

На правах рукописи



Конова Юлия Владимировна

**СПЕКТРОСКОПИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МНОГОАТОМНЫХ
МОЛЕКУЛ НА ПРИМЕРЕ МОЛЕКУЛЫ $C_2H_2D_2$ -цис**

01.04.05 – Оптика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Томск – 2020

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

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, PhD

Громова Ольга Васильевна

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 23 декабря 2020 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» по адресу: 634050, г. Томск, ул. Белинского, 55 или на сайте: dis.tpu.ru.

Автореферат разослан « » 2020 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета ДС.ТПУ.02:



Фомченко Анна Леонидовна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Колебательно-вращательная спектроскопия является одной из старейших и наиболее устоявшихся областей физики и химии. Исследование колебательно-вращательных спектров поглощения высокого разрешения позволяет детально изучить природу сил, действующих между ядрами в молекуле, определить ее структуру и рассчитать термодинамические величины. Фундаментальные частоты колебаний являются основой для дальнейших исследований обертоновых и комбинационных полос в более высокочастотном диапазоне, который, в свою очередь, предоставляет значительный объем информации о межатомных силах в молекулах различной симметрии. Существует несколько путей получения необходимой информации о структуре и внутренних свойствах молекул. Один из них - полуэмпирический метод: теоретическая база колебательно-вращательной спектроскопии применяется вместе с экспериментально зарегистрированными спектрами высокого разрешения. Параметры спектральных линий, полученные из эксперимента, содержат в себе данные о структурных и динамических параметрах молекул, таких как: структурные постоянные (длины связи и углы между ними), внутримолекулярное силовое поле, межмолекулярный потенциал, электрический и магнитный моменты.

Инфракрасные (ИК) спектры атмосферных газов были зарегистрированы Ангстремом ещё в конце девятнадцатого века, примерно за 40 лет до развития квантово-механического формализма, необходимого для понимания наблюдаемых спектров. Теория, лежащая в основе молекулярной спектроскопии, получила значительное развитие в период 1930–1950 гг. и была изложена, например, в классической серии книг Герцберга [1].

Оптическая спектроскопия в ИК диапазоне частот имеет большое значение для химического и структурного анализа веществ. Широко используемым аналитическим инструментом для химической идентификации неорганических, органических и биомедицинских материалов, а также для изучения явлений проводимости, является ИК спектроскопия с преобразованием Фурье. В ИК спектроскопии уникальная реакция веществ на широкополосное ИК освещение используется для их идентификации и последующей характеристики. Большинство характерных взаимодействий обнаруживаются в так называемой области «отпечатка пальца» ИК спектра, охватывающей длину волны 5–20 мкм (что соответствует волновым числам 400–2000 см⁻¹).

Теоретическая спектроскопия получила новый импульс с развитием компьютерной техники, и сегодня она все еще остается областью исследований, имеющей большое значение для многих научных областей, включая атмосферную физику и астрофизику, газоанализ, биофизику и др. Из-за сложности квантовой задачи многих тел точный расчет высокочастотного спектра даже для малых молекул остается очень сложной задачей. Однако, постоянное совершенствование вычислительной мощности и методологии делает теоретические подходы все более и более точными. Несмотря на то, что общая стратегия проста, технические детали, лежащие в основе расчетов, сложны и сильно зависят от размера исследуемой системы.

Данная диссертационная работа посвящена теоретическому и экспериментальному анализу спектров высокого разрешения молекулы типа асимметричного волчка – молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. Эта молекула является дважды дейтерированным изотопологом молекулы C_2H_4 .

Этилен является интересным и важным объектом изучения во многих областях академических и прикладных наук. Это самая легкая и простая молекула типа алкена (C_nH_{2n}), и поэтому ее можно рассматривать как самый простой пример прототипа молекул для понимания взаимосвязанных молекулярных спектров, динамики и построения потенциальных гиперповерхностей многих органических молекул.

Если обратить внимание на исследовательский интерес к изучению молекулы этилена с точки зрения прикладных аспектов, то можно отметить, во-первых, что данная молекула является природным соединением, содержащимся в атмосфере Земли. И, как составной её элемент, данная молекула оказывает влияние на химический состав атмосферы и глобальный климат, в целом. Молекула C_2H_4 вступает в реакцию с гидроксильным радикалом (ОН), в результате которой образуется озон, влияя тем самым на химию тропосферы, что делает этилен индикаторным газом. Его концентрация в воздухе, источники и поглотители представляют интерес для науки об атмосфере. В настоящее время изучение данной молекулы стало важно необходимым, т.к. за последние десятилетия производство этилена достигло огромных промышленных масштабов. Его используют в качестве сырья для производства целого спектра различных органических соединений (этанол, этиленгликоль, уксусная кислота и т.д.). Этилен служит исходным сырьем для производства полимеров (полиэтилен и др.). И, конечно, в ходе производства осуществляются колоссальные выбросы в атмосферу.

Следует также отметить, что исследование данной молекулы принесет вклад в улучшение не только жизни на планете Земля, но и поможет изучить атмосферы других планет. Это объясняется тем, что этилен был обнаружен в околозвездных облаках IRC10216 и CRL618 и был отмечен в качестве следового компонента атмосфер внешних планет Юпитер, Сатурн, Нептун и спутник Титан.

Также широко известно, что этилен является веществом, способным ускорять рост и созревание плодов и растений. Как следствие, его роль в биохимии, физиологии, метаболизме млекопитающих и экологии растений является предметом обширных исследований. По этим причинам в течение многих лет молекула этилена и ее различные изотопологи широко изучались.

Степень изученности проблемы.

Колебательно-вращательные спектры высокого разрешения молекулы $C_2H_2D_2$ -цис исследовались ранее авторами работ [2-7]. Впервые сведения о данном изотопологе этилена появились в работе [2] в 1953 году. В данной работе были теоретически рассчитаны центры фундаментальных полос. На основе 15 микроволновых переходов в 1981 г. были впервые определены пять центробежных параметров основного колебательного состояния, которые представлены в работе [3].

Спустя несколько лет авторами работы [4] были проделаны интенсивные исследования полос: ν_1 , ν_5 , ν_6 , ν_7 , ν_9 , ν_{11} , ν_{12} , $2\nu_{10}$, $\nu_3 + \nu_6$ и $\nu_2 + \nu_{12}$ молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в диапазоне 600–3100 cm^{-1} , при этом разрешение экспериментальных спектров составляло 0,03 cm^{-1} . В работах [5,6] выполнено уточнение параметров основного состояния на основе данных, полученных из ИК спектров полосы ν_7 . В Таблице 1 представлена статистическая информация по исследованию основного колебательного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ -цис другими авторами. В частности, представлена информация на основе экспериментальных данных какой полосы проводилось исследование и сколько комбинационных разностей основного состояния (КРОС) использовалось при анализе.

Таблица 1 – Информация по исследованию основного колебательного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ -цис

Работа	Год	Кол-во. КРОС	Полоса	Количество параметров	Разрешение cm^{-1}	Точность $10^{-4} cm^{-1}$
[3]	1981	15/МВ ^{а)}		8	0,05	30
[5]	2010	1331/ИК	ν_7	12	0,0063	10,5
[6]	2017	2634/ИК	ν_7	12	0,00096	2,6

^{а)} МВ – микроволновые переходы.

Анализируя Таблицу 1, можно отметить, что со временем значительно улучшается качество экспериментально зарегистрированных спектров, что, очевидно, приводит к большему количеству проинтерпретированных энергетических переходов и увеличивает точность полученных результатов.

Последние работы по исследованию спектров высокого разрешения молекулы $C_2H_2D_2$ -цис были посвящены более точному анализу полосы ν_7 [6] и исследованию полос ν_{10} и ν_8 [7].

Противоречия, выявленные в результате анализа литературных источников.

В процессе изучения литературных источников по данной тематике было замечено, что практически полностью отсутствует количественная информация о комбинационных, слабоинтенсивных и «запрещенных» по симметрии полосах молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. Если встречается информация о такого рода полосах, то колебательные состояния, соответствующие им, рассматриваются как «темные» в процедуре решения обратных задач. Это означает, что параметры эффективного гамильтониана не были точно определены для таких состояний. Большинство исследований, опубликованных в литературе, посвящено анализу спектров сильно интенсивных, фундаментальных полос. Однако, как хорошо известно, в ИК спектрах молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, помимо фундаментальных полос, проявляется большое количество комбинационных и обертоновых полос. В связи с этим, для получения полной, корректной информации об энергетической структуре спектра необходимо рассматривать систему резонирующих колебательных состояний,

близко расположенных друг к другу, а не исследовать состояния как изолированные.

Принимая во внимание всё вышеописанное, **целью работы** является: разработка алгоритма и создание на этой основе программы анализа колебательно-вращательной структуры спектров молекул типа $C_2H_2D_2$ –цис с учетом различного типа резонансных взаимодействий и последующее выполнение исследований впервые зарегистрированных спектров высокого разрешения.

Конкретная реализация этой цели включает в себя **решение следующих задач**:

- Разработка алгоритма и создание на этой основе программы анализа колебательно-вращательной структуры спектров молекул $C_2H_2D_2$ –цис с учетом различного типа резонансных взаимодействий;
- Исследование вращательной структуры экспериментально зарегистрированных впервые, либо с более точными количественными характеристиками, спектров молекулы $C_2H_2D_2$ –цис в диапазонах $580 - 1850 \text{ см}^{-1}$ и $2400 - 3200 \text{ см}^{-1}$;
- Уточнение параметров эффективного гамильтониана, описывающих вращательную структуру основного колебательного состояния;
- Усовершенствование методики решения обратной спектроскопической задачи для пяти и более сильно взаимодействующих колебательных состояний;
- Решение обратной спектроскопической задачи для 24 колебательных состояний с целью определения параметров, описывающих невозмущенную вращательную структуру колебательных состояний, а также параметров резонансных взаимодействий;
- Определение набора спектроскопических параметров эффективных дипольных моментов полос ν_3 и ν_{12} молекулы $C_2H_2D_2$ –цис на основе экспериментальной информации об абсолютных интенсивностях спектральных линий.

Научные положения, выносимые на защиту:

- Наличие большого числа колебательных степеней свободы у молекул низкой симметрии типа $C_2H_2D_2$ –цис для описания колебательной структуры даже нижних фундаментальных полос требует учета резонансных взаимодействий как Ферми-типа, так и всех трёх типов резонансов Кориолиса;
- Модифицированный в диссертационной работе алгоритм, и созданная на его основе компьютерная программа для молекулы $C_2H_2D_2$ –цис позволяют исследовать колебательно-вращательную структуру полос такого типа молекул с точностью, сопоставимой с экспериментальной погрешностью;
- Определенные из решения обратной спектроскопической задачи параметры эффективного дипольного момента позволяют восстанавливать абсолютные интенсивности линий колебательно-вращательных полос ν_3 и ν_{12} молекулы $C_2H_2D_2$ –цис с точностью 7,61% и 3,11%, соответственно.

Достоверность результатов, полученных в работе, подтверждается строгостью математических моделей и согласованностью рассчитанных и экспериментальных результатов, а также хорошим согласием с полученными ранее данными. В случаях, когда имеют место расхождения расчетных и экспериментальных значений, проведен детальный анализ и приведены обоснованные выводы.

Научная новизна определяется следующими факторами:

- Разработан алгоритм и на этой основе создана программа анализа вращательной структуры спектров сильно резонирующих колебательных полос молекул типа $C_2H_2D_2$ -цис;
- Уточнены параметры основного колебательного состояния, которые можно применять для исследования любых типов полос молекулы $C_2H_2D_2$ -цис с учетом максимальных значений квантовых чисел $J^{\text{макс}} = 55$ и $K_a^{\text{макс}} = 20$;
- Учёт резонансных взаимодействий Ферми и всех типов Кориолиса в модели эффективного гамильтониана позволил впервые провести исследования вращательной структуры «запрещенных» колебательных состояний молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, а также полос, обладающих малой интенсивностью;
- Впервые определены спектроскопические параметры эффективного гамильтониана для 24 колебательных состояний молекулы $C_2H_2D_2$ -цис;
- Впервые определены параметры эффективных дипольных моментов для полос ν_3 и ν_{12} молекулы $C_2H_2D_2$ -цис.

Теоретическая значимость:

- Получена новая информация о вращательной структуре спектров высокого разрешения молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в диапазоне $580\text{--}3200\text{ см}^{-1}$, включая структуру слабых полос;
- Усовершенствование методики решения обратной спектроскопической задачи для пяти и более сильно взаимодействующих колебательных состояний позволило достигнуть воспроизведения исходных экспериментальных данных с точностью близкой к экспериментальной;
- Параметры эффективного гамильтониана для молекулы $C_2H_2D_2$ -цис можно использовать для предсказания частот переходов, относящихся к колебательно-вращательным полосам, расположенных в спектральных диапазонах, не изученных до настоящего времени;
- Определенные из решения обратной задачи спектроскопические параметры для полос, соответствующих 10 фундаментальным колебаниям молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, могут быть использованы для дальнейшей теоретической оценки параметров комбинационных и обертоновых полос, не изученных в настоящее время.

Практическая значимость:

- Полученная из спектров высокого разрешения молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в диапазоне $580\text{--}3200\text{ см}^{-1}$ высокоточная информация является важным

дополнением к имеющейся информации в базах параметров спектральных линий;

- Набор параметров основного колебательного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ -цис является универсальным и может быть использован при исследовании вращательной структуры любого типа полос данной молекулы.

Основные методы исследования.

Для решения поставленных задач и достижения цели при выполнении диссертационной работы применялись методы квантовой механики, операторная теория возмущений, теория групп. В работе использовались методы колебательно-вращательной спектроскопии молекул и метод комбинационных разностей. По причине того, что объектом исследования является дейтерированная молекула - изотополог этилена, в работе была применена теория изотопозамещения. Для реализации нового метода построения эффективного гамильтониана были использованы языки программирования FORTRAN и MAPLE. Методы Фурье спектроскопии применялись при регистрации спектров высокого разрешения и их последующей обработке.

Внедрение результатов.

Результаты, полученные в диссертационной работе, были использованы в научных исследованиях, проводимых совместно Национальным исследовательским Томским политехническим университетом г. Томск (Россия) и Техническим университетом г. Брауншвейг (Германия). Аналитические методы и вычислительная компьютерная программа, разработанные в данном исследовании, могут быть использованы в академических и производственных организациях, чьим профилирующим направлением является спектроскопия высокого разрешения молекул, проблемы мониторинга атмосферы и газоанализа, например, Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН (г. Томск), Институт прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институт спектроскопии РАН (г. Троицк).

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

- Совместное участие в постановке задач и формировании цели работы с научным руководителем, к.ф.-м.н., PhD О. В. Громовой;
- Совместное участие в регистрации спектров высокого разрешения для молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в диапазонах $1050\text{--}2000\text{ см}^{-1}$ и $1800\text{--}2800\text{ см}^{-1}$ с проф. С. Бауэркером, профессором факультета физической химии, Технического университета Брауншвейга;
- Совместно с д.ф.-м.н., доцентом Е. С. Бехтеревой разработан алгоритм и создана на его основе компьютерная программа на языках программирования FORTRAN и MAPLE для молекул типа асимметричного волчка, применяемая для исследования спектров сильновзаимодействующих полос;

- Уточнение параметров основного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ -цис было сделано совместно с научным руководителем к.ф.-м.н., PhD О. В. Громовой и д.ф.-м.н., проф. О. Н. Уленевым;
- Проведение исследований вращательной структуры 16 колебательных состояний, находящихся в диапазоне $580\text{--}3200\text{ см}^{-1}$ молекулы $C_2H_2D_2$ -цис было выполнено совместно с научным руководителем, к.ф.-м.н., PhD О. В. Громовой и к.ф.-м.н. И. А. Коновым;
- Решение обратных спектроскопических задач с целью определения параметров эффективного гамильтониана, описывающих вращательную структуру 24 колебательных состояний и резонансные взаимодействия между ними, было выполнено совместно с научным руководителем, к.ф.-м.н., PhD О. В. Громовой и д.ф.-м.н., проф. О. Н. Уленевым;
- Анализ абсолютных интенсивностей полос ν_3 и ν_{12} молекулы $C_2H_2D_2$ -цис и определение параметров эффективного дипольного момента проделано совместно с д.ф.-м.н., доцентом Е. С. Бехтеревой.

Работа выполнялась при финансовой поддержке:

- Гранта программы конкурентоспособности Томского политехнического университета ВИУ-ФТИ-120 (2014-2016 гг.);
- Гранта программы конкурентоспособности Томского политехнического университета ВИУ-ФТИ-24/1026 (2016 г.);
- Гранта программы конкурентоспособности Томского политехнического университета ВИУ-ИШФВП-63/2019 (2019-2020 гг.);
- Гранта РФФИ 16-32-00305 мол_а (2016-2018 гг.);
- Гранта РФФИ 18-32-00116 мол_а (2018-2020 гг.);
- Гранта РФФИ 18-02-00819 А (2018-2021 гг.);
- Гранта РНФ 18-12-00058 (2018-2021 гг.);
- Совместного международного гранта Министерства образования и науки Российской Федерации и германской службы академических обменов DAAD по программе "Михаил Ломоносов" Линия А 4.9975.2017/DAAD (2017-2018 гг.);
- Стипендии Правительства Российской Федерации для аспирантов (приказ № 198 от 17.01.2019);
- Стипендии фонда некоммерческих программ «Династия» (2013-2014 гг.).

Апробация работы.

Полученные в ходе выполнения диссертационной работы научные результаты были представлены на международных и всероссийских конференциях. Работы представлялись как в виде устных, так и постерных докладов на русском и английском языках. Список конференций: 23-ая международная конференция по молекулярной спектроскопии высокого разрешения – HRMS 2014 (Болонья, Италия, 2014 г.), Международная научно-практическая конференция "Теоретические и прикладные вопросы науки и образования" (Тамбов, Россия,

2015), 21-ая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (Омск, Россия, 2015), 12-ая Международной конференция студентов и молодых ученых (Томск, Россия, 2015), 18-ый международный симпозиум-школа молодых учёных по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Томск, Россия, 2015), 24-ый Международный коллоквиум по молекулярной спектроскопии высокого разрешения – HRMS 2015 (Дижон, Франция, 2015 г.), 24-ая Международная конференция по молекулярной спектроскопии высокого разрешения – HRMS 2016 (Прага, Чешская республика, 2016 г.), 15-ая Международная конференция студентов и молодых ученых (Томск, Россия, 2017), 25-ый Международный коллоквиум по молекулярной спектроскопии высокого разрешения – HRMS 2017 (Хельсинки, Финляндия, 2017), 25-ая международная конференция по молекулярной спектроскопии высокого разрешения – HRMS 2018 (Бильбао, Испания, 2018), 26-ой международный коллоквиум по молекулярной спектроскопии высокого разрешения – HRMS 2019 (Дижон, Франция, 2019).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 18 печатных работ: 7 статей в журналах, рекомендованных ВАК (из них 4 статьи в международных журналах, реферируемых в *Web of Science* и *Scopus*); 11 публикаций в сборниках материалов всероссийских и международных конференций.

Объем и структура диссертации. Работа состоит из введения, трех глав и заключения, общим объемом 152 стр, в том числе, содержит 32 рисунка, 24 таблицы, одно приложение и список литературы из 72 источников.

Содержание работы.

Во **введении** обсуждается актуальность исследований, изложены цель и задачи работы, научные положения, выносимые на защиту, сформулированы научная ценность, новизна полученных результатов и их практическая значимость, проделан краткий литературный обзор о степени изученности другими учеными колебательно-вращательных ИК спектров молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. А также кратко описано содержание глав.

Первая глава носит обзорный характер. В ней изложена теория, применимая к колебательно-вращательной спектроскопии, описаны основные принципы и методы исследования. Глава содержит пять параграфов. Описаны основные принципы колебательно-вращательной теории, приближение Борна-Оппенгеймера, основные сведения из операторной теории возмущений, а также теория изотопозамещения, по причине того, что объектом является изотопозамещенная молекула. Последний параграф главы посвящен теории интенсивностей спектральных линий и эффективному дипольному моменту.

Вторая глава состоит из девяти параграфов.

В *параграфе 1* описываются теоретические характеристики молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, представлена таблица характеров неприводимых представлений и симметрий операторов в точечной группе симметрии C_{2v} . Описаны правила отбора

для каждого типа полос, а также приведена модель эффективного гамильтониана молекулы типа асимметричного волчка.

В *параграфе 2* описана специфика регистрации спектров в указанных диапазонах. Приводится описание используемого оборудования в спектрометрах, объясняются причины выбора той или иной характеристики.

В *параграфе 3* описаны результаты уточнения параметров основного колебательного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. 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 высокой точностью.

Изначально при исследовании полосы ν_{12} был обнаружен тот факт, что при высоких значениях квантовых чисел J и K_a наблюдается расхождение в значениях комбинационных разностей основного состояния, полученных из эксперимента и рассчитанных с параметрами, взятыми из работы [5]. По этой причине была поставлена задача по уточнению параметров основного колебательного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. Такая процедура производилась дважды (в 2016 году и четырьмя годами спустя) по причине того, что в 2016 году был зарегистрирован лишь один спектр высокого разрешения в диапазоне $1100\text{--}2000\text{ см}^{-1}$ при низком давлении. Уточнение параметров основного состояния проводилось на основе 400 КРОС, полученных из полосы ν_{12} при максимальных значениях квантовых чисел $J_{\text{макс}}=45$ и $K_a^{\text{макс}}=19$. Однако уже в 2020 году улучшение параметров основного состояния проводилось на основе новых экспериментальных данных (800 КРОС), полученных из полос $\nu_3(A_1)$, $\nu_{12}(B_1)$ и $\nu_7(B_2)$ с учетом энергий запрещенных переходов при максимальных значениях квантовых чисел $J_{\text{макс}}/K_a^{\text{макс}}=50/21$. Рассчитанное основное колебательное состояние можно считать универсальным для любого типа полос молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, т.к. определено с использованием переходов всех типов.

В Таблице 2 представлены для сравнения наборы параметров, взятые из работы [5] и данной диссертации. Из таблицы можно заметить, что в последнем наборе приведено больше параметров. Определение 12 центробежных параметров позволило достичь точности $1,9 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$.

Таблица 2 – Спектроскопические параметры основного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в (см^{-1})

Параметр	Работа [6] 2017 г	Данная работа 2016 г	Данная работа 2020 г
A	3,3245410	3,32454129(13)	3,3245 4048(12)
B	0,84782615	0,847825953(30)	0,847826025(33)
C	0,67376901	0,6737688(37)	0,673768776(36)

Продолжение таблицы 2

$\Delta_K \times 10^4$	0,48770	0,49105(67)	0,488018(44)
$\Delta_{JK} \times 10^5$	0,3690	0,36722(38)	0,36660(15)
$\Delta_J \times 10^5$	0,11783	0,117725(31)	0,117637(20)
$\delta_K \times 10^5$	0,6450	0,64619(72)	0,64643(60)
$\delta_J \times 10^6$	0,2875	0,28756(11)	0,28801(10)
$H_K \times 10^7$	0,279	0,172(29)	0,3406(25)
$H_{KJ} \times 10^9$		-0,377(19)	-0,3374(89)
$H_{JK} \times 10^{10}$		0,373(47)	
$H_J \times 10^{12}$	0,47	0,95(20)	1,49(24)
$h_{JK} \times 10^{10}$			0,464(50)
$h_J \times 10^{12}$			0,605(83)
$L_{KJJ} \times 10^{13}$			0,239(12)
$d_{\text{rms}} \times 10^4 \text{ а)}$	2,6	5,1	1,9

а) в см^{-1} .

Параграфы 4, 5 и 9 посвящены теоретическому исследованию колебательно-вращательной структуры спектров высокого разрешения молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис в диапазоне $580\text{--}1850 \text{ см}^{-1}$. Указанный диапазон для удобства исследования был разбит на 3 области: $580\text{--}1100 \text{ см}^{-1}$ (параграф 4), $1150\text{--}1450 \text{ см}^{-1}$ (параграф 5) и $1550\text{--}1850 \text{ см}^{-1}$ (параграф 9).

В спектральном диапазоне $580\text{--}1850 \text{ см}^{-1}$ расположены 14 колебательных состояний, из них 8 являются фундаментальными. Вращательная структура каждого фундаментального колебательного состояния была определена, включая состояния «запрещенные» по симметрии. Интерпретация переходов осуществлялась методом комбинационных разностей. На основе полученных из эксперимента переходов определялись энергии вращательных уровней колебательных состояний, которые использовались в качестве исходных данных при решении обратной спектроскопической задачи.

Следует отметить, что из 14 полос, проанализированных в данном диапазоне, вращательные структуры 9 полос (ν_{10} , ν_8 , ν_4 , ν_3 , $2\nu_{10}$, $\nu_8+\nu_{10}$, ν_2 , $2\nu_7$ и $\nu_6+\nu_{10}$) были исследованы впервые. В таблице 3 приведена статистическая информация об исследуемых полосах, расположенных в диапазоне $580\text{--}1850 \text{ см}^{-1}$. Выделенная в таблице информация соответствует впервые изученным полосам.

Как уже было сказано, диапазон $580\text{--}1850 \text{ см}^{-1}$ был разбит на 3 области. Это сделано для того, чтобы облегчить решение обратных спектроскопических задач. В качестве итоговых результатов исследований были получены наборы параметров эффективного гамильтониана, описывающих как невозмущенную

вращательную структуру колебательных состояний, так и различного рода резонансные взаимодействия между исследуемыми состояниями (резонансы Ферми и Кориолиса).

Значения среднеквадратичных отклонений (d_{rms}), полученных при решении обратных задач в диапазонах 580–1100 см^{-1} , 1150–1450 см^{-1} и 1550–1850 см^{-1} , составили $2,60 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $2,59 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ и $2,89 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, соответственно.

Таблица 3 – Статистическая информация для исследуемых колебательных состояний молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис в диапазоне 580–1850 см^{-1}

Полоса	Центр полосы/ см^{-1}	$J_{\text{макс}}$	$K_{\text{a}}^{\text{макс}}$	$N_{\text{пер}}$	$N_{\text{ур}}$
ν_{10}	662,8704	35	18	2311	576
ν_8	760,0106	18	7	36	7
ν_7	842,2092	45	22	4672	1091
ν_4	983,5527	19	7	23	6
ν_6	1039,7670	42	12	3483	853
ν_3	1217,8848	30	13	1666	411
$2\nu_{10}$	1330,6509	35	7	89	28
ν_{12}	1341,1505	50	21	3836	1106
$\nu_8 + \nu_{10}$	1423,9862	25	2	3	1
ν_2	1572,6891	21	7	327	81
$\nu_7 + \nu_8$	1600,0152	40	16	1511	568
$2\nu_7$	1685,2895	25	9	508	173
$\nu_6 + \nu_{10}$	1698,0641	35	12	1021	357
$\nu_4 + \nu_7$	1816,3581	41	15	2186	612
ИТОГО:				21672	5870

$N_{\text{пер}}$ – количество энергетических переходов;

$N_{\text{ур}}$ – количество уровней энергии.

Параграфы 6-8 посвящены экспериментальной регистрации и последующему исследованию абсолютных интенсивностей спектральных линий поглощения фундаментальных полос ν_3 и ν_{12} молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис.

Для анализа интенсивностей были зарегистрированы два спектра высокого разрешения. Из-за присутствия в образце некоторого количества различных молекулярных соединений ($\text{C}_2\text{H}_3\text{D}$, N_2O , C_2H_4 , H_2O и HDO) был проведен специальный анализ с целью определения парциального давления $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис в использованном образце (результаты приведены в Таблице 4). Оценка содержаний всех шести компонентов ($\text{C}_2\text{H}_3\text{D}$, N_2O , C_2H_4 , H_2O и HDO) была проделана на основе процедуры, описанной в работе [8]. Необходимая начальная информация об абсолютных интенсивностях соответствующих линий N_2O , C_2H_4 , H_2O и HDO была взята из базы данных HITRAN.

Таблица 4 – Оценка парциального давления различных молекулярных соединений в образце, используемом при регистрации спектров (VIII (200 Па) и IX (400 Па))

Соединение	Процентное содержание (спектр VIII)	Парциальное давление (VIII), в Па	Процентное содержание (спектр IX)	Парциальное давление (IX), в Па
H ₂ O	0,25	0,50	1,35	5,40
HDO	-	-	0,03	0,12
N ₂ O	0,03	0,06	0,03	0,12
C ₂ H ₄	0,28	0,56	0,32	1,28
C ₂ H ₃ D	2,29	4,58	3,32	13,28
C ₂ H ₂ D ₂ -цис	97,15	194,30	94,95	379,80

В *параграфе 7* описан следующий этап – исследование абсолютных интенсивностей линий, принадлежащих полосам ν_3 и ν_{12} молекулы C₂H₂D₂-цис, которое заключается в правильной аппроксимации контура спектральной линии теоретическим профилем. В данном исследовании был использован профиль Армана-Тран (АТ), который включает в себя все известные профили. В отличие от профиля Фойгта (свёртка профилей Лоренца и Доплера), профиль АТ учитывает зависимость параметров контура линии от изменения скоростей молекул при столкновениях. Правильный выбор профиля обеспечивает более высокую точность в определении интенсивностей линий, которые в дальнейшем используются в качестве исходных данных в процедуре определения параметров эффективного дипольного момента.

На заключительном этапе анализа путем аппроксимации контуров линий с помощью профиля АТ были получены абсолютные интенсивности 1515 переходов (1046 линий) полосы ν_{12} и 408 переходов (203 линии) полосы ν_3 молекулы C₂H₂D₂-цис. Чтобы проиллюстрировать качество анализа, на Рисунке 1 показаны примеры аппроксимации контуров линий, на основании которых были определены интенсивности линий, – отображены экспериментальные контуры линий, соответствующих переходам (16-1-15)←(15-1-14), (10-5-d)←(10-5-d) и (18-2-17)←(19-2-18) (спектр VIII) полосы ν_{12} . Варьирование экспериментальных контуров линий для указанных переходов было проделано с использованием профиля Армана-Тран. Сплошной и пунктирной линиями отображены экспериментальные и теоретически рассчитанные значения $\tilde{\tau}(\nu)$. В нижней части рисунка приведена разность экспериментальных и теоретически рассчитанных значений невязок.

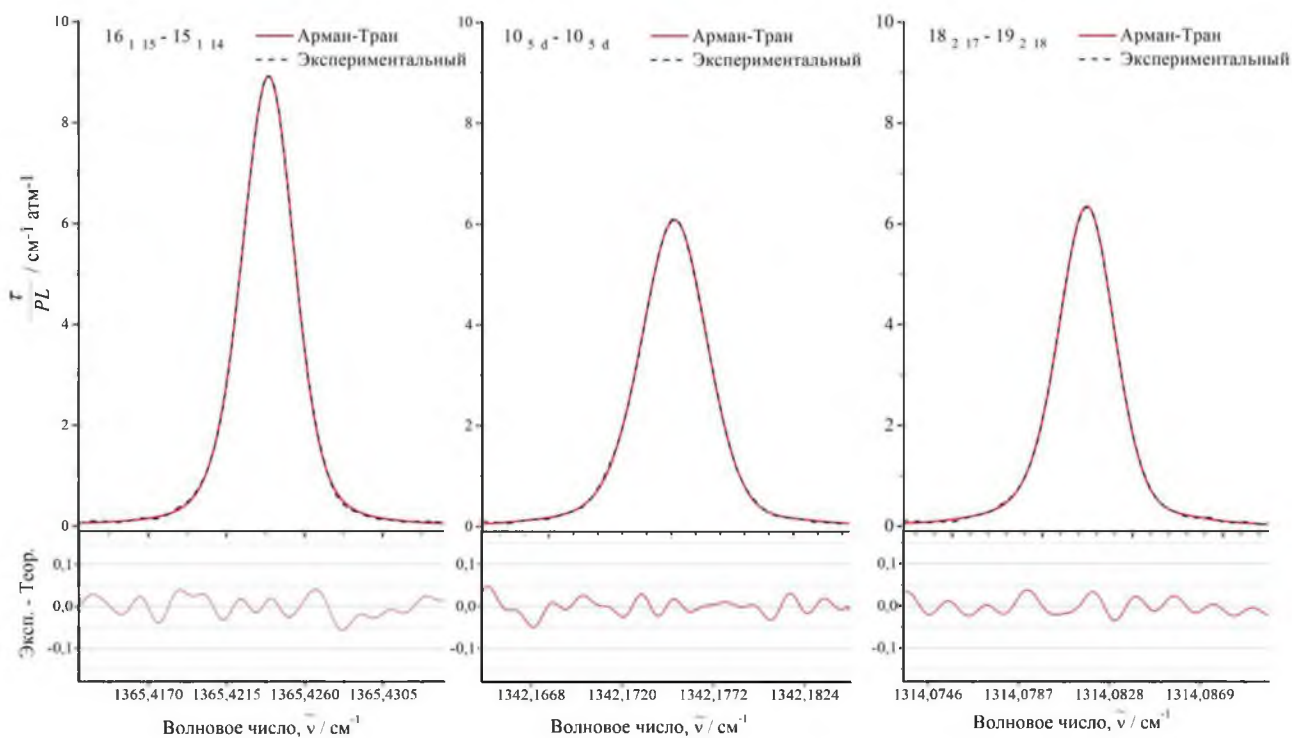


Рисунок 1 – Экспериментальные контуры линий, относящиеся к полосе ν_{12} молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис, аппроксимированные профилем Армана-Тран.

Полученные из экспериментальных данных 1515 (для полосы ν_{12}) и 408 (для полосы ν_3) интенсивности для переходов молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис использовались в качестве исходной информации в процедуре взвешенного варьирования (в данной работе начальные значения для слабой полосы ν_3 были взяты с весом 1/100 по сравнению с весами переходов полосы ν_{12} с целью определения значений параметров эффективных дипольных моментов этих двух полос).

Абсолютные интенсивности 1923 переходов, использованные в процедуре варьирования, позволили определить десять параметров эффективных дипольных моментов (шесть для полосы ν_{12} и четыре параметра для слабой полосы ν_3 ; результаты представлены в столбце 3 Таблицы 5 вместе с их статистическими доверительными интервалами 1σ , которые отображены в скобках). Полученный набор из шести параметров эффективного дипольного момента позволил воспроизвести 1046 исходных интенсивностей линий (1515 интенсивностей переходов) полосы ν_{12} ($J_{\text{макс}}=41$ и $K_a^{\text{макс}}=18$) с $d_{\text{rms}}=3,11\%$. Поскольку полоса ν_3 значительно слабее по сравнению с полосой ν_{12} , экспериментальные погрешности интенсивностей линий данной полосы хуже по сравнению с аналогичными погрешностями интенсивностей линий полосы ν_{12} . По этой причине четыре параметра эффективного дипольного момента полосы ν_3 , определенные в результате варьирования, воспроизводят 203 исходные интенсивности линий (408 интенсивностей переходов) полосы ν_3 ($J_{\text{макс}}=26$ и $K_a^{\text{макс}}=13$) со среднеквадратичным отклонением $d_{\text{rms}}=7,61\%$.

Таблица 5 – Спектроскопические параметры эффективных дипольных моментов полос ν_{12} и ν_3 молекулы $C_2H_2D_2$ -цис

Оператор	Параметр	Значение
k_{ZZ}	$(\nu_{12}=1)\mu_{z1}$	0,043828(36)
$\{k_{ZZ}, J_z^2\}$	$(\nu_{12}=1)\mu_{z2}/10^{-6}$	0,131(35)
$\{k_{ZZ}, J_z^2\}$	$(\nu_{12}=1)\mu_{z3}/10^{-5}$	0,156(21)
$\frac{1}{2}[\{k_{Zx}, iJ_y\} - \{ik_{Zy}, J_x\}]$	$(\nu_{12}=1)\mu_{z4}/10^{-3}$	-0,23628(96)
$\frac{1}{2}[\{k_{Zx}, J_xJ_z + J_zJ_x\} - \{ik_{Zy}, i(J_yJ_z + J_zJ_y)\}]$	$(\nu_{12}=1)\mu_{z5}/10^{-5}$	0,2583(97)
$\frac{1}{2}[\{k_{Zx}, iJ_y\} + \{ik_{Zy}, J_x\}]$	$(\nu_{12}=1)\mu_{z6}/10^{-3}$	0,2019(29)
k_{Zx}	$(\nu_3=1)\mu_{x1}/10^{-3}$	-0,175(19)
$\{ik_{Zy}, J_z\}$	$(\nu_3=1)\mu_{x4}/10^{-3}$	-0,3489(13)
$\{k_{ZZ}, iJ_y\}$	$(\nu_3=1)\mu_{x5}/10^{-4}$	-0,556(15)
$\{k_{ZZ}, J_xJ_z + J_zJ_x\}$	$(\nu_3=1)\mu_{x6}/10^{-5}$	0,2485(89)

Третья глава содержит в себе информацию о результатах исследований вращательной структуры экспериментально зарегистрированных спектров молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в диапазоне 2400–3200 см^{-1} и состоит из трех параграфов. При сравнении резонансных картин, к примеру, диапазона 1330–1500 см^{-1} и 2500–2750 см^{-1} (см. Рисунок 2), можно заметить насколько сильно усложняется энергетическая структура спектра, что приводит к затруднению идентификации переходов. С ростом энергии увеличивается плотность колебательных состояний, и, как следствие, уменьшается расстояние между центрами колебательно-вращательных полос (расстояние может достигать значения в 2-3 см^{-1}). Такая сложная структура спектра из близко расположенных полос осложняет также и процедуру решения обратной спектроскопической задачи, т.к. для корректного решения такой нетривиальной задачи необходимо учесть все возможные типы резонансных взаимодействий между исследуемыми колебательными состояниями.

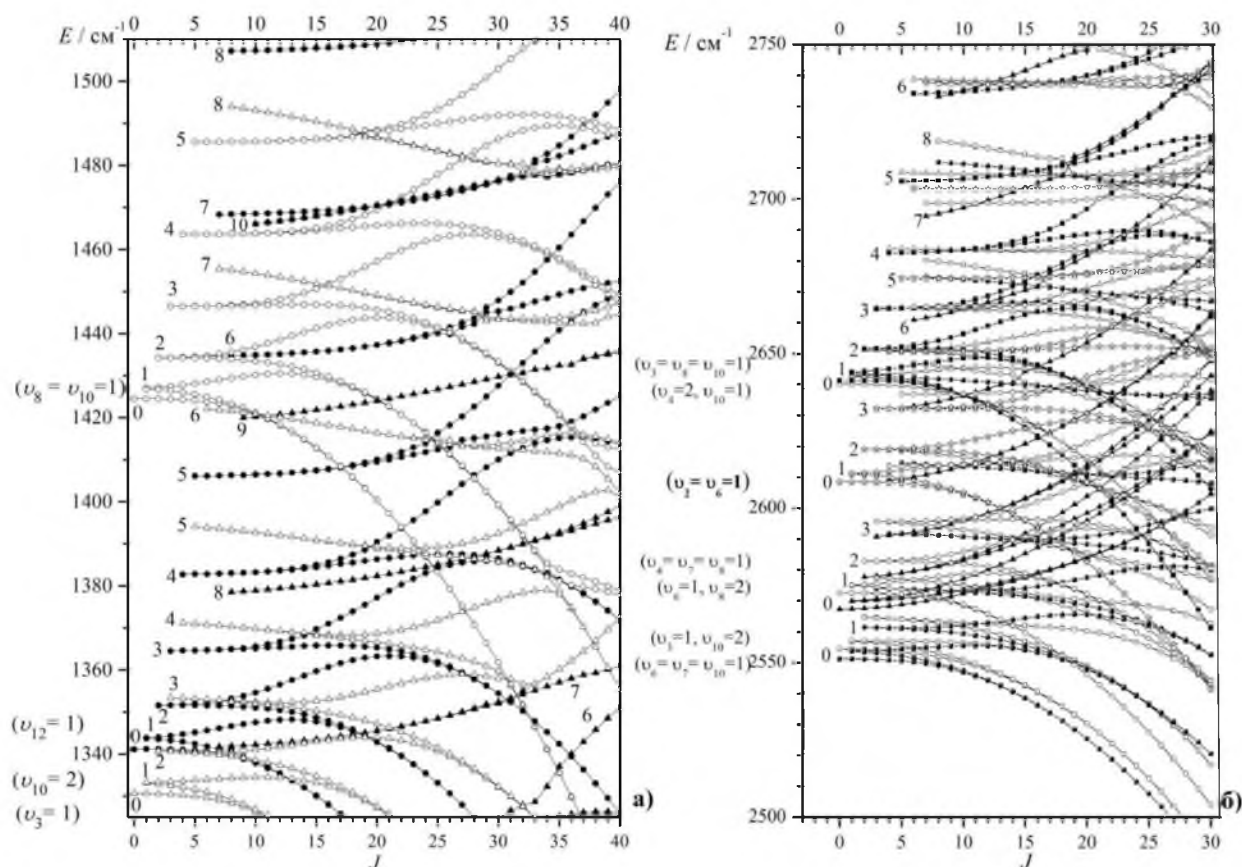


Рисунок 2 – а) резонансная картина в молекуле $C_2H_2D_2$ -цис в диапазоне $1330\text{--}1500\text{ см}^{-1}$; б) резонансная картина в молекуле $C_2H_2D_2$ -цис в диапазоне $2500\text{--}2750\text{ см}^{-1}$

В первом параграфе обсуждаются детали регистрации спектров в указанном диапазоне. Второй параграф посвящен анализу спектрального диапазона $2400\text{--}2750\text{ см}^{-1}$, в котором расположена интенсивная полоса $\nu_2+\nu_6$. Для того, чтобы корректно определить спектроскопические параметры эффективного гамильтониана, описывающие вращательную структуру колебательного состояния $(\nu_2=\nu_6=1)$, необходимо учитывать различного типа резонансные взаимодействия с близко расположенными 6 колебательными состояниями. В процессе интерпретации удалось идентифицировать только энергии переходов, относящихся к полосе $\nu_2+\nu_6$. По этой причине остальные колебательные состояния были учтены в процессе варьирования параметров как «темные» (статистическая информация отражена в Таблице 6). Для каждого исследуемого состояния были определены параметры диагональных блоков эффективного гамильтониана, а также был определен набор из 67 параметров резонансных взаимодействий. Следует отметить, что среднеквадратичное отклонение составило $3,98 \cdot 10^{-3}\text{ см}^{-1}$. Улучшить данную точность позволило бы определение хотя бы нескольких значений энергий верхних уровней для каждого колебательного состояния, рассмотренного как «темное» в данной работе. Однако рассматриваемые полосы являются слабоинтенсивными. Для решения данной задачи необходима регистрация спектров высокого разрешения с более высокими экспериментальными характеристиками.

Таблица 6 – Статистическая информация для исследуемых колебательных состояний молекулы C₂H₂D₂-цис в диапазоне 2400–2750 см⁻¹

Полоса	Центр полосы/ см ⁻¹	$J_{\text{макс}}$	$K_a^{\text{макс}}$	$N_{\text{пер}}$	$N_{\text{ур}}$
$\nu_3 + \nu_{10}$	2546,71	-	-	-	-
$\nu_6 + \nu_7 + \nu_{10}$	2550,12	-	-	-	-
$\nu_6 + \nu_8$	2562,11	-	-	-	-
$\nu_4 + \nu_7 + \nu_8$	2575,42	-	-	-	-
$\nu_2 + \nu_6$	2608,4617	35	17	1987	623
$\nu_3 + \nu_8 + \nu_{10}$	2633,99	-	-	-	-
$2\nu_4 + \nu_{10}$	2639,98	-	-	-	-
ИТОГО:				1987	623

$N_{\text{пер}}$ – количество энергетических переходов;

$N_{\text{ур}}$ – количество уровней энергии.

Третий параграф посвящен анализу спектров в диапазоне 2900–3200 см⁻¹. Данный диапазон представляет интерес с точки зрения исследования вращательной структуры фундаментальных полос ν_5 и ν_9 . Центры полос расположены близко к друг другу (на расстоянии около 6 см⁻¹ друг от друга), что усложняет процесс интерпретации линий. Однако большинство линий, принадлежащих данным полосам, обладают сильной интенсивностью, что позволило получить большой массив экспериментальных данных. В Таблице 7 представлена статистическая информация для исследуемых полос. Среднеквадратичное отклонение при решении обратной спектроскопической задачи для изолированных состояний ($\nu_5=1$) и ($\nu_9=1$) составило $d_{\text{rms}}=4,56 \cdot 10^{-3}$ см⁻¹ и $d_{\text{rms}}=4,12 \cdot 10^{-3}$ см⁻¹, соответственно. В дальнейшем планируется использовать данную экспериментальную информацию для решения обратной спектроскопической задачи для системы из 8 резонирующих состояний, расположенных в диапазоне 2900–3200 см⁻¹.

Таблица 7 – Статистическая информация для исследуемых колебательных состояний молекулы C₂H₂D₂-цис в диапазоне 2900–3200 см⁻¹

Полоса	Центр полосы/ см ⁻¹	$J_{\text{макс}}$	$K_a^{\text{макс}}$	$N_{\text{пер}}$	$N_{\text{ур}}$
ν_5	3054,7353	32	12	975	325
ν_9	3060,4238	40	16	1767	607
ИТОГО:				2742	932

$N_{\text{пер}}$ – количество энергетических переходов;

$N_{\text{ур}}$ – количество уровней энергии.

В заключении сформулированы основные выводы и результаты:

- Разработан алгоритм и создана на этой основе программа анализа колебательно-вращательной структуры спектров молекул типа $C_2H_2D_2$ -цис с учетом различного типа резонансных взаимодействий;
- Получены параметры основного колебательного состояния (3 вращательные постоянные и 12 параметров центробежного искажения), которые можно применять для исследования любого типа полос молекулы $C_2H_2D_2$ -цис с учетом максимальных значений квантовых чисел $J_{\text{макс}} = 55$ и $K_a^{\text{макс}} = 20$;
- Исследована вращательная структура зарегистрированных впервые, либо с более точными количественными характеристиками чем имелось ранее, ИК спектров высокого разрешения в диапазонах $580\text{--}1850\text{ см}^{-1}$ и $2400\text{--}3200\text{ см}^{-1}$ с целью уточнения и получения новой информации о возбужденных колебательных состояниях;
- Проведена идентификация более 21,5 тысячи линий в диапазоне $580\text{--}1850\text{ см}^{-1}$, принадлежащих 14 колебательно-вращательным полосам, у 9 колебательных состояний была впервые определена вращательная структура;
- Проведена идентификация более 5 тысяч линий в диапазоне $2400\text{--}3200\text{ см}^{-1}$, принадлежащих 3 колебательно-вращательным полосам: $\nu_2+\nu_6$, ν_9 и ν_5 ;
- Учёт резонансных взаимодействий Ферми и Кориолиса в модели эффективного гамильтониана, разработанной для молекул типа асимметричного волчка, позволил впервые провести исследования вращательной структуры «запрещенных» колебательных состояний молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, а также полос, обладающих малой интенсивностью;
- Получены спектроскопические параметры, описывающие не только невозмущенную структуру 24 колебательных состояний, но и параметры резонансного взаимодействия между исследуемыми состояниями молекулы $C_2H_2D_2$ -цис;
- Абсолютные интенсивности 1515 (для полосы ν_{12}) и 408 (для полосы ν_3) переходов были определены с помощью аппроксимации контуров линий профилем Армана-Тран;
- Определены спектроскопические параметры эффективных дипольных моментов полосы ν_3 и ν_{12} молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, позволяющие воспроизводить исходные данные полос с точностями $d_{\text{rms}}=7,61\%$ и $d_{\text{rms}}=3,11\%$.

Цитируемая литература:

1. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг; под ред. М. А. Ельяшевича // Москва: ИЛ. – 1965. – 648 с.
2. Crawbord B. L. The potential function of ethylene / B.L. Crawbord, J.E. Lancaster, R.G. Inskip // J. Chem. Phys. – 1953. – Vol. 21. – P. 678-688.
3. Hirota E. Microwave spectra of deuterated ethylenes: Dipole moment and r Z structure / E. Hirota, Y. Endo, S. Saito, K. Yoshida, I. Yamaguchi, K. Machida // J. Mol. Spectrosc. – 1981. – Vol. 89. – P. 223-231.
4. Hegelund F. Infrared study of the CD- and CH-stretching regions of cis-d₂-ethylene / F. Hegelund, F.M. Nicolaisen // J. Mol. Spectrosc. – 1988. – Vol. 132. – P. 216-237.
5. Tan T. L. High-resolution infrared analysis of the ν_7 band of cis-ethylene-d₂ (cis-C₂H₂D₂) / T.L. Tan, G.B. Lebron // J. Mol. Spectrosc. – 2010. – Vol. 261. – P. 87-90.
6. Tan T. L. Improved rovibrational constants for the $\nu_7 = 1$ state of ethylene-cis-1,2-d₂-(cis-C₂H₂D₂) by high-resolution synchrotron FTIR spectroscopy / T. L. Tan, L. L. Ng, M. G. Gabona, G. Aruchunan, A. Wong, D. R. T. Appardo // J. Mol. Spectrosc. – 2017. – Vol. 331. – P. 23-27.
7. Ng L. L. High-resolution synchrotron FTIR spectroscopic analysis of the Coriolis interaction between the $\nu_{10} = 1$ and $\nu_8 = 1$ states of ethylene-cis-1,2-d₂ / L. L. Ng, T. L. Tan, A. Wong, Dominique R. T. Appadoo, D. McNaughton // Mol. Phys. – 2016. – Vol. 114(19). – P. 2798-2807.
8. 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 H₂O, H₂S, H₂Se, SO₂, O₃, H₂CO, H₂CS, and C₂H₄ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, A. S. Belova, S. Bauerecker // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. - 2020. - Vol. 242. - P. 106791.

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 учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук:

1. Конов И. А. Анализ фурье-спектра высокого разрешения полосы ν_6 молекулы cis-C₂H₂D₂ / И. А. Конов, **Ю. В. Чертавских**, А. Л. Фомченко, Ю. С. Аслаповская, С. А. Жданович, К. Зидо // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, № 11. – С. 95–99. – 0,68 / 0,3 а.л.
в переводной версии журнала, индексируемой в Web of Science и Scopus:
Konov I. A. Analysis of the high-resolution fourier spectrum of the ν_6 band of the cis-C₂H₂D₂ molecule / I. A. Konov, **Yu. V. Chertavskikh**, A. L. Fomchenko, Yu. S. Aslapovskaya, S. A. Zhdanovich, C. Sydow // Russian Physics Journal. – 2015. – Vol. 58, is. 11. – P. 1587–1591. – DOI 10.1007/s11182-016-0687-x.
2. Ulenikov O. N. Re-analysis of the High Resolution FTIR Spectrum of C₂H₂D₂-cis in the Region of 1280–1400 cm⁻¹ / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, I. A. Konov, **Yu. V. Chertavskikh**, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of quantitative spectroscopy & radiative transfer. – 2016. – Vol. 170. – P. 69–82. – DOI 10.1016/j.jqsrt.2015.10.011. – 1,04 / 0,4 а.л. (*Web of Science и Scopus*).
3. **Копова Ю. В.** Исследование вращательной структуры «запрещённой» полосы ν_8 молекулы C₂H₂D₂-cis / Ю. В. Копова // Известия ВУЗов. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 9. – С. 168–172. – 0,35 а.л.
в переводной версии журнала, входящей в Web of Science и Scopus:
Konova Yu. V. Study of the rotational structure of the “forbidden” ν_8 band of the C₂H₂D₂-cis molecule / Yu. V. Konova // Russian Physics Journal. – 2018. – Vol. 60. – № 9. – p.1644–1649. – DOI 10.1007/s11182-018-1263-3.
4. **Копова Ю. В.** Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы C₂H₂D₂-cis в диапазоне 1620–1780 см⁻¹ / Ю. В. Копова, И. А. Конов, А. Г. Зяткова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2019. – Т. 62, № 2. – С. 161–166. – 0,48 / 0,35 а.л.
в переводной версии журнала, входящей в Web of Science и Scopus:
Konova Yu. V. Analysis of the high-resolution rovibrational spectrum of the C₂H₂D₂-cis molecule in the region 1620–1780 cm⁻¹ / Yu. V. Konova, I. A. Konov, A. G. Ziatkova // Russian Physics Journal. – 2019. – Vol. 62, is. 2. – P. 363–369. – DOI 10.1007/s11182-019-01720-0.
5. **Konova Yu. V.** Quantitative characteristics of high-resolution spectra to the benefit of astrophysics: The case of an ethylene molecule and its isotopologues / Yu. V. Konova, N. V. Kashirina, A. G. Ziatkova // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2019 – Vol. 516. – № 1. – DOI 10.1088/1757-899X/516/1/012001. – 0,30 / 0,25 а.л. (*Web of Science и Scopus*).
6. Ulenikov O. N. First high resolution analysis of the $\nu_2+\nu_6$ band of C₂H₂D₂-cis isotopologue of ethylene / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **Yu.**

- V. Konova**, C. Sydow // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2019. – Vol. 233. – P. 99-109. – DOI 10.1016/j.jqsrt.2019.05.019. – 1,49 / 0,85 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).
7. Ulenikov O. N. Ro-vibrational analysis of the $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -cis molecule spectra in the region of 1150–1450 cm^{-1} : The ν_{12} , ν_3 , $2\nu_{10}$ and $\nu_8+\nu_{10}$ bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **Yu. V. Konova**, A. N. Kakaulin, C. Sydow, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2020. – Vol. 250. – P. 107021. – DOI 10.1016/j.jqsrt.2020.107021. – 1,86 / 0,86 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).
- Публикации в прочих научных изданиях:*
8. Ulenikov O. N. High resolution spectroscopic study of cis- $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$: re-analysis of the ground state, ν_{12} , $\nu_4 + \nu_7$, $\nu_7 + \nu_8$ and ν_2 vibrational bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, I. A. Konov, **Yu. V. Chertavskikh**, C. Maul, S. Bauerecker // The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Bologna, Italy, September 02–06, 2014. – Bologna, 2014. – P. 243. – 0,05 / 0,01 а.л.
 9. **Чертавских Ю. В.** Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы cis- $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$: улучшение параметров основного состояния на основе полосы ν_{12} / Ю. В. Чертавских // Теоретические и прикладные вопросы науки и образования: Сборник научных трудов Международной научно-практической конференции – Тамбов, 31 января 2015. Тамбов: ООО «Консалтинговая компания Юком». – 2015. – С. 142-143. – 0,07 а.л.
 10. **Чертавских Ю. В.** Об уточнении параметров основного состояния молекулы cis - $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ на основе анализа колебательно-вращательного спектра полосы ν_{12} / Ю. В. Чертавских // XXI Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых. – Екатеринбург - Омск: издательство АСФ России. – 2015. – С. 415-416. – 0,08 а.л.
 11. **Чертавских Ю. В.** Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы $\nu_4+\nu_7$ молекулы cis- $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ / Ю.В. Чертавских // Перспективы фундаментальных наук [Электронный ресурс]: сборник трудов XII Международной конференция студентов и молодых ученых (Томск, 21–24 апреля 2015 г.) / Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета. – 2015. – С. 296-299. – 0,16 а.л.
 12. **Chertavskikh Yu. V.** High resolution analysis of the ν_{12} band and re-analysis of the ground state of cis-d₂-ethylene / Yu. V. Chertavskikh, I. A. Konov, A. S. Belova // XVIIIth Symposium and School on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2015): Abstracts of Reports. Tomsk, Russia, June 30–July 04, 2015. – Tomsk, 2015. – P. 116. – 0,04 / 0,01 а.л.
 13. Ulenikov O. N. High resolution spectroscopic study of the $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -cis spectra in the region of 580–1210 cm^{-1} : ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 and ν_{10} vibrational bands / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, I. A. Konov, **Yu. V. Chertavskikh**,

- S. Bauerecker, C. Maul // The 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Dijon, France, August 24–28, 2015. – Dijon, 2015. – P. 111. – 0,05 / 0,03 а.л.
- 14. Konov I. A.** High resolution analysis of the ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 and ν_{10} vibrational bands of $C_2H_2D_2$ -cis / I. A. Konov, **Yu. V. Chertavskikh**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, O. N. Ulenikov, S. Bauerecker // 24th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Prague, Czech Republic, August 30 – September 03, 2016. – Prague, 2016. – P. 170. – 0,05 / 0,02 а.л.
- 15. Конова Ю. В.** Об улучшении параметров основного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ -cis на основе высокоточных экспериментальных данных о полосах ν_{10} , ν_7 , ν_6 и ν_3 / Ю.В. Конова // Перспективы развития фундаментальных наук [Электронный ресурс]: сборник трудов XV Международной конференция студентов и молодых ученых (Томск, 25–28 апреля 2017 г.). Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета. – 2017. – С. 168-170. – 0,19 а.л.
- 16. Konova Yu. V.** Study of resonance interactions in the region of 1000–1500 cm^{-1} in the $C_2H_2D_2$ -cis molecule / Yu. V. Konova, I. A. Konov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, S. Bauerecker, O. N. Ulenikov // The 25th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Helsinki, Finland, August 20–25, 2017. – 2017. – P. 123. – 0,04 / 0,01 а.л.
- 17. Konova Yu. V.** Analysis of resonance interactions in the bands located in the region of 1500–1750 cm^{-1} in the $C_2H_2D_2$ -cis molecule / Yu. V. Konova, I. A. Konov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, S. Bauerecker, C. Sydow, O. N. Ulenikov // 25th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy: Abstract Book, Bilbao, Spain, September 03–07, 2018. – 2018. – P. 265. – 0,05 / 0,03 а.л.
- 18. Konova Yu. V.** Analysis of the high resolution FTIR spectra of the $C_2H_2D_2$ -cis molecule in the region 2900-3200 cm^{-1} / Yu. V. Konova, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, O. N. Ulenikov, S. Bauerecker // High Resolution Molecular Spectroscopy: Program and Abstracts of 26th Colloquium, Dijon, France, August 26-30, 2019. – Dijon: University of Burgundy Franche-Comte. – 2019. – P. 230. – 0,05 / 0,04 а.л.