

На правах рукописи



Болотова Ирина Баторовна

**НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ МЕТОДОВ
ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКТРОВ ВЫСОКОГО
РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛ ТИПА СФЕРИЧЕСКОГО,
СИММЕТРИЧНОГО И АСИММЕТРИЧНОГО ВОЛЧКА**

01.04.02 — Теоретическая физика

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Томск — 2015

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», на кафедре квантовой теории поля, и в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», на кафедре общей физики.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент
Бехтерева Елена Сергеевна

Научный консультант: доктор физико-математических наук, профессор
Уленков Олег Николаевич

Официальные оппоненты:

Эпп Владимир Яковлевич, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный педагогический университет», кафедра теоретической физики, профессор

Овсянников Роман Ильич, кандидат физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук», отдел 380 отделения нелинейной динамики и оптики, научный сотрудник

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук

Защита диссертации состоится 24 декабря 2015 г. в 14³⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 212.267.07, созданного на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке и на официальном сайте федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» www.tsu.ru.

Автореферат разослан « ____ » октября 2015 г.

Материалы по защите диссертации размещены на официальном сайте ТГУ:

<http://www.ams.tsu.ru/TSU/QualificationDep/co-searchers.nsf/newpublicationn/BolotovaIB24122015.html>

Ученый секретарь
диссертационного совета

Киреева Ирина Васильевна

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Спектроскопия высокого разрешения является одним из основных источников качественной и количественной информации о квантово-механических свойствах и строении молекул, а также динамических процессов внутри- и межмолекулярного характера. Информация о тонкой структуре спектров молекул, получаемая в результате анализа высокоточной экспериментальной информации, позволяет определить фундаментальные характеристики молекул. В частности, спектры высокого разрешения содержат информацию о структурных постоянных, внутримолекулярном силовом поле, электрическом и магнитном дипольных моментах молекулы. Наличие такой информации имеет важную как научную, так и прикладную ценность при решении задач атмосферной оптики, газоанализа, при исследовании атмосфер планет, а так же имеет множество других академических и прикладных приложений.

Таким образом, становится очевидной важность теоретического исследования колебательно-вращательных спектров высокого разрешения многоатомных молекул. Однако, указанная задача не является тривиальной и зачастую проблема анализа спектров высокого разрешения оказывается затруднительной ввиду сложностей, связанных с высокой симметрией молекул, наличием различного вида резонансов, а также с низкой интенсивностью регистрируемых спектров. Поэтому становится понятен интерес к разработке новых и модификации традиционных теоретических методов и подходов, направленных на разрешение указанных проблем при описании спектров высокого разрешения молекул.

Структура колебательно-вращательных спектров молекулы напрямую зависит от ее симметрии. Например, спектры молекул, относящихся к классам сферического, симметричного и асимметричного волчка имеют, с качественной точки зрения, различную структуру. Как следствие, методы и подходы к исследованию спектров высокого разрешения молекул, относящихся к тому или иному классу, имеют свои особенности и затруднения, требующие детального рассмотрения. Так, для молекул, относящихся к классу сферического волчка, ввиду наличия высокой симметрии, традиционные для колебательно-вращательной спектроскопии методы и подходы, такие, например, как метод комбинационных разностей, являются неприменимыми. Кроме того, наличие высокой (например, тетраэдрической) симметрии молекулы определяет наличие в её спектре расщеплений, носящих название «тетраэдрические расщепления». Для расчета «тетраэдрических» расщеплений с спектрах молекул типа сферического волчка необходимо наличие колебательных волновых функций и операторов, ответственных за расщепления. Если выражения для операторов, ответственных за тетраэдрические расщепления, известны в литературе [1], то для колебательных волновых функций известны лишь некоторые численные значения. В этом случае возникает необходимость отыскания аналитических выражений для колебательных волновых функций, симметризованных на группе симметрии T_d и на этой основе расчета тетраэдрических расщеплений высоковольтных колебательных состояний. Реализация такого подхода предполагает использование методов теории групп, квантовой механики и аппарата теории тензорной исчисления.

Следует отметить, что разработка методов исследования спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка и способов их реализации в виде компьютерных программ велась на протяжении многих лет. Однако, на настоящее время в мире существует лишь один реально работающий комплекс компьютерных программ, XTDS (X Top Data System), разработанный в университете Бургундии (Дижон, Франция). Несмотря на то, что с использованием этого комплекса программ выполнено большое количество исследований спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка, пакет программ обладает определенными недостатками. В частности, для пользователей пакет XTDS является «черным ящиком». При решении конкретных задач это оказывается в ряде случаев неудобным, в особенности, когда возникает необходимость внести те или иные изменения в программу. Кроме того, если для всех других типов молекул

современные программные пакеты позволяют исследовать различные отдельные полиады резонирующих колебательных полос, то в случае XTDS использование программы для исследования отдельного колебательного состояния или полиады состояний предполагает наличие информации о колебательно-вращательной структуре всех нижележащих состояний. Это неудобство накладывает определенные ограничения на применимость пакета, исключая возможность анализа высоковозбужденных состояний, которые зачастую представляют больший научный интерес.

В связи с вышесказанным в группе молекулярной спектроскопии Томского политехнического университета на протяжении последних лет разрабатывались подходы, основанные на методах квантовой механики и математическом аппарате теории неприводимых тензорных систем, позволяющие корректно описывать спектры высокого разрешения молекул, обладающих высокой симметрией. Целью такого рода теоретических исследований является разработка методов и их реализация в виде пакета программ, свободного от недостатков, указанных ранее.

Молекулы, относящиеся к классу симметричного волчка, являются менее симметричными, чем молекулы типа сферического волчка. Как следствие, проблема, связанная с расчетом «тетраэдрических расщеплений» в их спектрах отсутствует. Однако стоит отметить, что одной из основных проблем в задаче теоретического описания спектров высокого разрешения такого сорта молекул является наличие множественных резонансов между различными колебательными состояниями. В этом случае возникает необходимость одновременного рассмотрения большого количества спектроскопических параметров. В ряде случаев при решении таких задач возникает проблема взаимозависимости или корреляции параметров.

Одним из наиболее эффективных способов разрешения указанной проблемы является наличие некоторых добавочных соотношений между спектроскопическими параметрами, а также соотношений, связывающих спектроскопические параметры с параметрами различных изотопических модификаций молекулы.

Слабая степень симметрии молекул, относящихся к классу асимметричного волчка, освобождает задачу исследования спектров высокого разрешения таких молекул от некоторых проблем, обозначенных выше. Например, в молекулах такого типа естественным образом исключается проблема, связанная с «тетраэдрическими» расщеплениями энергетических уровней. Однако стоит отметить, что теоретический анализ колебательно-вращательных спектров молекул включает исследование не только фундаментальных, но также и различных комбинационных и «горячих» полос. Анализ последних, в свою очередь, затруднен тем, что интенсивность таких полос в экспериментальных спектрах иногда оказывается очень слабой. В связи с этим возникает необходимость теоретической разработки методов, позволяющих тем не менее проводить анализ сверхслабых спектров «горячих» полос.

Совокупность проблем современной теоретической спектроскопии, обозначенных выше, указывает на актуальность исследований, направленных на модификацию методов описания спектров молекул обладающих высокой симметрией, подходов к описанию резонансных взаимодействий между состояниями молекулы на основе имеющейся информации о её структуре и внутримолекулярной потенциальной функции, а также способов описания структуры спектров сверхслабых полос.

Указанные выше сложности, а также практическая значимость получаемой из анализа тонкой структуры спектров информации для различных задач астрофизики, физической химии, атмосферной оптики, газоанализа и многих других, определяют актуальность темы исследования, проводимого в рамках настоящей работы.

Работа посвящена отысканию способов и разработке методов решения некоторых проблем современной колебательно-вращательной спектроскопии многоатомных молекул,

возникающих при исследовании спектров высокого разрешения многоатомных молекул и связанных с симметрией объекта.

Цели и задачи работы :

- разработка методов теоретической оценки колебательно-вращательных параметров молекул, позволяющих в значительной мере упростить задачу анализа спектров высокого разрешения многоатомных молекул, отвечающих различному типу симметрии;
- разработка и практическая реализация в виде алгоритмов и компьютерных программ, позволяющих проводить анализ и описывать структуру спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка;
- реализация указанных методов и их применение к анализу колебательно-вращательных спектров реальных многоатомных молекул.

Конкретная реализация поставленной цели заключается в решении следующих **задач**:

- получение общих формул оценки величин спектроскопических параметров на основе информации о внутримолекулярной потенциальной функции молекулы с помощью теории неприводимых тензорных операторов и теории возмущений с последующим применением к молекуле CH_3F ;
- исследование тонкой структуры спектров молекул типа асимметричного волчка, XY_2 с применением метода оценки параметров и интерпретации сверхслабых полос;
- для молекулы XY_4 симметрии T_d расчет тетраэдрических расщеплений в спектре высокого разрешения и участие в разработке программного пакета для расчета и построения синтетического спектра молекулы типа сферического волчка с апробацией на примере молекулы германа, GeH_4 .

Научная новизна:

- в результате проведенных исследований разработан метод количественной оценки наиболее значимых резонансных параметров молекул типа XYZ_3 и XY_3 ;
- проведен анализ тонкой структуры зарегистрированных впервые, либо с гораздо лучшими экспериментальными условиями, спектров молекулы SO_2 ;
- впервые в аналитической форме получены выражения для колебательных волновых функций молекул типа сферического волчка (симметрии E). Полученный результат использован при разработке пакета программ для расчета спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка «*SPHETOM*».

Научная ценность:

- применимость полученных результатов для численной оценки величин спектроскопических параметров молекул типа XYZ_3 и XY_3 в значительной степени упрощает задачу анализа спектров высокого разрешения таких молекул, решая нетривиальную проблему, связанную с корреляцией параметров сильно взаимодействующих колебательно-вращательных полос;
- новая информация о структуре спектров высокого разрешения молекулы диоксида серы, в том числе и некоторых сверхслабых полос в спектре этой молекулы. Анализ

последних становится возможным во многом благодаря методу оценки параметров эффективного гамильтониана для соответствующих состояний, а также разработанной методике исследования слабых полос;

- наличие впервые полученных в аналитическом виде выражений для колебательных функций молекул типа сферического волчка позволило разработать пакет компьютерных программ *SPHETOM*, с помощью которого становится возможным расчет спектров высокого разрешения высоковозбужденных состояний молекул, обладающих высокой симметрией.

Практическая значимость:

- полученные для молекул типа симметричного волчка симметрии C_{3v} формулы, устанавливающие связь как между спектроскопическими параметрами молекулы и параметрами ее внутримолекулярной потенциалной функции, так и между самими спектроскопическими параметрами молекулы могут быть использованы для анализа спектров различных молекул, относящихся к указанному классу;
- информация о структуре спектров высокого разрешения молекулы SO_2 является существенным дополнением к существующим базам данных колебательно-вращательных спектров молекул и может быть использована в широком диапазоне практических приложений информации о тонкой структуре спектров молекул. Кроме того, показавший свою эффективность метод исследования спектров сверхслабых полос, может в дальнейшем быть применен в анализе слабоинтенсивных полос в спектрах других молекул;
- разработанный пакет программ для построения спектра молекулы сферического волчка находит практическое применение при исследовании спектров высокого разрешения широкого класса молекул XY_4 , обладающих симметрией T_d .

Разработанные в рамках диссертационной работы методы и модели, а также результаты, полученные на их основе, позволяют упростить процедуру описания сложных колебательно-вращательных спектров многоатомных молекул различной симметрии.

Полученные в рамках настоящего диссертационного исследования результаты использовались при выполнении совместных научных исследований Национального исследовательского Томского государственного университета и университета Бургундии (Франция), Оулу (Финляндия), Цюриха (Швейцария) и при чтении курсов лекций «Теоретические основы молекулярной спектроскопии», «Современные проблемы физики молекул» и «Физика атомов и молекул» в Томском государственном университете и в Томском политехническом университете.

Аналитические методы и вычислительные пакеты программ, разработанные в ходе выполнения настоящей диссертационной работы, могут быть использованы в академических и производственных организациях, чьим профилирующим направлением является спектроскопия высокого разрешения молекул, проблемы мониторинга атмосферы и газоанализа, а именно, Томский государственный университет, Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, Институт оптики атмосферы СО РАН (г.Томск), Институт прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институт спектроскопии РАН (г. Троицк Московской области).

Методология и методы исследования. Для решения перечисленных задач использовались методы квантовой механики, теории групп, операторной теории возмущений

и теории неприводимых тензорных систем. Для реализации программных алгоритмов были использованы языки программирования MAPLE и FORTRAN.

Положения, выносимые на защиту:

1. Использование аналитического представления элементов матрицы редукции для молекул XY_4 симметрии T_d позволяет получить в аналитической форме зависимость как колебательных, так и колебательно-вращательных энергий от параметров тетраэдрических расщеплений.
2. Компиляция теории неприводимых тензорных систем и операторной теории возмущений дает возможность получить новые ранее не известные соотношения между различными спектроскопическими параметрами, что в свою очередь позволяет предсказывать с высокой точностью значения некоторых типов резонансных параметров на основе хорошо определяемых из эксперимента значений параметров различного рода расщеплений в молекулах типа XY_3Z и XY_3 симметрии C_{3v} .
3. Разработанный применительно к молекулам типа асимметричного волчка метод определения структуры колебательно-вращательных полос, реализованный в виде вариационной процедуры, позволяет проводить анализ сверхслабых спектров высокого разрешения молекул XY_2 типа.

Степень достоверности результатов подтверждается:

- строгостью используемых математических моделей, непротиворечивостью полученных результатов и выводов;
- соответствием результатов теоретических исследований экспериментальным данным, известным в литературе ранее, либо полученным впервые в рамках настоящего исследования;
- согласованностью полученных в настоящей работе результатов с известными из литературы результатами *ab initio* расчетов.

Личный вклад автора:

- совместно с проф., д.ф.-м.н. Е. С. Бехтеревой, проф., д.ф.-м.н. О. Н. Улениковым участие в постановке задач;
- совместно с к.ф.-м.н. А. Л. Фомченко, проф., д.ф.-м.н. О. Н. Улениковым разработка математического аппарата на основе теории возмущений, а также получение соотношений и связей между различными спектроскопическими параметрами для молекул типа симметричного волчка;
- исследование тонкой структуры спектров молекулы CH_3F , а также, совместно с к.ф.-м.н. О. В. Громовой, проф., д.ф.-м.н. Е. С. Бехтеревой анализ тонкой структуры молекул SO_2 и GeH_4 ;
- совместно с Н. И. Распоповой, проф., д.ф.-м.н. О. Н. Улениковым разработка математической модели и принципиальных алгоритмических схем программного пакета SPHETOM, а также расчет тетраэдрических расщеплений в спектре молекулы германа GeH_4 ;

- совместно и под руководством проф., д.ф.-м.н. Е. С. Бехтеревой алгоритмизация и практическая реализация пакета программ для расчета колебательно-вращательного спектра молекулы типа сферического волчка, XY₄.

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

- 21 международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Кастелламара ди Стабия, Италия, 2009 г.);
- 21 международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Познань, Польша, 2010 г.);
- 17 всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Екатеринбург, Россия, 2011 г.);
- 22 международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Дижон, Франция, 2011 г.);
- 22 международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Прага, Чехия, 2012 г.);
- 112 ассамблее немецкого физико-химического общества (Карлсруэ, Германия, 2013 г.);
- 23 международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Будапешт, Венгрия, 2013 г.);
- Осенней сессии швейцарского химического общества (Лозанна, Швейцария, 2013 г.);
- 23 международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Болония, Италия, 2014 г.);
- Осенней сессии швейцарского химического общества (Цюрих, Швейцария, 2014 г.);
- 114 ассамблее немецкого физико-химического общества (Бохум, Германия, 2015 г.);
- 17 международном семинаре по квантовому атомному и молекулярному туннелированию (Беатенберг, Швейцария, 2015 г.);
- 24 международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Дижон, Франция, 2015 г.).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 27 печатных работах (из них 10 статей в изданиях, рекомендуемых ВАК и 17 — материалы и тезисы конференций).

Структура и объем диссертационной работы. Работа состоит из введения, четырех глав и заключения общим объемом 179 страниц, в том числе содержит 15 рисунков, 25 таблиц и список цитируемой литературы из 145 наименований.

Работа выполнялась при финансовой поддержке стипендии президента Российской Федерации (приказ №935 от 19 ноября 2012 г.) и стипендии фонда некоммерческих программ «Династия» (2013 г.) Исследования проводились, в частности, в рамках проекта ВИУ ФТИ_120 (Томский политехнический университет, 2014-2016 гг.), а также гранта президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (конкурс МК-2014 / Grant МК-4872.2014.2).

Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность проведенных научных исследований, сформулированы цели работы, указаны основные методы исследования, а также научные положения, выносимые на защиту. Также обоснована научная ценность и новизна представленных результатов, а также их практическая значимость, кратко описана структура диссертации и резюмировано содержание отдельных её глав.

Первая глава диссертации посвящена описанию необходимых для понимания оригинальной части работы принципов и методов колебательно-вращательной спектроскопии,

включающих построение колебательно-вращательного гамильтониана молекулы во внутримолекулярных координатах для произвольной нормальной молекулы, а также методику решения колебательно-вращательного уравнения Шредингера с эффективным гамильтонианом молекулы, являющимся функцией эффективных вращательных операторов. Изложены основные сведения из операторной теории возмущений.

Вторая глава посвящена рассмотрению особенностей вращательной структуры колебательных спектров молекул типа сферического волчка. Основной сложностью при исследовании колебательно-вращательной структуры спектров молекул, обладающих, например, симметрией T_d или O_h , является неприменимость традиционных методов (например, метода комбинационных разностей). Кроме того, высокая степень симметрии молекулы, обуславливает наличие в структуре её колебательно-вращательных спектров расщеплений, носящих название «тетраэдрические» расщепления. Для теоретического описания спектров в этом случае необходимо наличие в аналитической форме операторов, ответственных за тетраэдрические расщепления, а также волновых функций колебательных состояний.

Если выражения для операторов, ответственных за тетраэдрические расщепления, известны в литературе [1], то для колебательных волновых функций до недавнего времени были известны лишь некоторые численные значения. Таким образом, для описания колебательно-вращательных спектров молекул типа сферического волчка, предполагающего, в частности, расчет тетраэдрических расщеплений для высоковозбужденных состояний, необходимо с использованием методов теории групп и аппарата теории тензорного исчисления определить в аналитической форме выражения для колебательных волновых функций, симметризованных на группе симметрии T_d .

Следуя теории неприводимых тензорных операторов [2], можно показать, что симметризованные колебательные волновые функции молекулы XY_4 симметрии T_d должны иметь следующий вид:

$$|v_1; v_2 l_2 \gamma_2; v_3 l_3, v_4 l_4, l n_l \gamma_{34}; n \gamma \sigma\rangle = |v_1\rangle (|v_2 l_2 \gamma_2\rangle) \otimes (|v_3 l_3, v_4 l_4, l n_l \gamma_{34}\rangle)_\sigma^{n \gamma}. \quad (1)$$

Здесь $|v_1\rangle$ — элементарные функции невырожденного осциллятора, связанного с колебательной модой $|Q_1\rangle$; $|v_2 l_2 \gamma_2\rangle$ — симметризованные функции дважды вырожденного гармонического осциллятора, где γ_2 — симметрия этих функций; знак \otimes означает «тензорное произведение». Третьи функции, $|v_3 l_3, v_4 l_4, l n_l \gamma_{34}\rangle$, в правой части выражения (1) связаны с трижды вырожденными колебательными модами и имеют существенно более сложный вид по сравнению с первыми двумя:

$$\begin{aligned} |v_3 l_3, v_4 l_4, l n_l \gamma_{34}\rangle &= \sum_{m=-l}^l {}^{(l)}G_{n_l \gamma_{34} \sigma_{34}}^m \sum_{|l_3-l_4| \leq l \leq l_3+l_4} (|v_3 l_3\rangle \otimes |v_4 l_4\rangle)_m^l \\ &= \sum_{m=-l}^l {}^{(l)}G_{n_l \gamma_{34} \sigma_{34}}^m \sum_{|l_3-l_4| \leq l \leq l_3+l_4} C_{l_3 m_3 l_4 m_4}^{lm} |v_3 l_3 m_3\rangle |v_4 l_4 m_4\rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

В выражении (2) $C_{l_3 m_3 l_4 m_4}^{lm}$ — это коэффициенты Клебша-Гордана (см., например, [3]). Наибольшую сложность при определении волновых функций (2) представляют коэффициенты ${}^{(l)}G_{n_l \gamma_{34} \sigma_{34}}^m$ — элементы так называемых G -матриц, обеспечивающих редукцию функций, преобразующихся по неприводимым представлениям D^J группы $SO(3)$, к функциям, преобразующимся по неприводимым представлениям группы T_d . Как показано, например, в [4],

элементы G -матриц могут быть определены из решения системы линейных уравнений (3).

$$\sum_{m=-J}^J D_{mk}^{(J)}(\alpha, \beta, \gamma; R)^{(J)} G_{n\Gamma\sigma}^m = \sum_s D_{\sigma s}^{\Gamma}(R)^{(J)} G_{n\Gamma\sigma}^k. \quad (3)$$

Для решения системы уравнений (3) была создана программа на языке аналитического программирования MAPLE, с помощью которой были определены все отличные от нуля элементы G -матриц, ${}^{(l)}G_{n_1\gamma_{34}\sigma_{34}}^m$, для значений числа $J \leq 30$. Полученные значения элементов G -матриц были затем использованы в формуле (2) для построения симметризованных функций, относящихся к симметрии E .

Полученные таким образом впервые аналитические выражения для колебательных волновых функций молекул типа сферического волчка были использованы для построения матричных элементов операторов, ответственных за тетраэдрические расщепления в спектрах этих молекул.

Для решения этой задачи была создана программа на языке аналитического программирования MAPLE. В результате, были рассчитаны в виде аналитических функций спектроскопических параметров матричные элементы операторов тетраэдрических расщеплений для колебательных состояний с суммарным значением квантового числа $N \leq 4$ ($N = \nu_1 + \nu_2/2 + \nu_3 + \nu_4/2$). В качестве иллюстрации, несколько рассчитанных матричных элементов приведены в таблице 1.

Полученные результаты легли в основу разработанного пакета компьютерных программ SPHETOM, ориентированного на анализ спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка, а именно на интерпретацию спектров, а также решение

обратной спектроскопической задачи и расчет спектров молекул. Программа SPHETOM с успехом применена для решения всех указанных задач в спектре высокого разрешения молекулы герман GeH_4 . В качестве иллюстрации на рисунке 1, как результат анализа экспериментального спектра, приведен синтетически построенный спектр этой молекулы.

В **третьей главе**, посвященной рассмотрению спектров молекул типа симметричного волчка, методы и подходы операторной теории возмущений в матричной формулировке и теории неприводимых тензорных операторов использовались для отыскания в аналитическом

Таблица 1

Значения отличных от нуля матричных элементов операторов, ответственных за тетраэдрические расщепления.

$\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4, n$	$\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4, n$	Значение
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$	$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$	$-8T33$
$\nu_2 + 2\nu_3$	$\nu_2 + 2\nu_3$	$8T23 - 8T33$
$3\nu_2 + \nu_3, 2$	$3\nu_2 + \nu_3, 2$	$-16T23$

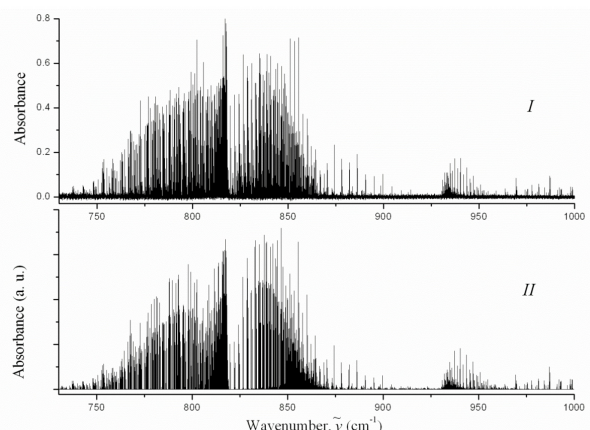


Рисунок 1 — Спектр молекулы GeH_4 . I — Экспериментальный спектр; II — Синтетический спектр молекулы, построенный с помощью разработанного пакета программ программы SPHETOM.

виде соотношений между спектроскопическими параметрами и их связью с параметрами внутримолекулярной потенциальной функции молекулы.

Молекула XYZ_3 (C_{3v}) — это молекула типа симметричного волчка, имеющая 9 колебательных степеней свободы симметрии A_1 и E . Наличие дважды вырожденных колебаний приводит к сложной картине колебательно – вращательных спектров молекулы. В частности, нередко в спектре энергий молекул типа симметричного волчка наблюдаются множественные резонансы состояний. Это приводит к тому, что при исследовании колебательно-вращательных спектров молекул такого типа часто возникает необходимость рассмотрения большого числа спектроскопических параметров. Задача при этом усложняется тем, что некоторые из параметров взаимозависимы, т. е. возникает проблема корреляции спектроскопических параметров.

Таким образом, возникает необходимость в начальной количественной информации о спектроскопических параметрах молекулы, а также в различного рода соотношениях между этими параметрами и их связью с параметрами внутримолекулярной потенциальной функции.

Наиболее эффективным подходом является использование свойств симметрии на основе результатов теории неприводимых тензорных операторов. В частности, известно, что различные вращательные операторы $R^{\Omega(K,n\Gamma)\sigma}$, симметризованные в соответствии с неприводимыми представлениями Γ группы симметрии C_{3v} , могут быть построены из неприводимых вращательных операторов $R_m^{\Omega(K)}$ группы симметрии $SO(3)$. Таким образом, можно определить неприводимые вращательные операторы группы симметрии C_{3v} , и, как следствие, смоделировать эффективный вращательный оператор, который будет учитывать все возможные в молекуле эффекты и взаимодействия.

Одним из важных и интересных результатов при решении этой задачи можно отметить полученные нами связи между некоторыми параметрами диагональных блоков эффективной операторной матрицы и параметрами резонансов Ферми и Кориолиса для некоторых типов взаимодействий. В качестве иллюстрации сказанного, ниже приводятся два типа полученных соотношений:

$$\eta^{v\Gamma, v\Gamma'} = -2iB_z^e(c_\lambda \zeta_{\lambda_1 \lambda_2}^z l_\lambda + c_\mu \zeta_{\mu_1 \mu_2}^z l_\mu + c_\nu \zeta_{\nu_1 \nu_2}^z l_\nu), \quad (4)$$

и

$$\gamma^{v\Gamma, v\Gamma'} = d_\lambda^{(v)} \gamma_\lambda + d_\mu^{(v)} \gamma_\mu + d_\nu^{(v)} \gamma_\nu, \quad (5)$$

где λ, μ, ν различны и

$$\begin{aligned} \gamma_\lambda = & -\frac{3}{8} \frac{(B_x^e)^2 B_z^e}{\omega_\lambda} (\tilde{a}_{\lambda_1}^{xz})^2 - \frac{3}{\sqrt{2}} (B_x^e)^2 \tilde{a}_{\lambda_1}^{xx} \frac{k_{\lambda\lambda\lambda}}{\omega_\lambda^{3/2}} - \sum_{\mu'} \frac{1}{\sqrt{2}} (B_x^e)^2 \tilde{a}_{\mu'}^{xx} \frac{k_{\lambda\lambda\mu'}}{\omega_{\mu'}^{3/2}} \\ & - \sum_i \frac{(B_x^e \zeta_{i\lambda_2}^x)^2}{4\omega_i \omega_\lambda} \left\{ \frac{(\omega_i + \omega_\lambda)^2}{\omega_i - \omega_\lambda} + \frac{(\omega_i - \omega_\lambda)^2}{\omega_i + \omega_\lambda} \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

В формулах (4) и (5) c и d — известные числовые коэффициенты. Выражение (4) позволяет связать между собой параметры Кориолисова расщепления η^{vE} , параметры Кориолисова взаимодействия η^{vA_1, vA_2} и параметры Ферми взаимодействия $\eta^{vnE, vmE}$ ($n, m = 1, 2, \dots$ и $n \neq m$), которые описывают взаимодействие между колебательными состояниями, имеющими одинаковый набор квантовых чисел v_a , но различные квантовые числа l_λ . Следует заметить, что параметры k - l расщепления из анализа экспериментальных данных определяются с высокой точностью. В то же самое время, параметры взаимодействия, как Кориолисова, так и Ферми, в силу корреляции между различными параметрами, часто определяются из

анализа экспериментальных данных с плохой точностью. Таким образом, на основе хорошо определяемых параметров $k-l$ расщепления с помощью полученных результатов можно предсказывать параметры резонансных взаимодействий.

Выражение (5) связывает между собой параметры вращательного расщепления a_1/a_2 ($K = 1$) γ^{vE} , параметры взаимодействия Кориолиса $\gamma^{vA_\lambda, vE}$ и параметры взаимодействия Ферми $\gamma^{v_n E, v_m E}$. Полученный результат позволяет предсказывать параметры резонансных взаимодействий на основе известных параметров фундаментальных полос, описывающих a_1/a_2 ($K = 1$) расщепления.

Полученные результаты, в частности выражения (4) и (5), были использованы при исследовании спектра высокого разрешения молекулы фторметана, являющегося классическим представителем молекул типа симметричного волчка. Колебательно-вращательная структура возбужденных состояний молекулы CH_3F была исследована в диапазоне $2400-2800 \text{ см}^{-1}$, где расположена полиада взаимодействующих состояний $\nu_2 + \nu_6$ (E), $\nu_5 + \nu_6$ (A_1) и $\nu_5 + \nu_6$ (E). На основе полученных общих формул были рассчитаны параметры, описывающие различные резонансные взаимодействия, что позволило выполнить интерпретацию спектра и описать спектр молекулы с высокой точностью.

Четвертая глава диссертации содержит описание разработанного метода исследования спектров сверхслабых колебательно-вращательных полос молекулы, а также его практическое применение к исследованию спектров различных полос молекулы SO_2 .

Задача исследования спектров высокого разрешения молекул зачастую осложняется низкой интенсивностью экспериментально зарегистрированных спектров. Это относится, в первую очередь, к спектрам «горячих» полос, т.к. линии, относящиеся к таким полосам значительно менее интенсивны, чем линии соответствующих фундаментальных или комбинационных полос и структура «горячего» спектра слабо различима на фоне интенсивных линий таких полос. Для разрешения этой проблемы предложен алгоритм, упрощающий процедуру анализа малоинтенсивных спектров молекул. Разработанная процедура отличается своей простотой и универсальностью и может быть кратко сформулирована в следующих этапах:

- оцениваются значения параметров колебательных энергий, например, на основе известных параметров внутримолекулярной потенциальной функции молекулы;
- проводится расчет оценочных значений вращательных и центробежных параметров состояния. Это может быть сделано, например, с помощью оценочной формулы (7):

$$P^{(v_1, v_2, v_3)} = P^{(0, 0, 0)} + \sum_{\lambda=1}^3 p_\lambda v_\lambda, \quad (7)$$

где $P^{(v_1, v_2, v_3)}$ — оцениваемый параметр состояния (v_1, v_2, v_3) , а $P^{(0, 0, 0)}$ представляет собой соответствующий параметр основного колебательного состояния молекулы;

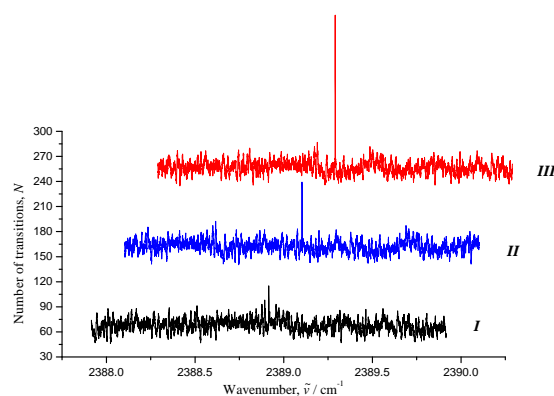


Рисунок 2 — Число N экспериментальных переходов, описываемых с точностью до 0.005 см^{-1} набором параметров (E, A, B, C) в зависимости от теоретического значения параметра колебательной энергии E для «горячей» полосы $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ в спектре молекулы SO_2 . Графики I-III соответствуют различным значениям вращательного параметра A .

- рассчитанные на основе полученных параметров переходы в исследуемых «горячих» полосах соотносят с экспериментально наблюдаемыми линиями в спектре (предварительно «очищенным» от более сильных переходов) и определяется число N переходов, удовлетворяющих условию $(\nu^{(exp.)} - \nu^{(calc.)}) \leq 0.005 \text{ см}^{-1}$;
- затем значения колебательной энергии E и вращательных параметров A , B и C варьируются с шагом 0.005 см^{-1} (для колебательной энергии) и 0.0005 см^{-1} (для вращательных параметров). Для каждого набора параметров колебательной энергии E и вращательных параметров A , B и C определяется соответствующее количество N экспериментальных положений линий, совпадающих с рассчитанным значением с точностью 0.005 см^{-1} и выше. Результатом данной процедуры является такой набор параметров $(E; A, B, C)$, для которого число N достигает максимального значения.

В качестве иллюстрации, на рисунке 2 показан график зависимости числа совпадений N в экспериментальном и теоретическом спектре в зависимости от величины колебательной энергии E при оптимальных значениях вращательных параметров A , B и C для «горячей» полосы $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$ молекулы SO_2 . Двумерные графики, приведенные на рисунке 2, соответствуют некоторому оптимальному значению параметров B и C , а кривые I-III соответствуют различным значениям вращательного параметра A . Следуя описанной схеме, на первом этапе были интерпретированы колебательно-вращательные переходы в полосах со значением квантового числа $J \leq 15$. Варьирование параметров гамильтониана на основе полученных экспериментальных данных дало возможность предсказать положение линий и интерпретировать экспериментальные данные вплоть до $J \leq 20$. Затем процедура повторялась с целью определения переходов с более высоким значением квантового числа J .

Таким образом, были исследованы спектры высокого разрешения молекулы SO_2 в диапазоне $1500\text{—}3000 \text{ см}^{-1}$, а именно спектры полос $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$, $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$, $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$, $2\nu_3$, $\nu_2 + 2\nu_3 - \nu_2$, $2\nu_1 + \nu_2$, $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$. Для дополнительной иллюстрации качества проведенных исследований на рисунке 3 приведен участок экспериментально зарегистрированного спектра высокого разрешения молекулы в сравнении с синтетическими спектрами комбинационной и горячей полосы, а также и их суммы.

В **заключении** сформулированы основные выводы и результаты проведенных исследований:

1. Для молекул типа сферического волчка определены в симметризованной форме колебательно-вращательные функции, а также в аналитической форме получены зависимости колебательных и колебательно-вращательных энергий молекулы XY_4 от параметров тетраэдрического расщепления.
2. Разработан пакет программ *SPHETOM*, позволяющий анализировать тонкую структуру спектров молекул типа сферического волчка. Простота и эффективность

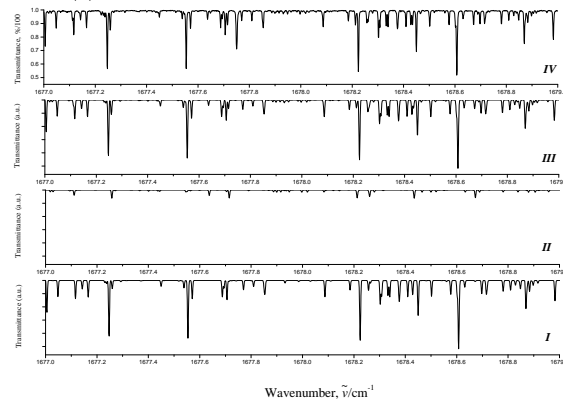


Рисунок 3 — Небольшой участок спектра высокого разрешения молекулы SO_2 в диапазоне Q -ветки полосы $\nu_1 + \nu_2$; знаком IV отмечен экспериментально зарегистрированный спектр молекулы, а остальные (I-III) представляют собой синтетический спектр молекулы: I и II — синтетические спектры холодной $\nu_1 + \nu_2$ и «горячей» $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$ полосы соответственно. Знаком III обозначен результат сложения спектров I и II.

пакета была с успехом показана на примере анализа колебательно-вращательных полос ν_2 и ν_4 молекулы GeH_4 .

3. На основе теории неприводимых тензорных операторов установлены соотношения между спектроскопическими параметрами молекул типа симметричного волчка.
4. Экспериментально зарегистрированный спектр молекулы CH_3F исследован в диапазоне $2600 - 2800 \text{ см}^{-1}$. Предсказанные на основе полученных в работе соотношений между спектроскопическими постоянными молекул типа симметричного волчка значения спектроскопических и резонансных параметров состояний $\nu_2 + \nu_6$ и $\nu_5 + \nu_6$ позволили с высокой точностью описать спектр этой молекулы.
5. Колебательно-вращательные спектры молекулы SO_2 исследованы в спектральном диапазоне $1500 - 3050 \text{ см}^{-1}$. Проведен анализ колебательно-вращательных полос $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$, $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$, $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$, $2\nu_3$, $\nu_2 + 2\nu_3 - \nu_2$, $2\nu_1 + \nu_2$, $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$. Разработан метод исследования тонкой структуры спектров сверхслабых полос, позволяющий исследовать спектры, анализ которых ранее был невозможен ввиду их слабой интенсивности. В частности, на основе разработанного метода впервые был проведен анализ «горячих» полос $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$, $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$, $\nu_2 + 2\nu_3 - \nu_2$, $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$.

Цитируемая литература

- [1] Hecht, K. T. The vibration-rotation energies of tetrahedral XY_4 molecules: Part I. Theory of spherical top molecules // J. Mol. Spectrosc. — 1961. — V. 5. — P. 355.
- [2] Fano, U., Racah, G. Irreducible tensorial sets. — New York: Academic Press, 1959. — 171 p.
- [3] Варшалович, Д. А., Москалев, А. Н., Херсонский, В. К. Квантовая теория углового момента. — Ленинград: Наука, 1975. — 439 с.
- [4] Cheglov, A. E., Ulenikov, O. N. On determination of the analytical formulas for reduction matrices of tetrahedral-symmetry molecules // J. Mol. Spectrosc. — 1985. — V. 110. — P. 53.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи в рецензируемых научных журналах, которые включены в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени доктора и кандидата наук:

1. Ulenikov, O. N. High Resolution Study of the $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$ and $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ «Hot» Bands and Ro-Vibrational Re-Analysis of the $\nu_1 + \nu_2 / \nu_2 + \nu_3 / 3\nu_2$ Pliad of the $^{32}\text{SO}_2$ Molecule / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, C. Leroy, V. - M. Horneman, S. Alanko // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. — 2011. — V. 112. — P. 486–512.
2. Ulenikov, O. N. High Resolution Analysis of the the SO_2 spectrum in the $2600 - 2900 \text{ см}^{-1}$: $2\nu_3$, $\nu_2 + 2\nu_3 - \nu_2$ and $2\nu_1 + \nu_2$ Bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, I. A. Konov, C. Leroy, V. - M. Horneman // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. — 2012. — V. 113 — P. 500–517.
3. Ulenikov, O. N. A High Resolution FTIR spectroscopic study of collisional-cooled CHF_3 : Reanalysis of strongly coupled states ν_2 and ν_5 / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, S. Albert, S. Bauerecker, H. Hollenstein and M. Quack // Chimia. — 2012. — V. 66. — P. 620.
4. Фомченко, А. Л. Некоторые вопросы определения спектроскопических параметров в аксиально-симметричных молекулах XYZ_3 симметрии C_{3v} // А. Л. Фомченко, А. Г. Литвиновская, Н. И. Распопова, **И. Б. Болотова**, Ю. С. Аслаповская,

В. А. Замотаева, Ю. В. Кривчикова, Ю. В. Чертавских // Известия ВУЗов. Физика. — 2013. — Т. 56. — No 7. — С. 104-109.

в переводной версии журнала:

Fomchenko A. L., On the determination of the spectroscopic parameters of axially symmetric XYZ_3 (C_{3v}) molecules / A. L. Fomchenko, A. G. Litvinovskaya, **I. B. Bolotova**, N. I. Raspopova, Yu. S. Aslapovskaya, V. A. Zamotaeva, Yu. V. Krivchikova, and Yu. V. Chertavskikh // Russian Physics Journal. - 2013. - V. 56. - P. 837-845.

5. Ulenikov, O. N. High Resolution Analysis of the FTIR spectra of CHF_3 : The ν_3 Fundamental Band and the Strongly Coupled Bands ν_2 , ν_5 , and $\nu_3 + \nu_6$ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, S. Albert, S. Bauerecker, H. Hollenstein and M. Quack // Chimia. — 2013. — V. 67. — P. 588.

6. Распопова, Н. И. О расчете параметров тетраэдрических расщеплений в колебательных спектрах молекул типа XY_4 симметрии T_d : определение колебательных функций в симметризованной форме / Н. И. Распопова, И. А. Конов, **И. Б. Болотова**, Ю. В. Кривчикова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. — 2013. — Т. 26. — No 2. — С. 239-248.

7. Ulenikov, O. N. High resolution analysis of the FTIR spectra and quantum dynamics of CHF_3 : $2\nu_4$ (A_1/E) band / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, S. Albert, H. Hollenstein and M. Quack // Chimia. — 2014. — V. 68. — No 6-7. — P. pс109.

8. Бехтерева, Е. С. Расчет колебательно-вращательной энергетической структуры молекул тетраэдрической симметрии типа XY_4 / Е. С. Бехтерева, О. В. Громова, Н. И. Распопова, **И. Б. Болотова**, Ю. В. Кривчикова, К. Б. Березкин // Известия ВУЗов. Физика. — 2014. — Т. 57. — No 7. — С. 99-103.

в переводной версии журнала:

Bekhtereva E. S., Calculations of the vibrational-rotational energy structure of molecules with tetrahedral symmetry of the type XY_4 / E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, N. I. Raspopova, **I. B. Bolotova**, Yu. V. Krivchikova, K. B. Berezkin // Russian Physics Journal. - 2014. - V. 57, P. 969-973.

9. Белова, А. С. Анализ спектра высокого разрешения слабой полосы поглощения $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ молекулы SO_2 / А. С. Белова, **И. Б. Болотова**, О. В. Громова, Е. С. Бехтерева, О. Н. Улеников // Известия ВУЗов. Физика. — 2014. — Т. 57. — No 11. — С. 59-61.

в переводной версии журнала:

Belova A. S., An analysis of the High-Resolution Spectrum of the Weak $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ Absorption Band of the SO_2 Molecule / A. S. Belova, **I. B. Bolotova**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, and O. N. Ulenikov // Russian Physics Journal. - 2015. - V. 57. - P. 1518-1524.

10. **Болотова, И. Б.** Анализ спектров высокого разрешения молекулы фторметана в диапазоне 2400-2800 cm^{-1} / **И. Б. Болотова** // Известия Томского политехнического университета. — 2015. — Т. 326. — С. 134-139.

Публикации в других научных изданиях:

11. Ulenikov, O. N. On the Intramolecular Potential Function of the Formadehyde Molecule / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, A. L. Fomchenko, **I. B. Bolotova** // Abstract 21st Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Castellammare di Stabia, Italy. — Castellammare di Stabia, 2009. — P. 204.

12. Ulenikov, O. N. High Resolution Study of the $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$ and $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ «Hot» Bands and Ro-Vibrational Re-Analysis of the $\nu_1 + \nu_2 / \nu_2 + \nu_3 / 3\nu_2$ Polyad of the SO_2 Molecule / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, C. Leroy, A. V. Gorbach, V. - M. Horneman and S. Alanko // Abstract 21st Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Poznan, Poland. — Poznan, 2010. — P. 195.

13. **Болотова, И. Б.** Исследование колебательно-вращательных спектров молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$: триада взаимодействующих полос $\nu_1 + \nu_2 / \nu_2 + \nu_3 / 3\nu_2$ и «горячие» полосы $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$ и $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ / **И. Б. Болотова** // *Материалы 17й Всероссийской Научной Конференции Студентов-Физиков и молодых ученых, Екатеринбург, Россия.* — Екатеринбург, 2011. — С. 300-301.
14. Gromova, O. V. High Resolution Analysis of the SO_2 Spectra in the Region of 2600–2900 cm^{-1} : $2\nu_3$, $\nu_2 + 2\nu_3 - \nu_2$, and $2\nu_1 + \nu_2$ Bands / O. V. Gromova, **I. B. Bolotova**, I. A. Konov, V. - M. Horneman, S. Alanko, C. Leroy, O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva // *Abstract 22nd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Dijon, France.* — Dijon, 2011, P. 52.
15. Ulenikov, O. N. On the Calculation of Tetrahedral Splittings in the A_1 , A_2 , E, F_1 , and F_2 Vibrational States of Methane-Type Spherical Top Molecules up to $N = 4$ ($N = \nu_1 + \nu_2/2 + \nu_3 + \nu_4/2$) / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, N. I. Raspopova, **I. B. Bolotova** and M. Quack // *Abstract 22nd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Dijon, France.* — Dijon, 2011. — P. 357.
16. Ulenikov, O. N. A High Resolution FTIR Spectroscopic Study of Collisional - Cooled CHF_3 : Re-Analysis of the Strongly Coupled States ν_2 , ν_5 , and $\nu_3 + \nu_6$ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, S. Albert, S. Bauerecker, H. Hollenstein, and M. Quack // *Abstract 22nd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Prague, Czech Republic.* — Prague, 2012. — P. 157.
17. Ulenikov, O. N. A High Resolution FTIR Spectroscopic Study of Collisional - Cooled CHF_3 : Re-Analysis of the Strongly Coupled States ν_2 , ν_5 , and $\nu_3 + \nu_6$ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, S. Albert, S. Bauerecker, H. Hollenstein, and M. Quack // *Abstract 112th General Assembly of the German Bunsen Society for Physical Chemistry, Karlsruhe, Germany.* — Karlsruhe, 2013. — P. 42.
18. Ulenikov, O. N. High Resolution Analysis of the FTIR Spectra of CHF_3 : The ν_3 Fundamental Band and the Strongly Coupled Bands ν_2 , ν_5 , and $\nu_3 + \nu_6$ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, S. Albert, S. Bauerecker, H. Hollenstein, and M. Quack // *Abstract 23rd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Budapest, Hungary.* — Budapest, 2013. — P. 120.
19. Ulenikov, O. N. High Resolution Analysis of the FTIR Spectra of CHF_3 : The ν_3 Fundamental Band and the Strongly Coupled Bands ν_2 , ν_5 , and $\nu_3 + \nu_6$ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, S. Albert, S. Bauerecker, H. Hollenstein, and M. Quack // *Abstract Leopoldina Symposium of German Chemical Society, Zurich, Switzerland.* — Zurich, 2013. — P. P10.
20. Ulenikov, O. N. High resolution analysis of the FTIR spectra and quantum dynamics of CHF_3 : $2\nu_4$ (A_1/E) band / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, S. Albert, H. Hollenstein, and M. Quack // *Abstract 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Bologna, Italy.* — Bologna, 2014. — P. 157.
21. Ulenikov, O. N. High resolution analysis of the FTIR spectra and quantum dynamics of CHF_3 : $2\nu_4$ (A_1/E) band / **I. B. Bolotova**, O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, S. Albert, H. Hollenstein, and M. Quack // *Abstract 114th General Assembly of the German Bunsen Society for Physical Chemistry, Bochum, Germany.* — Bochum, 2015. — P 320. — P2-23.
22. Albert, S. Synchrotron-based high resolution THz spectroscopy between 0.8 and 3 THz of molecules of atmospheric and interstellar interest / S. Albert, S. Bauerecker, **I. B. Bolotova**, Ph. Lerch, M. Quack, and A. Wokaun // *Abstract 114th General Assembly of the German Bunsen Society for Physical Chemistry, Bochum, Germany.* — Bochum, 2015. — P 139.
23. Ulenikov, O. N. High resolution analysis of the FTIR spectra and quantum dynamics of CHF_3 : $2\nu_4$ (A_1/E) band / **I. B. Bolotova**, O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, S. Albert, H. Hollenstein, and M. Quack // *Abstract XVIIth International Workshop on Quantum Atomic and Molecular Tunneling in Solids and other Phases, Beatenberg, Switzerland.* — Beatenberg, 2015. — P-7.

24. Albert, S. High resolution infrared spectroscopy and theory of parity violation and tunneling for dithiine as a candidate for measuring the parity violating energy difference between enantiomers of chiral molecules / S. Albert, **I. B. Bolotova**, Z. Chen, C. Fabri, L. Horny, M. Quack, G. Seyfang, and D. Zindel // Abstract XVIIth International Workshop on Quantum Atomic and Molecular Tunneling in Solids and other Phases, Beatenberg, Switzerland. — Beatenberg, 2015. — P-10.
25. Albert, S. Synchrotron-based high resolution THz spectroscopy between 0.8 and 3 THz using a collisional cooling multireflection cell / S. Albert, S. Bauerecker, **I. B. Bolotova**, Ph. Lerch, M. Quack, and A. Wokaun // Abstract 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Dijon, France. — Dijon, 2015. — P-L7. — P. 260.
26. Albert, S. High resolution GHz and THz spectroscopy and theory of parity violation and tunneling for dithiine as a candidate for measuring the parity violating energy difference between enantiomers of chiral molecules / S. Albert, **I. B. Bolotova**, Z. Chen, C. Fabri, L. Horny, M. Quack, G. Seyfang, and D. Zindel // Abstract 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Dijon, France. — Dijon, 2015. — P-O16. — P. 359.
27. Bolotova, I. B. High resolution spectroscopy and quantum dynamics of fluoroform / **I. B. Bolotova**, O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, S. Albert, H. Hollenstein, and M. Quack // Abstract 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Dijon, France. — Dijon, 2015. — P-Q18. — P. 415.