

**ТОМСКИЙ  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**



На правах рукописи

*А.С. Белова*

Белова Анастасия Сергеевна

**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ  
ИЗОТОПОЗАМЕЩЕННЫХ МОЛЕКУЛ В ЗАДАЧАХ  
КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОЙ  
СПЕКТРОСКОПИИ**

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

1.3.6 – Оптика

Томск – 2022

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

**Научный руководитель:**

**Бехтерева Елена Сергеевна**

Доктор физико-математических наук, доцент, «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», профессор

**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 состоится «26» декабря 2022 г. в 14.30 часов на заседании диссертационного совета ДС.ТПУ.02 Национального исследовательского Томского политехнического университета по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина 2, стр. 32, аудитория 11.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке Томского политехнического университета и на сайте [dis.tpu.ru](http://dis.tpu.ru).

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета ДС.ТПУ.02  
кандидат физико-математических наук, доцент



Фомченко Анна Леонидовна

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Теоретические и лабораторные исследования различных молекул методами молекулярной спектроскопии высокого разрешения были и остаются в центре внимания многих, как отечественных, так и международных научных групп. Связано это в первую очередь, с острой необходимостью научного сообщества в высокоточной спектроскопической информации для решения различных прикладных задач атмосферной оптики, астрофизики, планетологии, газоанализа.

Следует отметить, что несмотря на то, что экспериментальные исследования количественных характеристик молекулярных спектров (положений, интенсивностей и полуширин спектральных линий) основных изотопических разновидностей молекул выполняются весьма интенсивно в целом ряде мировых центров по молекулярной спектроскопии высокого разрешения, аналогичные исследования изотопически замещенных модификаций являются единичными и их число на порядки уступает числу исследований материнских модификаций. Как правило, информация об изотопически замещенных модификациях либо отсутствует в литературе, либо частично представлена в публикациях отдельных авторов, что говорит о несистемном изучении данного аспекта. Причина такого положения заключается не в отсутствии интереса к подобным исследованиям, а в наличие определенных факторов, которые значительно усложняют процесс исследования. К таким факторам следует отнести наличие жестких требований к качеству экспериментального оборудования и постановке эксперимента (требуется выдержать стабильные температуру и давление в течение длительного времени, а наличие даже небольшой экспериментальной погрешности приводит к качественно неверной интерпретации данных), дороговизну образцов минорных изотопологов, а также отсутствие эффективного метода определения парциальных давлений изотопологов в экспериментально исследуемых образцах. Поэтому весьма актуальной является разработка методов, позволяющих оценить процентное соотношение изотопологов в смеси газов при нестабильных условиях эксперимента, и тем самым предоставить возможность корректного определения абсолютных интенсивностей колебательно - вращательных переходов в спектрах высокого разрешения минорных изотопологов. Знание информации такого рода, в свою очередь, позволяет решать многие прикладные задачи, сопряженные с определением макропараметров среды, количественного и качественного содержания вещества в среде. Однако следует учесть, что анализ интенсивностей может быть произведен только при наличии в литературе данных об энергетической структуре спектра или в комплексе с анализом положений линий. Поэтому задачи определения положений и абсолютных интенсивностей спектральных линий обычно рассматриваются одновременно.

Исследование спектров изотопически замещенных модификаций также позволяет получить дополнительные данные, необходимые для решения задачи определения внутренней динамики молекул. В силу более низкой симметрии большинства минорных изотопологов относительно симметрии материнской молекулы, в спектрах изотопически замещенной модификации присутствуют дополнительные полосы и переходы, информация о которых значительно расширяет перечень сведений о внутренних свойствах исследуемого вещества. Информация такого рода, является актуальной при определении параметров внутримолекулярного силового поля и дипольного момента. Несмотря на то, что с течением времени точность *ab initio* расчетов постепенно растет, в настоящее время она все же значительно уступает точности полуэмпирических расчетов, которые, основываясь на модели эффективного гамильтониана и эффективного оператора дипольного момента, способны воспроизводить положения и интенсивности колебательно - вращательных линий с точностью, сравнимой с экспериментальной. Именно полуэмпирические расчеты лежат в основе полученных в данной диссертации результатов, однако в нескольких параграфах настоящей работы упоминаются данные, полученные методом *ab initio*.

**Степень изученности проблемы.** Спектроскопия высокого разрешения сероводорода и его изотопически замещенных модификаций вызывает большой интерес по ряду причин. С одной стороны, спектры сероводорода используются для измерений загрязнителей атмосферы Земли и для изучения физики и химии в атмосферах других планет (например, Венеры) и межзвездной среды [1]. С другой стороны, молекула сероводорода представляет интерес с теоретической точки зрения, поскольку она является одной из самых легких молекул типа асимметричного волчка с сильным колебательно - вращательным взаимодействием. Как следствие, многочисленные спектроскопические эффекты и особенности, присущие асимметричным волчкам, ярко выражены в спектрах сероводорода. Таким образом, эта молекула может выступать в качестве хорошего «пробного камня» для проверки различных методов, используемых в химической физике для получения поверхности потенциальной энергии (PES), поверхности дипольного момента (DMS), и для моделирования экспериментальных спектров (см., например, работы [2] – [13] и ссылки в них). Поэтому за последние сорок лет в микроволновой, субмиллиметровой и инфракрасной областях были проведены обширные лабораторные спектроскопические исследования молекулы сероводорода и даже создана специальная база данных, посвященная сероводороду [14].

Всякий раз, когда целью исследования является получение как можно более полной спектроскопической информации о молекуле, изучение изотопических разновидностей этой молекулы является эффективным средством сбора ценной дополнительной информации, в частности, касающейся внутримолекулярной

динамики. Чем больше массовое соотношение изотопозамещенного вида по отношению к эталонной “материнской” молекуле, тем более выраженными являются изотопные эффекты, проявляющиеся в спектре. Кроме того, чем больше разнообразие изотопического замещения, тем больше количество эффектов, которые можно детально обнаружить и изучить. Соответственно, исследование дейтерированных видов молекулы является наиболее эффективным, поскольку отношение  $(m_D - m_H)/m_H$  является наибольшим для стабильных изотопологов. Тем не менее, работ по анализу колебательно-вращательных спектров изотопологов  $D_2^M S$  ( $M = 32, 33, 34$ ) не так много, а работ, включающих в себя изучение абсолютных интенсивностей практически нет. Проблема точного количественного определения интенсивностей линий различных колебательных полос многоатомных молекул является одной из важнейших в молекулярной спектроскопии высокого разрешения, поскольку такая информация играет ключевую роль в исследовании многочисленных проблем науки и техники.

Спектроскопия силана является объектом многих научных исследований по ряду причин. Так, в работе [15] отмечалась важность понимания процесса химического осаждения кремния из газовой фазы для нужд индустрии полупроводников и производства тонких пленок. Как упомянуто в работе [16], процессы производства кремния высокой чистоты также нуждаются в контроле газа силана. Хорошо известно, что изотопологи силана представляют интерес для ИК-астрономии. В частности, в работах [17 - 20] утверждается наличие силана в атмосферах Юпитера и Сатурна. Работы [21- 22] указывают на наличие основного изотополога  $^{28}\text{SiH}_4$  в планетарной туманности, окружающей звезду IRC+10216. Поэтому точные данные о спектрах высокого разрешения силана (как о положении линий, так и об абсолютных интенсивностях линий) могут быть полезны для исследования звездных объектов. Вследствие этого в течение многих лет проводились многочисленные лабораторные спектроскопические исследования основных видов силана и его различных изотопологов (см., например, [23 - 30]). Что касается  $\text{SiD}_4$ , то ранее его колебательно-вращательные спектры обсуждались лишь в работах, [23], [31 - 33]. Информация об интенсивностях линий публиковалась в нескольких недавних статьях [34] и [35].

**Объекты исследования.** Объектами исследования являются изотопические разновидности молекул (изотопологи), представляющие интерес для атмосферной оптики и астрофизики. К таким молекулам относятся сероводород, оксид серы, моносилан, этилен, метан и многие другие, то есть те молекулы, которые содержатся в атмосфере Земли, атмосферах других планет или входят в состав астрономических объектов.

**Цели и задачи.** Целью проекта является экспериментальное и теоретическое исследование свойств изотопологов различной симметрии методами молекулярной спектроскопии высокого разрешения.

В ходе реализации поставленной цели решались следующие задачи:

- разработка теоретических основ метода определения концентраций (парциальных давлений) изотопологов в их смеси;
- получение изотопических соотношений между параметрами основной модификации молекулы и ее изотопологов для молекул типа асимметричного волчка;
- разработка алгоритмов и создание на этой основе комплекса программ с использованием программного пакета Maple для численного определения параметров эффективных дипольных моментов изотопологов на основе результатов, достигнутых на предыдущем этапе; отладка и проверка корректности разработанных программных средств;
- исследование энергетической структуры и интенсивностей спектральных линий экспериментально зарегистрированных спектров высокого разрешения молекул  $D_2^M S$  ( $M=32,33,34$ ); решение обратной спектроскопической задачи для энергий и интенсивностей;
- исследование интенсивностей колебательно-вращательных переходов в слабой полосе  $5\nu_2$  молекулы  $H_2S$ , сравнение качества полученных данных с результатами вариационных расчетов и результатами из базы данных HITRAN;
- исследование спектров молекулы  $CH_3D$  в области  $1.58 \mu m$  окна прозрачности метана;
- анализ спектров высокого разрешения молекул  $^M SiD_4$  в области локализации фундаментальных полос  $\nu_2, \nu_3, \nu_4$ ; решение обратной спектроскопической задачи для энергий и интенсивностей.

**Защищаемые положения:**

1. Метод определения парциальных давлений газовой смеси, основанный на использовании аналитического представления параметров эффективного дипольного момента для изотополога как функции параметров «материнской» молекулы согласно теории изотопозамещения, позволяет оценивать концентрацию изотопологов в их смеси с погрешностью до 3 %.
2. Учет резонансного взаимодействия в полиаде  $V=3/2$  молекулы  $D_2^{32}S$  позволяет описывать эффект перетекания интенсивностей переходов в

соответствующих колебательно-вращательных полосах и получить набор параметров эффективного дипольного момента, способный восстанавливать абсолютные значения интенсивностей колебательно-вращательной полосы  $3\nu_2$  с погрешностью порядка 3%.

3. Компиляция метода «двух температур» и метода комбинационных разностей позволяет выполнить интерпретацию и дальнейший анализ сложных спектров, содержащих слабые переходы порядка 30 высоковозбужденных, резонирующих состояний молекулы  $\text{CH}_3\text{D}$  в диапазоне  $6100\text{-}6500\text{ см}^{-1}$ .

**Достоверность результатов**, полученных в работе, подтверждается строгостью математических моделей и согласованностью рассчитанных и экспериментальных результатов, согласием с основными принципами и следствиями теории молекулярной спектроскопии. В случаях, когда это было возможно, достоверность результатов подтверждается согласием результатов настоящей работы с данными, полученными в работах других авторов.

**Научная новизна.** В диссертационной работе выполнены исследования, определяющие ее новизну. В частности

- Разработан уникальный метод оценки парциальных давлений изотопологов в их смеси;
- Впервые получены аналитические соотношения между параметрами эффективного дипольного момента материнской молекулы и изотополога для молекул типа асимметричного волчка;
- Произведен расчет главного параметра эффективного дипольного момента для ряда молекул типа асимметричного волчка на основе полученных соотношений, справедливых для фундаментальных, комбинационных полос и обертонов, с точностью, превышающей вариационные расчеты;
- Впервые исследована система взаимодействующих состояний второй триады молекулы  $\text{D}_2^{32}\text{S}$ ; получены параметры эффективного гамильтониана и эффективного дипольного момента, способные воспроизводить исходный спектр с точностью, близкой к экспериментальной;
- Впервые исследована колебательно-вращательная структура спектров минорных изотопологов ( $\text{D}_2^{33}\text{S}$ ,  $\text{D}_2^{34}\text{S}$ ) диоксида серы в диапазоне  $2300\text{-}2900\text{ см}^{-1}$ ; получены параметры эффективного гамильтониана, способные воспроизводить исходный спектр с точностью, близкой к экспериментальной;

- Получен набор параметров эффективного дипольного момента колебательного состояния (050) молекулы  $\text{H}_2^{32}\text{S}$ , способный воспроизвести спектр с точностью, превосходящей имеющиеся в литературе данные;
- Значительно расширен диапазон данных о структуре колебательно-вращательного спектра молекулы  $\text{CH}_3\text{D}$  в области  $1.58 \mu\text{m}$  окна прозрачности метана; впервые были определены порядка 800 колебательно-вращательных переходов;
- Впервые осуществлен анализ спектров высокого разрешения молекул  $^M\text{SiD}_4$  ( $M=29,30$ ) в области локализации фундаментальных полос  $\nu_2, \nu_3, \nu_4$ .

**Теоретическая значимость.** Разработанный метод оценки парциального давления в смеси газов, а также полученные соотношения между параметрами материнской молекулы и ее минорных изотопологов вносят дополнительный вклад в развитие теории изотопозамещения, позволяют упростить, а в некоторых случаях сделать возможным, процесс изучения интенсивностей колебательно-вращательных линий многоатомных молекул, и, как следствие, процесс извлечения количественной и качественной информации из спектров молекул высокого разрешения. Полученные количественные данные также вносят свой вклад в развитие теории молекулярной спектроскопии. Количественные данные, представленные в результатах настоящей работы, могут быть использованы в различных областях науки, таких как атмосферная оптика, астрофизика, газоанализ и, таким образом, могут послужить базой для расширения представлений и фактических знаний об окружающем нас мире.

**Практическая значимость.** Разработанные аналитические методы, полученная качественная и количественная информация, созданные вычислительные алгоритмы и компьютерные программы могут быть использованы в академических и производственных организациях. Результаты диссертационной работы могут быть использованы при чтении курсов лекций «Теоретические основы молекулярной спектроскопии», «Физика атомов и молекул», «Квантовая механика» в Национальном исследовательском Томском политехническом университете.

**Основные методы исследования.** Для решения поставленной цели использовались методы колебательно-вращательной спектроскопии, квантовой механики, теории групп. Широко использовалась теория изотопозамещения, операторная теория возмущений. В основе численных расчетов лежит метод наименьших квадратов. Для анализа колебательно-вращательной структуры спектров использовались метод комбинационных разностей, метод двух температур, сравнение с результатами вариационных расчетов. Для создания и реализации разработанных алгоритмов были использованы языки

программирования Python, FORTRAN, программный пакет MAPLE. Для экспериментальной регистрации спектров применялись методы Фурье-спектроскопии и лазерной спектроскопии по затуханию света с кольцевой многоходовой кюветой (CRDS).

**Внедрение результатов.** Результаты, заявленные в диссертационной работе, являются частью научных исследований, проводимых в коллаборации Томского Политехнического университета (г. Томск, Россия) и Технического университета г. Брауншвейг (г. Брауншвейг, Германия). Разработанный метод определения парциальных давлений в смеси газов и полученные изотопические соотношения для молекул типа асимметричного волчка легли в основу работ [36] – [39] и использовались для корректного анализа интенсивностей спектральных линий.

**Личный вклад автора** при выполнении исследований в рамках диссертационной работы состоит в следующем:

- Формирование цели работы и постановка задач совместно с научным руководителем, д. ф.-м. н., профессором Бехтеревой Е. С. и PhD, руководителем лаборатории LiPhy (г. Гренобль, Франция), А. Кампарг;
- Под руководством д. ф.-м. н., профессора Бехтеревой Е. С. создание комплекса алгоритмов для реализации метода оценки парциального давления изотопологов в их смеси;
- Проведение верификации метода оценки парциального давления изотопологов в их смеси для различных молекул типа асимметричного волчка, проведение расчета параметров эффективного дипольного момента этих изотопологов совместно с д. ф.-м. н., профессором Громовой О. В.;
- Под руководством д. ф.-м. н., профессора Бехтеревой Е. С. получение аналитических выражений, связывающих параметры эффективного дипольного момента материнской молекулы и ее минорных изотопологов для молекул типа асимметричного волчка;
- Проведение анализа энергетической структуры колебательно-вращательных уровней энергии состояний (110), (011), (030) и измерение интенсивностей линий в спектрах высокого разрешения молекул  $D_2^M S$  ( $M=32,33,34$ );
- Сравнение качества смоделированных на основе экспериментальных данных интенсивностей в слабой полосе  $5\nu_2$  молекулы  $H_2S$  с результатами вариационных расчетов и результатами из базы данных HITRAN, создание сравнительных таблиц и графиков, формирование списка смоделированных данных в формате HITRAN;

- Проведение обработки и моделирования с помощью специальной компьютерной программы положений, полуширин и интенсивностей линий молекулы  $\text{CH}_3\text{D}$ , экспериментально зарегистрированных в области окна прозрачности метана  $1.58 \mu\text{m}$ ;
- Комплексное использование существующих методов для анализа энергетической структуры колебательно-вращательных уровней энергии сильно взаимодействующих состояний, локализованных в области окна прозрачности метана  $1.58 \mu\text{m}$ , формирование списка из проанализированных линий в формате HITRAN, создание сравнительных таблиц и графиков;
- Проведение анализа положений линий в спектрах высокого разрешения молекул  $^M\text{SiD}_4$  ( $M=29,30$ ) в области локализации фундаментальных полос  $\nu_2, \nu_3, \nu_4$ ;
- Совместное участие с научным руководителем, д. ф.-м. н., профессором Бехтеревой Е. С. в написании статей и грантов.

**Работа выполнялась при финансовой поддержке:**

- Стипендии Правительства для приоритетных направлений подготовки аспирантов;
- Гранта РФФИ №18-72-00032 (2018-2020 гг.);
- Гранта РФФИ №18-12-00058 (2018-2020 гг.);
- Гранта ВИУ-ИШФВП-63/2019 (2019 - 2020 гг.);
- Стипендии посольства Франции в России «Остроградский» (2020 г.);
- Гранта ВИУ-ИШФВП-189/2020 (2020 – 2021 гг.);
- Гранта РФФИ «Аспиранты» № 20-32-90004 (2020-2022 гг.);
- Гранта Приоритет-2030-НИП/ЭБ-010-0000-2022 (2021 – 2022 гг.).

**Апробация работы.** Материалы, вошедшие в диссертацию, докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях:

- 26th International Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Dijon, France (2019);
- XVII International Conference of Students and Young Scientists “Prospects of fundamental sciences developments”, Tomsk, Russia (2020);

- XVIII International Conference of Students and Young Scientists “Prospects of fundamental sciences developments”, Tomsk, Russia (2021);
- 27th International Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Virtual Conference (2021).

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 13 печатных работах: 6 статей в международных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus; 2 статьи в переводной версии журналов, индексируемых в Web of Science и Scopus; 5 публикаций в материалах международных конференций.

**Объем и структура диссертации.** Настоящая работа объемом 176 страниц состоит из введения, 4 глав, заключения, 5 приложений и списка использованной литературы из 214 наименований.

### Содержание работы

**Во введении** изложена необходимость научного исследования, обозначена цель работы и поставлены задачи для ее реализации. Также проведен краткий обзор литературных данных по теме исследования, обоснована новизна полученных результатов, практическая и теоретическая значимость исследования, сформулированы научные положения, выносимые на защиту, перечислены методы, использованные при выполнении работы.

**Первая глава** носит ознакомительных характер. В ней содержатся базовые сведения из теории молекулярной спектроскопии, основные требования современных баз данных спектроскопической информации к публикуемым научным данным, теоретические модели, используемые для описания экспериментальных данных, некоторые сведения из теории изотопозамещения, обзор экспериментальных установок, используемых для регистрации спектров высокого разрешения в рамках данной работы.

**Вторая глава** состоит из трех параграфов и содержит информацию о целесообразности разработки и основных выкладках метода оценки парциального давления в смеси изотопологов. *Первый параграф* состоит из краткого обоснования необходимости разработки метода, а также содержит математические выкладки, последовательно подводящие к записи основной формулы, справедливой для молекул любого типа:

$$P_{(part)} = \frac{prob S_v^N}{calc S_v^N} P_{(sample)} \quad (1)$$

Формула (1) позволяет определить парциальное давление изотопологов в их смеси. Чтобы реализовать этот метод необходимо знать общее давление в

образце  $P_{(sample)}$ , абсолютную интенсивность спектральной линии  $^{prob} S_V^N$  исследуемого изотополога, измеренную в предположении, что данный изотополог находится в образце при 100% концентрации, абсолютную интенсивность спектральной линии  $^{calc} S_V^N$  исследуемого изотополога, рассчитанную теоретически. Для теоретического расчета абсолютной интенсивности нужно знать матричные элементы от параметров эффективного дипольного момента исследуемой молекулы. Как правило для большинства изотопологов такие параметры отсутствуют в литературе. *Второй параграф* всецело посвящен поиску решения данной проблемы. Здесь обсуждается возможность применения теории изотопозамещения для получения аналитического соотношения, связывающего параметр эффективного дипольного момента первого порядка исследуемого изотополога с параметрами «материнской молекулы». Данное соотношение было получено для молекул типа асимметричного волчка и применимо для фундаментальных полос. *Третий параграф* содержит численные расчеты на основе полученного соотношения для большинства молекул типа асимметричного волчка и их изотопологов, сделан обширный литературный обзор, приведено сравнение расчетных значений с имеющимися в литературе данными, приводятся сравнительные таблицы.

**Третья глава** состоит из двух параграфов и посвящена анализу спектров различных изотопологов сероводорода. Помимо энергетической структуры в случаях, когда это было возможно, приведены значения абсолютных интенсивностей спектральных линий и полуширин. *Первый параграф* содержит результаты объемного исследования, посвященного изучению спектров высокого разрешения изотопологов  $D_2^M S$  ( $M=32, 33, 34$ ) в диапазоне  $2300 - 2900 \text{ см}^{-1}$ . В данном диапазоне локализована вторая триада взаимодействующих состояний. Что касается молекулы  $D_2^{32} S$ , из энергетического анализа удалось определить 4227 перехода с максимальными квантовыми числами  $J_{max}=28/28/20$  и  $K_{max}=18/19/11$  для полос  $\nu_1+\nu_2$ ,  $\nu_2+\nu_3$  и  $3\nu_2$  соответственно. Найденные переходы использовались для определения значений верхних уровней энергии, которые, в свою очередь, необходимы в процедуре определения параметров эффективного гамильтониана. Полученный набор параметров воспроизводит исходный спектр с  $d_{rms} = 1.97 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ . Для расчета параметров дипольного момента были использованы экспериментальные интенсивности 376 переходов. Набор из 10 параметров эффективного дипольного момента способен воспроизводить интенсивности 300 линий с  $d_{rms} = 3.1 \%$ . В процессе исследования было установлено, что примерно 3 - 4 % колебательно - вращательных переходов полосы  $3\nu_2$  подвержены воздействию состояний (110) и (011). В результате такого взаимодействия, некоторые переходы полосы  $3\nu_2$  перенимали интенсивности переходов, принадлежащих полосам  $\nu_1+\nu_2$  и  $\nu_2+\nu_3$ . Для того чтобы эффект «перетекания» интенсивностей был принят во внимание, в процедуре

варьирования также были задействованы главные параметры эффективного дипольного момента состояний (110) и (011). Также было показано, что пренебрежение взаимодействием между полосами приводит к ошибкам в расчете интенсивностей вплоть до 22 %. Содержание изотополога  $D_2^{34}S$  в образце было значительно меньше, чем содержание  $D_2^{32}S$ . Как следствие, переходы, принадлежащие  $D_2^{34}S$ , более слабые по сравнению с соответствующими переходами изотополога  $D_2^{32}S$ . По этой причине были проанализированы лишь 1215 перехода (см. статистическую информацию в таблице 1). Полоса  $3\nu_2$  оказалась достаточно слабой как следствие, в процессе интерпретации не удалось обнаружить в экспериментальных спектрах линии, принадлежащие данной полосе. Однако, опираясь на теорию изотопозамещения, были теоретически оценены значения невозмущенных параметров колебательной энергии, вращательного, центробежного искажения и параметров взаимодействия. Наличие теоретически оцененных параметров позволяет прогнозировать положения линий с точностью до  $0,10 - 0,15 \text{ см}^{-1}$  для уровней энергии с маленькими значениями квантового числа  $J$  полосы  $3\nu_2$ . Общий набор из 43 параметров эффективного гамильтониана воспроизводит экспериментальный спектр с  $d_{rms} = 2.39 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ . Полученные экспериментальные интенсивности линий использовались для определения параметров эффективных дипольных моментов полос  $\nu_1+\nu_2$  и  $\nu_2+\nu_3$ . В результате из решения обратной задачи были рассчитаны 6 параметров эффективного дипольного момента с  $d_{rms} = 9.7 \%$ . Анализ переходов, принадлежащих изотопологу  $D_2^{33}S$ , усложнялся тем фактом, что параметры основного состояния в литературе отсутствовали и метод комбинационных разностей оказался неприменим. Несмотря на это, были обнаружены 56 перехода как для  $P$  – так и для  $R$  – ветки полос  $\nu_1+\nu_2$  и  $\nu_2+\nu_3$ , что позволило построить 18 комбинационных разностей и оценить 4 параметра основного колебательного состояния. Полученный набор из 6 параметров эффективного гамильтониана воспроизводит экспериментальные верхние уровни энергии состояний (110) и (011) с  $d_{rms} = 2.29 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ .

Таблица 1 – Статистическая информация для исследуемых колебательных состояний молекул  $D_2^M S$  ( $M=32, 33, 34$ ) в диапазоне  $2300 - 2900 \text{ см}^{-1}$ .

Полоса	Центр/ $\text{см}^{-1}$	$J_{max}$	$K_{max}$	$N_t$	$N_l$
$D_2^{32}S$					
$\nu_1+\nu_2^a)$	2742.6659	28	18	1687	399
$\nu_1+\nu_2^b)$	2742.6657	21	10	1156	300
$3\nu_2^a)$	2549.0740	20	11	699	216
$3\nu_2^b)$	2549.0734	19	8	402	137
$\nu_2+\nu_3^a)$	2754.4516	28	19	1841	439

$\nu_2+\nu_3$ <sup>б)</sup>	2754.4519	21	11	1032	296
$d_{rms}$ <sup>а)</sup>	$1.97 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$				
$d_{rms}$ <sup>б)</sup>	$10.8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$				
$D_2^{34S}$					
$\nu_1+\nu_2$ <sup>а)</sup>	2738.3315	18	12	567	190
$\nu_2+\nu_3$ <sup>а)</sup>	2749.7439	23	12	648	220
$d_{rms}$ <sup>а)</sup>	$2.39 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$				
$D_2^{33S}$					
$\nu_1+\nu_2$ <sup>а)</sup>	2740.4339	14	1	22	12
$\nu_2+\nu_3$ <sup>а)</sup>	2752.0270	14	1	34	18
$d_{rms}$ <sup>а)</sup>	$2.29 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$				

а) результаты данной работы; б) из литературы [40];

$N_t$  – количество найденных переходов;  $N_l$  -количество определенных уровней энергии.

*Второй параграф* настоящей главы посвящен определению интенсивностей и полуширин спектральных линий высоковозбужденного колебательного состояния (050) молекулы  $H_2S$ . Детально описаны характеристики эксперимента, при которых были зарегистрированы спектры высокого разрешения в диапазоне 5500 - 6500  $\text{см}^{-1}$ . Экспериментальные интенсивности линий полосы  $5\nu_2$  определялись по подгонке их форм к профилю Артмана-Тран. В результате такого анализа были определены абсолютные интенсивности 176 переходов. Эти данные использовались в процедуре подгонки и позволили определить семь параметров эффективного дипольного момента, которые способны воспроизвести исходный спектр с  $d_{rms} = 3.4 \%$ . В данном параграфе также обсуждается сравнение полученных данных с результатами друг авторов. В частности, сравнение проводится с двумя наборами данных: данные из HITRAN 2016 года [41] и данные вариационных расчетов [42], см. рисунок 1.

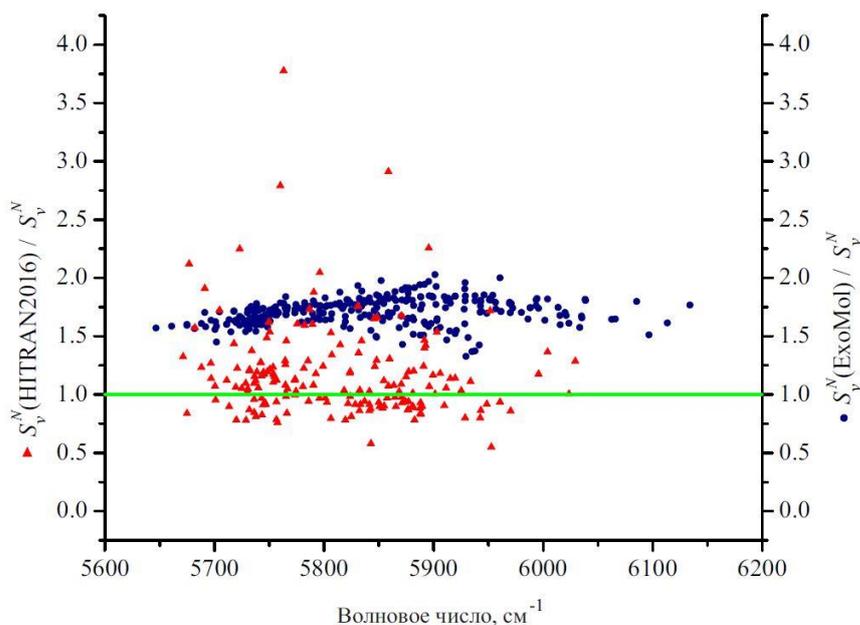


Рисунок 1 - Соотношения значений интенсивности линий  $S_v^N$  ( $_{HIT}$ ) к  $S_v^N$  (отмечено треугольникам) и  $S_v^N$  ( $_{ExoMol}$ ) к  $S_v^N$  (отмечено кружками) для линий полосы  $5v_2$  молекулы  $H_2^{32}S$ . Значения  $S_v^N$  - интенсивности, полученные нами в данном исследовании.

**Четвертая глава** состоит из двух параграфов и посвящена анализу спектров молекул высокой симметрии – это молекулы типа симметричного и сферического волчка. *Первый параграф* содержит информацию касательно анализа спектров молекулы  $CH_3D$  в области окна прозрачности метана  $1.58 \mu m$ . В частности, обсуждается предварительная обработка экспериментально зарегистрированных данных, необходимая для создания списка линий с указанием положений и абсолютных интенсивностей. Также детально обсуждается исследуемый спектральный диапазон, проводится анализ локализованных там полос, сопоставляются данные, имеющиеся в литературе, с текущим экспериментом, упоминается необходимость маркировки экспериментальных точек, отнесенных к «материнской» молекуле. В данном параграфе подробно описывается колебательно – вращательный анализ и применяемые для анализа подходы. Также здесь представлены основные результаты и сравнение полученных экспериментальных данных с данными *ab initio* расчетов. Статистическая информация представлена в таблице 2.

Таблица 2 – Статистическая информация для исследуемых колебательных состояний молекулы  $CH_3D$

№	Полоса	Центр, $cm^{-1}$	Ранее		В данной работе	
			$J_{max}/K_{max}$	$N$ линий	$J_{max}/K_{max}$	$N$ линий

1	$\nu_2+2\nu_5+\nu_6 (E)$	6236.182	6/5	41	9/6	319
2	$\nu_1+\nu_2+\nu_6 (E)$	6298.488	6/4	72	9/7	203
3	$\nu_2+\nu_4+\nu_6 (A_1)$	6337.064	7/4	53	10/8	152
4	$\nu_2+\nu_4+\nu_6 (E)$	6347.815			10/6	212
5	$3\nu_2 (A_1)$	6428.364	13/6	190	13/6	196
6	$\nu_1+3\nu_6 (A_1)$	6431.943	10/0	20	10/6	80
Итого				376		1162

Во втором параграфе приводится детальная информация о комплексном анализе спектров высокого разрешения молекул  $^M\text{SiD}_4$  ( $M=29,30$ ) в области локализации четырех фундаментальных полос  $\nu_2/\nu_4$  ( $550 - 800 \text{ см}^{-1}$ ),  $\nu_1/\nu_3$  ( $1480 - 1700 \text{ см}^{-1}$ ). Анализ положений линий производился совместно с подбором параметров эффективного гамильтониана. Поскольку концентрация молекул  $^{29}\text{SiD}_4$  в эксперименте была несколько выше (4,86%) концентрации  $^{30}\text{SiD}_4$  (3,09%), то для молекулы  $^{29}\text{SiD}_4$  количество переходов, полученных из анализа превышает количество переходов, определенных для молекулы  $^{30}\text{SiD}_4$  (см. статистическую таблицу 3).

Таблица 3 – Статистическая информация для исследуемых колебательных состояний молекул  $^M\text{SiD}_4$  ( $M=29,30$ )

Молекула	Полоса	Центр/ $\text{см}^{-1}$	$J_{max}$	$N_t$	$N_l$	$d_{rms}/10^{-4} \text{ см}^{-1}$
$^{29}\text{SiD}_4$	$\nu_2(E)$	689.88679	31	840	541	2.2
$^{29}\text{SiD}_4$	$\nu_4(F_2)$	672.93384	31	1641	883	2.1
$^{29}\text{SiD}_4$	$\nu_3(F_2)$	1596.21377	35	888	828	2.91
$^{30}\text{SiD}_4$	$\nu_2(E)$	689.89950	31	638	429	2.36
$^{30}\text{SiD}_4$	$\nu_4(F_2)$	671.43227	31	1356	834	2.47
$^{30}\text{SiD}_4$	$\nu_3(F_2)$	1594.10591	34	838	777	3.24

$N_t$  – количество найденных переходов;

$N_l$  – количество определенных уровней энергии.

Полученные значения энергетических уровней использовались в процедуре определения параметров эффективного гамильтониана. Полученные наборы параметров воспроизводят экспериментальные значения положений линий для молекул  $^{29}\text{SiD}_4$  и  $^{30}\text{SiD}_4$  с  $d_{rms} = 2.67 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$  и  $d_{rms} = 2.34 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$  соответственно. Для определения абсолютных интенсивностей были выбраны 221 и 134 не слабые, не насыщенные, отдельно стоящие линии из спектров молекул  $^{29}\text{SiD}_4$  и  $^{30}\text{SiD}_4$  соответственно. Выбранные линии были обработаны в специальной программе с использованием профиля Артмана – Тран. Все 355 экспериментально полученные значения интенсивностей использовались для определения параметров эффективного дипольного момента. Параметры,

полученные в результате подгонки, воспроизводят начальные экспериментальные интенсивности линий молекул  $^{29}\text{SiD}_4$  и  $^{30}\text{SiD}_4$  с  $d_{\text{rms}} = 5,5\%$  и  $d_{\text{rms}} = 6,5\%$  соответственно. В качестве иллюстрации проведенного анализа на рисунке 2 показаны несколько примеров подгонки формы линии.

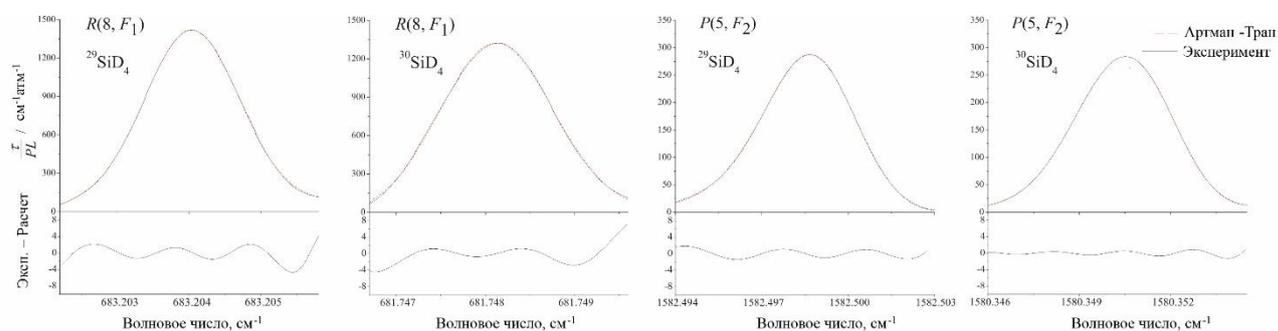


Рисунок 2 - Экспериментальные формы линий  $R(8, F_1)$  (полоса  $\nu_4$ ; спектр I) и  $R(5, F_2)$  (полоса  $\nu_3$ ; спектр VII) переходов изотопологов  $^{29}\text{SiD}_4$  и  $^{30}\text{SiD}_4$ , аппроксимированные профилем Артмана - Трап.

**В заключении** сформулированы основные выводы и результаты научного исследования:

- Разработан уникальный метод оценки парциальных давлений изотопологов в их смеси;
- Впервые получены аналитические соотношения между параметрами эффективного дипольного момента материнской молекулы и изотополога для молекул типа асимметричного волчка для фундаментальных полос;
- На основе полученных соотношений произведен расчет главного параметра эффективного дипольного момента для ряда молекул типа асимметричного волчка, с точностью, превышающей вариационные расчеты;
- Значительно улучшен анализ состояний второй триады молекулы  $\text{D}_2^{32}\text{S}$ ; получены 97 параметров эффективного гамильтониана, способные воспроизводить исходный спектр с точностью, превышающей в 10 раз точность предыдущих исследований;
- Впервые исследована колебательно-вращательная структура спектров изотопологов  $\text{D}_2^{33}\text{S}$  и  $\text{D}_2^{34}\text{S}$  диоксида серы в диапазоне  $2300\text{-}2900\text{ см}^{-1}$ ; получен набор параметров эффективного гамильтониана, способный воспроизводить исходный спектр с  $d_{\text{rms}} = 2.29 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$  и  $d_{\text{rms}} = 2.39 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$  соответственно;
- Впервые определены абсолютные интенсивности 300 линий полосы  $3\nu_2$  молекулы  $\text{D}_2^{32}\text{S}$ ; получен набор из 8 параметров эффективного дипольного момента, способный воспроизводить исходный спектр с  $d_{\text{rms}} = 3.1\%$ ;

- Впервые определены абсолютные интенсивности 800 линий полосы  $\nu_1+\nu_2$  и  $\nu_2+\nu_3$  молекулы  $D_2^{34}S$ ; получен набор из 6 параметров эффективного дипольного момента, способный воспроизводить исходный спектр с  $d_{rms} = 9.7\%$ ;
- Впервые определены параметры основного колебательного состояния молекулы  $D_2^{32}S$ ;
- Получен набор параметров эффективного дипольного момента колебательного состояния (050) молекулы  $H_2^{32}S$ , способный воспроизвести спектр с точностью, превосходящей имеющиеся в литературе данные; определены полуширины спектральных линий; подготовлен список линий по формату HITRAN;
- Значительно расширен диапазон данных о структуре колебательно-вращательного спектра молекулы  $CH_3D$  в области  $1.58\ \mu m$  окна прозрачности метана; впервые были определены порядка 800 колебательно-вращательных переходов;
- Разработан комплексный подход к изучению спектров высокого разрешения в области локализации сильно взаимодействующих состояний;
- Впервые осуществлен комплексный анализ спектров высокого разрешения молекул  $^M SiD_4$  ( $M=29,30$ ) в области локализации фундаментальных полос  $\nu_2, \nu_3, \nu_4$ .

### Цитируемая литература:

- [1] Thaddeus P. Interstellar hydrogen sulfide/ P. Thaddeus, R. W. Wilson, M. L. Kutner, et. al.// The Astrophysical Journal. –1972. –Т. 176. –С. 73 – 76.
- [2] Ukita N. Hydrogen sulfide in a circumstellar envelope/ N. Ukita, M. Morris // Astronomy and Astrophysics. – 1983. – Т. 121. – С.15 – 18.
- [3] Minh Y. C. Detection of interstellar hydrogen sulfide in cold, dark clouds/ Y. C. Minh, W. M. Irvine, L. M. Ziurys // The Astrophysical Journal. –1989. –Т.345. –С. 63 – 66 .
- [4] Minh Y. C. Observations of the H $_2$ S toward OMC-1 / Y. C. Minh, L. M. Ziurys, W. M. Irvine, D. McGonagle // The Astrophysical Journal. –1990. –Т. 360. –С. 136-141.
- [5] Macdonald G. H. A 330-360 GHz spectral survey of G 34.3+0.15. I. Data and physical analysis /G. H. Macdonald, A. G. Gibb, R. J. Habing, T. J. Millar // Astronomy and Astrophysics Supplement Series. –1996. –Т.119. – С.333-367.
- [6] Halonen L. Fermi resonances and local modes in water, hydrogen sulfide, and hydrogen selenide/ L. Halonen, Jr. T. Carrington //The Journal of Chemical Physics. – 1988. – Т. 88. – №. 7. – С. 4171-4185.

- [7] Kozin I. N. Fourfold clusters of rovibrational energy levels for H<sub>2</sub>S studied with a potential energy surface derived from experiment/ I. N. Kozin, P. Jensen //Journal of Molecular Spectroscopy. – 1994. – T. 163. – №. 2. – C. 483-509.
- [8] Polyansky O. L. The potential energy surface of hydrogen sulfide/ O. Polyansky, P. Jensen, J. Tennyson //Journal of Molecular Spectroscopy. – 1996. – T. 178. – №. 2. – C. 184-188.
- [9] Tyuterev V. G. An accurate isotopically invariant potential function of the hydrogen sulphide molecule/ V. G. Tyuterev, S. A. Tashkun, D. W. Schwenke //Chemical Physics Letters. – 2001. – T. 348. – №. 3 – 4. – C. 223-234.
- [10] Tyuterev V. G. Global variational calculations of high-resolution rovibrational spectra: isotopic effects, intensity anomalies and experimental confirmations for H<sub>2</sub>S, HDS, D<sub>2</sub>S molecules/ V. G. Tyuterev, L. Regalia-Jarlot, D. W. Schwenke, et al. //Comptes Rendus Physique. – 2004. – T. 5. – №. 2. – C. 189-199.
- [11] Cours T. Ab initio dipole moment function of H<sub>2</sub>S/ T. Cours, P. Rosmus, V. G. Tyuterev //Chemical Physics Letters. – 2000. – T. 331. – №. 2-4. – C. 317-322.
- [12] Cours T. Ab initio dipole moment functions of H<sub>2</sub><sup>32</sup>S and intensity anomalies in rovibrational spectra/ T. Cours, P. Rosmus, V. G. Tyuterev //The Journal of Chemical Physics. – 2002. – T. 117. – №. 11. – C. 5192-5208.
- [13] Tarczay G. The barrier to linearity of hydrogen sulphide/G. Tarczay, A. Csaszar, M. Leininger, W. Klooper //Chemical Physics Letters. – 2000. – T. 322. – №. 1-2. – C. 119-128.
- [14] Polovtseva E. R. Information system for molecular spectroscopy. 5. Rovibrational transitions and energy levels of the hydrogen sulfide molecule/ E. R. Polovtseva, N. A. Lavrentiev, S. S. Voronina, O. V. Naumenko, A. Z. Fazliev //Atmospheric and Oceanic Optics. – 2012. – T. 25. – №. 2. – C. 157-165.
- [15] Allen W. D. Geometrical structures, force constants, and vibrational spectra of SiH, SiH<sub>2</sub>, SiH<sub>3</sub>, and SiH<sub>4</sub>/ W. D. Allen, H. F. Schaefer//Chemical Physics. – 1986. – T. 108. – №. 2. – C. 243–274.
- [16] Chuprov L. A. High-resolution fourier-transform IR spectroscopic determination of impurities in silicon tetrafluoride and silane prepared from it/ L. A. Chuprov, P. G. Sennikov, K. G. Tokhadze, S. K. Ignatov, O. Schrems // Inorganic materials. – 2006. – T. 42. – №. 8. – C. 924 – 931.
- [17] Treffers R. R. Upper limits to trace constituents in Jupiter's atmosphere from an analysis of its 5- $\mu$ m spectrum/R. R. Treffers, H. P. Larson, U. Fink, T. N. Gautier //Icarus. – 1978. – T. 34. – №. 2. – C. 331 – 343.
- [18] Larson H. P. The middle - infrared spectrum of Saturn-Evidence for phosphine and upper limits to other trace atmospheric constituents/H. P. Larson, U. Fink, H. A. Smith, V. S. Davis //The Astrophysical Journal. – 1980. – T. 240. – C. 327–337.

- [19] Fegley Jr. B. Chemical models of the deep atmospheres of Jupiter and Saturn/ Jr. B. Fegley, K. Lodders //Icarus. – 1994. – T. 110. – №. 1. – C. 117–154.
- [20] Cochran A. L. Solar system science enabled with the next generation space telescope/ A. L. Cochran //Science With The NGST. – 1998. – T. 133. – C. 188.
- [21] Goldhaber D. M. Silane in IRC+ 10216/ D. M. Goldhaber, A. L. Betz //The Astrophysical Journal. – 1984. – T. 279. – C. L55–L58.
- [22] Monnier J. D. Mid - infrared interferometry on spectral lines. III. Ammonia and silane around IRC+ 10216 and VY canis majoris/J. D. Monnier, W. C. Danchi, D. S. Hale, P. G. Tuthill, C. H. Townes//The Astrophysical Journal. – 2000. – T. 543. – №. 2. – C. 868.
- [23] Steward W. B. The infrared absorption spectrum of silane/ W. B. Steward, H. H. Nielsen // Physical Review. – 1935. – T. 47. – №. 11. – C. 828.
- [24] Tindal C. H. The Vibration-Rotation Spectrum of SiH<sub>4</sub>/ C. H. Tindal, J. W. Straley, H. H. Nielsen // Physical Review. – 1942. – T. 62. – №. 3-4. – C. 151.
- [25] Wilkinson G. R. Infrared spectra of some MH<sub>4</sub> molecules/ G. R. Wilkinson, M. K. Wilson // The Journal of Chemical Physics. – 1966. – T. 44. – №. 10. – C. 3867-3874.
- [26] Cabana A. High resolution infrared measurements on the  $\nu_3$  vibration-rotation band of <sup>28</sup>SiH<sub>4</sub>/ A. Cabana, L. Lambert, C. Pepin //Journal of Molecular Spectroscopy. – 1972. – T. 43. – №. 3. – C. 429-440.
- [27] Cabana A. Vibration-rotation coupling between  $\nu_1$  and  $\nu_3$  in SiH<sub>4</sub>/ A. Cabana, D. L. Gray, I. M. Mills, A. G. Robiette //Journal of Molecular Spectroscopy. – 1977. – T. 66. – №. 1. – C. 174-176.
- [28] Cabana A. Analysis of the  $\nu_1$  and  $\nu_3$  infra-red bands of SiH<sub>4</sub>/ A. Cabana, D. L. Gray, A. G. Robiette, G. Pierre // Molecular Physics. – 1978. – T. 36. – №. 5. – C. 1503-1516.
- [29] Owyong A. High-resolution inverse Raman spectroscopy of the  $\nu_1$  band of SiH<sub>4</sub>/ A. Owyong, P. Esherick, A. G. Robiette, R. S. McDowell // Journal of Molecular Spectroscopy. – 1981. – T. 86. – №. 1. – C. 209-215.
- [30] Pierre G. Le niveau de base du silane obtenu à partir de l'étude du spectre à transformée de Fourier de  $\nu_2$  et  $\nu_4$ / G. Pierre , A. Valentin, L. Henry //Canadian Journal of Physics. – 1984. – T. 62. – №. 3. – C. 254-259.
- [31] Kattenberg H. W. Infrared and laser raman gas spectra of SiH<sub>4</sub> and SiD<sub>4</sub>/ H. W. Kattenberg, A. Oskam //Journal of Molecular Spectroscopy. – 1974. – T. 49. – №. 1. – C. 52-69.
- [32] Willetts D. V. Vibration-rotation Raman spectra of the  $\nu_3$  bands of SiH<sub>4</sub> and SiD<sub>4</sub>/ D. V. Willetts, W. J. Jones, A. G. Robiette // Journal of Molecular Spectroscopy. – 1975. – T. 55. – №. 1-3. – C. 200-216.

- [33] Qian H. High-resolution spectroscopy of  $\nu_3$  and  $\nu_1 + \nu_3$  bands of  $\text{SiD}_4$ / H. B. Qian, Q. S. Zhu, H. Ma, B. A. Thrush //Chemical Physics Letters. – 1992. – Т. 192. – №. 4. – С. 338-347.
- [34] Ulenikov O. N. First quantitative analysis of the  $\nu_2/\nu_4$  dyad of  $^{28}\text{SiD}_4$ : Line strengths and widths/ O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, et al. //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2018. – Т. 219. – С. 350-359.
- [35] Ulenikov O. N. First quantitative study of the high-resolution spectrum of  $^{28}\text{SiD}_4$  in the region of the  $\nu_3$  band: Line strengths and widths/ O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, et al. //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2018. – Т. 221. – С. 18-30.
- [36] Ulenikov O. N. Extended high resolution analysis of the second triad of  $\text{D}_2^{32}\text{S}$ ,  $\text{D}_2^{33}\text{S}$  and  $\text{D}_2^{34}\text{S}$  / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, et al. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2020. – V. 245. – P. 106879.
- [37] Ulenikov O. N. Extended analysis of the  $\nu_3$  band of  $\text{HD}^{32}\text{S}$ : Line positions, energies, and line strengths / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, et al. //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2019. – V. 230. – P. 131-141.
- [38] Ulenikov O. N. First line strength analysis of  $^{34}\text{SO}_2$  in the  $\nu_2$  region: Isotopic relations for the dipole moment parameters / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, et al. //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2019. – V. 229. – P. 166-178.
- [39] Sydow C. Extended analysis of FTIR high resolution spectra of  $\text{HD}^{32}\text{S}$  and  $\text{HD}^{34}\text{S}$  in the region of the  $\nu_2$  band: Positions and strengths of individual lines / C. Sydow, O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, et al. //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2019. – V. 225. – P. 286-300.
- [40] Liu A.-W. Global fit of the high-resolution infrared spectrum of  $\text{D}_2\text{S}$ / A. W. Liu, O. N. Ulenikov, G. A. Onopenko, et al. // Journal of Molecular Spectroscopy. – 2006. Т. – 238. С. –23 – 40.
- [41] Gordon I. E. The HITRAN 2016 molecular spectroscopic database/ I. E. Gordon, L. S. Rothman, C. Hill, et al. //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2017. – Т. 203. – С. 3 – 69.
- [42] High temperature molecular line list for modeling exoplanet atmospheres [Электронный ресурс]. URL:<http://www.exomol.com> (дата обращения: 13.04.2020)

#### **Публикации автора по теме диссертации:**

*Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты*

*диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:*

- [1] Ulenikov O. N. On the method of precise abundance determination of isotopologues in a gas mixture / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **A. S. Belova**, S. Bauerecker //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2019. – Т. 21. – №. 16. – С. 8464-8469. – DOI:10.1039/c9cp00750d. – 0,45 / 0,20 а.л.
- [2] Зяткова А. Г. Влияние изотопозамещения на параметры разложения эффективного дипольного момента в молекулах типа  $XY_2/XYZ$  / А. Г. Зяткова, А.С. Белова, О.В. Громова, Е.С. Бехтерева //Оптика и спектроскопия. – 2019. –Т. 127. – С. 364 – 372. – DOI: 10.21883/OS.2019.09.48187.48-19  
*в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:*  
Zyatkova A. G. The Influence of Isotopic Substitution on the Expansion Parameters of an Effective Dipole Moment in Molecules of  $XY_2/XYZ$  Type / A.G. Zyatkova, **A. S. Belova**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva //Optics and Spectroscopy. – 2019. – Т. 127. – №. 3. – С. 385-394. – DOI: 10.1134/S0030400X19090285. – 0,76 / 0,10 а.л.
- [3] Sydow C. First high-resolution analysis of the fundamental bands of  $^{29}\text{SiD}_4$  and  $^{30}\text{SiD}_4$ : Line positions and strengths / C. Sydow, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, N.I. Raspopova, **A. S. Belova**, S. Bauerecker, O.N. Ulenikov //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2019. – Т. 225. – С. 125-155. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.12.026. – 2,35 / 0,95 а.л.
- [4] Ulenikov O. N. On the method of precise abundance determination of isotopologues in a gas mixture: Effective dipole moment parameters for the fundamental bands of different isotopologues of  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{H}_2\text{Se}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{CS}$ , and  $\text{C}_2\text{H}_4$  / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **A. S. Belova**, S. Bauerecker //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2020. – Т. 242. – С. 106791. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.106791. – 0,68 / 0,35 а.л.
- [5] Ulenikov O. N. Experimental line strengths of the  $5\nu_2$  band of  $\text{H}_2^{32}\text{S}$  in comparison with the results of “variational” calculation and HITRAN database / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, N. I. Raspopova, **A. S. Belova**, C. Maul, C. Sydow //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2020. – Т. 243. – С. 106812. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.106812. – 0,98 / 0,35 а.л.
- [6] Ulenikov O. N. Extended high resolution analysis of the second triad of  $\text{D}_2^{32}\text{S}$ ,  $\text{D}_2^{33}\text{S}$  and  $\text{D}_2^{34}\text{S}$  / O. N. Ulenikova, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **A. S.**

- Belova, C. Sydow, S. Bauerecker** //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2020. – Т. 245. – С. 106879. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2020.106879. – 1,37 / 0,75 а.л.
- [7] Ulenikov O. N. Line strength analysis of the second overtone  $3\nu_2$  band of  $D_2^{32}S$  / O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, **A.S. Belova**, Yu.B. Morzhikova, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2021. – Т. 270. – С. 107686. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107686. – 1,1 / 0,52 а.л.
- [8] Белова А. С. Экспериментальные интенсивности линий колебательно – вращательных переходов в полосах  $\nu_1 + \nu_2$  и  $\nu_2 + \nu_3$  молекулы  $D_2^{34}S$ / А. С. Белова, Е. С. Бехтерева, Т. Ерсин, П. А. Глушков, Ф. Джан, К. Зидо // Известия ВУЗов. Физика. – 2022. – Т. 65. – 170 – 177. – DOI: 10.17223/00213411/65/1/170.  
*в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:*  
**Belova A. S.** Experimental ro-vibrational line intensities for the  $\nu_1 + \nu_2$  and  $\nu_2 + \nu_3$  bands of the  $D_2^{34}S$  molecule/ A. S. Belova, E. S. Bekhtereva, T. Ersin, P. A. Glushkov, F. Zhang, K. Sydow //Russian Physics Journal. – 2022. – Т. 65. – №. 1. – С. 185-192. - DOI: 10.1007/s11182-022-02621-5. – 0,53 / 0,30 а.л.

*Публикации в сборниках материалов конференций:*

- [9] **Belova A. S.** Determination of the effective dipole moment parameters for fundamental bands of isotopologues of different type molecules with the aim to obtain the precise abundance of isotopologue in the gas mixture / A. S. Belova, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, O. N. Ulenikov, S. Bauerecker // 26th International Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Dijon, France, August 26 - 30, 2019. – Dijon, 2019. – С. 48. – 0,08 / 0,06 а.л.
- [10] Ziatkova A. G. Influence of isotope substitution on the parameters of the dipole moment in molecules  $XY_2/XYZ$  type / A. G. Ziatkova, **A. S. Belova**, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, O. N. Ulenikov. // 26th International Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Dijon, France, August 26 - 30, 2019. – Dijon, 2019. – С. 248. – 0,08 / 0,02 а.л.
- [11] **Belova A. S.** Effective dipole moment parameters of  $XY_2$  type molecules calculated on the basis of isotopic substitution theory / A. S. Belova // XVII International Conference of Students and Young Scientists “Prospects of fundamental sciences developments”: Book of abstracts. Tomsk, Russia, April 24 - 27, 2020. – Tomsk, 2020. – С. 13. – 0,15 а.л.

- [12] **Belova A. S.** The absorption spectrum of CH<sub>3</sub>D in the 1.58 μm transparency window of methane / A. S. Belova, A. Campargue // XVIII International Conference of Students and Young Scientists “Prospects of fundamental sciences developments”: Book of abstracts. Tomsk, Russia, April 27–30, 2021. –Tomsk, 2021. –C. 71. – 0,23 / 0,15 а.л.
- [13] **Belova A. S.** Analysis of the CH<sub>3</sub>D absorption spectrum in the 1.58 μm transparency window of methane / A. S. Belova, A. Campargue, D. Modelain // 27th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts, 30 August - 3 September, 2021. – Virtual Conference, 2021. – C. 52. – 0,08 / 0,04 а.л.