 September 2018. — Bilbao. — 2018. — P. 110. — 0,04 / 0,02 а.л.
12. **Чжан, Ф.** Исследование Фурье-спектра высокого разрешения молекулы H_2S в районе второй гексады / Ф. Чжан // 25-ая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: Сборник научных трудов. 19 – 26 Апреля 2019. — Крым. — 2019. — С. 258-259. — 0,08 а.л.
13. **Zhang, F.** High resolution study of the second hexade of H_2^MS : line strengths, widths, and shifts / F. Zhang, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, N. I. Raspopova, O. N. Ulenikov, S.

- Bauerecker // The 26th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. 26-30 August 2019. — Dijon. — 2019. — P. 357. — 0,04 / 0,02 а.л.
14. **Чжан, Ф.** Исследование спектра высокого разрешения полосы $4\nu_2$ молекулы H_2S / Ф. Чжан // 26-ая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: Сборник научных трудов. 27 Марта – 03 Апреля 2020. — Уфа. — 2020. — С. 208-209. — 0,08 а.л.
15. **Zhang, F.** High resolution study of $4\nu_2$ band of H_2S / F. Zhang, T. E. Ersin // Тезисы докладов международной конференции Физика.СПб/2020. 19 – 23 Октября 2020. — Санкт-Петербург. — 2020. — С. 231-232. — 0,05 а.л.
16. **Чжан, Ф.** Анализ спектра высокого разрешения первой гексады молекулы H_2^{32}S : полоса $4\nu_2$ / Ф. Чжан // XVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук»: Сборник научных трудов. 27 – 30 Апреля 2021. — Томск. — 2021. — С. 379-381. — 0,16 а.л.