

На правах рукописи



Аслаповская Юлия Сергеевна

**СПЕКТРОСКОПИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛ
ТИПА АСИММЕТРИЧНОГО ВОЛЧКА НА ПРИМЕРЕ
МОЛЕКУЛЫ $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ И ЕЁ ИЗОТОПОЛОГА $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$**

01.04.05 – Оптика

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2018

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

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Уленев Олег Николаевич

Официальные оппоненты:

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

Овсянников Роман Ильич, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук», отдел 380, научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт спектроскопии Российской академии наук

Защита диссертации состоится 25 октября 2018 г. в 14 час. 30 мин. часов на заседании диссертационного совета Д 212.267.04, созданного на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36 (Главный корпус ТГУ, аудитория 119).

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.

Материалы по защите диссертации размещены на официальном сайте ТГУ:
<http://www.ams.tsu.ru/TSU/QualificationDep/co-searchers.nsf/newpublicationn/AslapovskayaYuS25102018.html>

Автореферат разослан «_____» сентября 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Пойзнер Борис Николаевич

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения является одним из основных источников информации о важнейших характеристиках объектов микромира. Методы молекулярной спектроскопии позволяют изучить характер, структуру и внутренние свойства различных многоатомных молекул. Наличие такого рода информации является важным моментом для успешного решения разнообразных фундаментальных и прикладных вопросов многих разделов химии, физики и биологии, таких как физика и химия межзвездной среды и атмосфер планет, газоанализ, атмосферная оптика, и мониторинг окружающей среды, многочисленные задачи химической физики, биофизики и многих других.

В настоящее время по причине стремительного развития экспериментальной техники, основанной на лазерных технологиях и инфракрасной спектроскопии, значительно увеличилась точность получаемой из эксперимента спектроскопической информации. Это привело к тому, что колебательно-вращательные спектры более сложных молекул стали доступны для анализа тонкой структуры, и граница в этой области исследований движется к еще большим многоатомным молекулам.

Параллельно с экспериментальными разработками развивается и теоретические методы описания квантово-механических состояний молекул на основе квантово-химической теории *ab initio* расчетов, а также квантовой динамики в целом. К сожалению точность таких расчетов для многоатомных молекул на данный момент хуже экспериментальных на несколько порядков в видимом и инфракрасном диапазоне. Причина заключается в том, что для получения удовлетворяющих точности эксперимента результатов, требуется как большое количество времени на вычислительные операции так и значительный объем памяти электронно-вычислительных машин задействованный в ходе вычислений, что в большинстве случаев достаточно трудоемкий и не всегда выполнимый в рамках разумного процесс. Например, решение соответствующего уравнения Шредингера для многоатомной молекулы дает возможность получить исчерпывающие сведения о последней. В настоящее время решение такого уравнения не представляется возможным. Из выше сказанного понятен возросший на сегодняшний день интерес к наиболее точному определению параметров потенциальной функции молекулы, которая описывает ее внутреннюю динамику. Из этого следует, что получение корректной информации о потенциальной функции молекулы является важным условием для детального понимания процессов протекающих в молекуле. По всем выше изложенным причинам на протяжении многих лет выполняются лабораторные исследования тонкой структуры колебательно-вращательных спектров различных молекул.

Стоит также отметить, что для колебательно-вращательных спектров возбужденных колебательных состояний имеются свои особенности и трудности анализа. Проблемы, затрудняющие интерпретацию таких спектров, возникают по причине сильных резонансных взаимодействий между близко расположенными колебательными состояниями. По мере роста колебательной энергии молекулы

возникают новые эффекты, затрудняющие идентификацию переходов исследуемых состояний, такие как перераспределение энергии колебаний, повышение плотности возбужденных колебательных состояний в исследуемом диапазоне.

Как показывает анализ, очень часто данных, получаемых из анализа спектров исследуемой молекулы, недостаточно для решения тех или иных прикладных задач. В таких случаях разумным является дополнительно исследовать спектры изотопозамещенных модификаций, чьи физико-химические особенности непосредственно связаны с особенностями «материнской» молекулы.

Как отмечено выше, в связи с интенсивным освоением космического пространства, детальным исследованием атмосферы планет, обеспокоенностью экологической обстановкой, а также необходимостью контроля за экологически неблагоприятными выбросами в атмосферу продуктов жизнедеятельности, увеличился интерес к изучению спектров высокого разрешения различных многоатомных молекул. В настоящем исследовании рассматривается молекула этилена. Эта молекула входит в состав не только земной атмосферы, но и была обнаружена в атмосферах планет гигантов (таких как Титан, Сатурн), а также в межзвездном пространстве. Поскольку этилен является прототипом большого числа органических соединений, информация о его спектрах высокого разрешения является чрезвычайно важной для решения задач физической химии, в частности определение корректной внутримолекулярной потенциальной функции данной молекулы.

Степень разработанности темы исследования

Несмотря на то, что изучение спектров молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ проводятся уже на протяжении многих лет, такого рода исследования ограничиваются, как правило, моделью изолированного колебательного состояния. В то же время даже колебательный спектр этих молекул представляет собой «колебательный квазиконтинуум». Как следствие, корректное исследование таких спектров невозможно без учета многочисленных резонансных взаимодействий. Это обстоятельство учтено при выполнении настоящего диссертационного исследования.

Трудности анализа экспериментальных данных в этой области исследования, и практическая значимость результатов для решения многочисленных задач физической химии, астрофизики и атмосферной оптики говорят об **актуальности** изучения спектров высокого разрешения различных изотопических разновидностей молекулы этилена.

Исходя из вышеизложенного, **целью** настоящей работы является получение численных значений вращательных параметров, параметров центробежного искажения и резонансных взаимодействий, а также параметров дипольного момента молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ в условиях сильных резонансных взаимодействий. Конкретная реализация цели заключается в решении следующих **задач**:

- исследование тонкой структуры спектров, зарегистрированных впервые, либо с характеристиками, существенно превосходящими данные, известные в литературе, и интерпретация полученных экспериментальных спектров;

- определение «экспериментальных» колебательно – вращательных энергий для 22 возбужденных колебательных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$, и на этой основе решение обратной спектроскопической задачи с целью определения вращательных и центробежных параметров, а также параметров резонансных взаимодействий;

- определение параметров эффективного дипольного момента полос ν_9 и ν_{11} молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ на основе экспериментальных данных об интенсивностях спектральных линий поглощения этих полос;

- экспериментальное определение полуширин линий поглощения колебательных полос ν_9 и ν_{11} молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ из экспериментальных спектров, записанных при различных давлениях и на этой основе расчёт коэффициентов уширения.

Основные методы исследования

Для решения выше изложенных задач применялись следующие методы: методы операторной теории возмущений, теории изотопозамещения, вычислительные методы, включенные в языки программирования MAPLE, FORTRAN. Для экспериментальной регистрации спектров использовались методы Фурье спектроскопии. Использовались также оригинальные методы и программы, разработанные в научной группе молекулярной спектроскопии на базе исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Для описания колебательно-вращательной структуры состояний ($\nu_7 = \nu_{10} = 1$) и ($\nu_{10} = \nu_{12} = 1$) молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ необходимо и достаточно знание величин параметров «горячих» полос $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$.

2. Параметры основных колебательных состояний молекул типа асимметричного волчка, $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$, могут быть количественно оценены посредством определения комбинационных разностей основных колебательных состояний на основе интерпретации всех фундаментальных полос.

3. Найденные из решения обратной спектроскопической задачи с учетом интерпретации запрещенных по симметрии полос параметры 22-х возбужденных колебательных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_2\text{CH}_4$ позволяют восстановить колебательно-вращательную структуру этих состояний с точностью сопоставимой с точностью эксперимента.

Достоверность положений выносимых на защиту и других результатов, полученных в работе, подтверждается:

- хорошим соответствием среднеквадратичных отклонений рассчитанных положений линий от экспериментальных, что согласуется с погрешностью эксперимента ($d_{\text{rms}} = 3 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$);

- сравнением полученных значений спектроскопических параметров возбужденных колебательных состояний со значениями параметров основного

колебательного состояния, разница между которыми составляет (5-10)%, что соответствует положениям и выводам теории колебательно вращательной спектроскопии молекул;

- хорошим согласием полученных значений параметров, значений колебательно-вращательных энергий с аналогичными результатами других авторов в том случае, когда возможно сравнение.

Научная новизна представленных результатов:

- получены параметры основных колебательных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$, позволяющие воспроизводить их экспериментальные комбинационные разности с точностью, превышающей в несколько раз данные известные в литературе;

- впервые определены значения параметров колебательных состояний g – типа ($\nu_{10} = \nu_7 = 1$) и ($\nu_{10} = \nu_{12} = 1$) посредством анализа «горячих» полос $\nu_{10} + \nu_7 - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$ молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$;

- впервые получены значения параметров 22-х колебательных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$ на основе анализа Фурье-спектров высокого разрешения до максимальных значений квантового числа $J^{\text{макс.}} = 52$;

- впервые экспериментально определены абсолютные интенсивности спектральных линий поглощения и коэффициентов уширения в полосах ν_9 и ν_{11} молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$;

- впервые исследовано 5 запрещенных по симметрии полос молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$, за счет учета сильных резонансных взаимодействий с разрешенными колебательно - вращательными полосами.

Научная ценность

Информация о параметрах гамильтониана молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$ (вращательных, центробежного искажения, резонансных взаимодействий и эффективного дипольного момента), полученная в ходе исследования тонкой структуры спектров этих молекул, может быть использована для корректного количественного предсказания характеристик спектральных линий в иных отличных от изученного диапазона шкалы длин волн.

Результаты диссертации могут быть использованы также для изучения колебательно-вращательных структур не только молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$, но и других изотопических модификаций этилена.

Практическая значимость

Определенные в данной работе параметры основных колебательных состояний позволяют с высокой точностью описывать равновесные вращательные структуры молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$, основываясь только на экспериментальных данных, без той или иной информации о потенциальной функции молекул.

Высокоточная спектроскопическая информация о положениях, интенсивностях и полуширинах спектральных линий молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ является необходимым дополнением к базам спектроскопических данных HITRAN, GEISA.

Внедрение результатов

Результаты диссертационной работы использованы при выполнении ряда грантов и проектов, в частности проекта ВИУ ФТИ-120 (2014–2015 гг.) и ВИУ ФТИ-24/1026 (2016 г.) Томского политехнического университета, гранта компании Фольксваген №90239 (2017–2019 гг), гранта Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ мой первый грант №16-32-00306 на 2016–2017 гг.), гранта Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ №18-02-00819, 2018–2020 гг.), гранта Президента Российской Федерации (№МК-4872.2014.2, 2014 г.).

Полученные результаты использованы в учебном процессе по тематике «спектроскопия высокого разрешения» в Томском политехническом университете.

Апробация работы. Результаты настоящей диссертационной работы обсуждались на следующих российских и международных конференциях:

- 22-й Международный коллоквиум по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Дижон, Франция, 2011).
- 8-й Всероссийской школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, Инноватика (Томск, Россия, 2012).
- 18-й Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Красноярск, Россия, 2012).
- 22-й Международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Прага, Чехия, 2012).
- 23-м Международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Будапешт, Венгрия, 2013).
- 5-й Всероссийской молодежной конференции по фундаментальным и инновационным вопросам современной физики ФИАН (Москва, Россия, 2013).
- 24-й Международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Болонья, Италия, 2014).
- 1-й Международной школе-конференции по оптоэлектронике, фотонике, технике и наноструктурам (Санкт-Петербург, Россия, 2014).
- 18-й Международной симпозиум-школе молодых учёных по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Томск, Россия, 2015).
- 24-м Международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Дижон, Франция, 2015).
- 2-й Международной школе-конференции по оптоэлектронике, фотонике, технике и наноструктурам (Санкт-Петербург, Россия, 2015).
- конференции-семинаре немецкой службы академиков обменов ДААД (Бонн, Германия, 2016).

- 24-й Международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Прага, Чехия, 2016).
- 3-й Международной школе-конференции по оптоэлектронике, фотонике, технике и наноструктурам (Санкт-Петербург, Россия, 2016).
- 25-м Международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Хельсинки, Финляндия, 2017).

Работа выполнялась при финансовой поддержке:

стипендии Президента Российской Федерации для аспирантов (приказ № 1138 от 5.09.2016), гранта некоммерческого фонда теоретических исследований – Династия, 2014 г, совместного международного гранта Министерства образования и науки Российской Федерации и германской службы академических обменов (№ 10.701.2016.ДААД), стипендии Правительства Российской Федерации для аспирантов, обучающихся по приоритетным направлениям (приказ № 2727/с от 14.04.17 на 2017–2018 гг.). В частности исследования проводились в рамках проекта ВИУ ФТИ-120 (2014–2015 гг.) и ВИУ ФТИ-24/1026 (2016 г.) Томского политехнического университета, гранта компании Фольксваген №90239 (Volkswagen Stiftung, 2017–2019 гг.), гранта Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ мой первый грант №16-32-00306 на 2016–2017 гг.), гранта Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ № 18-02-00819, 2018–2020 гг.), гранта Президента Российской Федерации (№ МК-4872.2014.2, 2014 г.).

Публикации по теме диссертации

Основные результаты и выводы диссертации опубликованы в 33 печатных работах, в том числе 12 в статьях из рекомендуемого перечня ВАК, 21 – в других научных изданиях и сборниках материалов конференций.

Вклад автора

Совместно с научным руководителем профессором О. Н. Уленевым была произведена постановка задачи. Интерпретации спектра и получение параметров эффективного гамильтониана проводилась совместно с Чжан Фанцэ под руководством профессоров Томского политехнического университета О. В. Громовой, О. Н. Уленева. Часть экспериментальной регистрации спектров была произведена автором под руководством профессора С. Бауэкера в Техническом университете Брауншвейга. Исследование интенсивностей спектральных линий поглощения и получение параметров дипольного момента проводилось под руководством профессора Е. С. Бехтеревой.

Объем и структура диссертации. Настоящая диссертационная работа состоит из введения, 4 глав, 3 приложений и заключения общим объемом 126 стр., в том числе содержит 33 рисунка, 27 таблиц и список использованной литературы из 94 наименований.

Основное содержание работы.

Обоснование актуальности темы, описание предмета исследования, формулировка цели и задач научной работы, научная и практическая значимость исследования, а также защищаемые положения сформированы во **введении**.

Первая глава носит обзорный характер и содержит описание необходимых для понимания оригинальной части работы принципов и методов колебательно – вращательной спектроскопии многоатомных молекул. В частности, в этой главе рассматривается задача построения корректного гамильтониана молекулы и методы решения соответствующего стационарного уравнения Шредингера. Описан метод построения на основе операторной теории возмущений эффективного вращательного гамильтониана молекулы, как в случае изолированного колебательного состояния, так и при наличии резонансных взаимодействий между колебательными состояниями. Последнее является особенно важным, поскольку решение реальных задач колебательно – вращательной спектроскопии практически всегда связано с исследованием резонирующих состояний молекул. Приводятся некоторые сведения из основ Фурье-спектроскопии. Кратко изложена полуклассическая теория взаимодействия излучения с веществом. Описан переход к оператору эффективного дипольного момента.

Вторая глава диссертации посвящена рассмотрению особенностей тонкой вращательной структуры колебательных спектров молекулы типа ассиметричного волчка, на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$.

В *параграфе 2.1* описаны характерные свойства молекулы типа ассиметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$.

Как известно, от того, насколько точно определено основное колебательное состояние молекулы зависит и точность описания возбужденных колебательных состояний, причем не только с количественной, но и с качественной точки зрения. В силу тех или иных причин, известная из литературы информация об основных колебательных состояниях многоатомных молекул оказывается неудовлетворительной. По этой причине во второй главе диссертации (*параграф 2.2*) представлена процедура определения корректных вращательных энергий основного колебательного состояния молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$.

Для того, чтобы улучшить параметры основного колебательного состояния были определены 1147 комбинационных разностей. Полученные на основе анализа экспериментальных спектров 1147 комбинационных разностей использовались нами в качестве входных данных при решении обратной спектроскопической задачи. В результате варьирования были определены параметры основного колебательного состояния молекулы C_2H_4 . Набор параметров, определенный в настоящем

исследовании воспроизводит исходные комбинационные разности основного колебательного состояния, полученные из инфракрасных переходов, со среднеквадратичным отклонением (d_{rms}) $1,01 \times 10^{-4}$ см⁻¹, что соответствует экспериментальной точности.

В параграфе 2.3 обсуждаются результаты исследования спектров высокого разрешения ¹²C₂H₄ в диапазоне 640 – 1535 см⁻¹. В этом диапазоне расположены полосы ν_4 , ν_7 , ν_{10} и ν_{12} . Исследуемые полосы рассматривались ранее в работах [1, 2], но с характеристиками эксперимента и параметрами основного колебательного состояния значительно уступающими как экспериментальным данным, так и результатам исследования структуры основного колебательного состояния данного исследования. Исходя из этого, можно сделать вывод, что данные о полосах ν_4 , ν_7 , ν_{10} и ν_{12} могут быть существенно улучшены.

Регистрация спектра проводилась на Фурье-спектрометре высокого разрешения Bruker 120 HR в инфракрасной лаборатории в Финляндии. Спектры

Таблица 1 – Статистическая информация

Полоса	Центр/см ⁻¹	J_{\max}	K_a^{\max}	$N_l^{1)}$	d_{rms}^l	$N_t^{2)}$	d_{rms}^t
1	2	3	4	5	6	10	11
ν_4	1025.58978	36	11	302	2.9	1118	3.0
ν_7	948.77090	50	21	1307	1.4	5062	1.5
ν_{10}	825.92676	40	17	916	2.7	4676	2.8
ν_{12}	1442.44240	48	17	1086	3.2	2902	3.3

1) N_l – число верхних уровней энергии.

2) N_t – число переходов.

зарегистрированы при комнатной температуре и различных давлениях (0,001, 0,1, 0,25 и 0,78 Торр), с длиной пути поглощения 48 метров. В процессе анализа экспериментальных спектров было выяснено, что сильное резонансное взаимодействие Кориолиса a – типа между состояниями ($\nu_{10} = 1$) и ($\nu_7 = 1$) служит причиной перераспределения и заимствования интенсивностей линий от полосы ν_7 к полосе ν_{10} , что в свою очередь, приводит к появлению линий слабой полосы ν_{10} в экспериментальном спектре. Полоса ν_{10} оказывается приблизительно в 16 500 раз слабее, чем ν_7 . Запрещенная вследствие симметрии полоса ν_4 проявляется в спектре по причине сильного резонансного взаимодействия с полосой ν_7 . Параметры основного колебательного состояния определенные в настоящей работе для молекулы ¹²CН₄ были использованы в качестве первого шага к новому анализу полос ν_4 , ν_7 , ν_{10} и ν_{12} . С помощью метода комбинационных разностей было определено 13740 переходов и 3644 верхних колебательно – вращательных энергий.

Полученные данные были использованы в процедуре взвешенного варьирования для расчета вращательных параметров, параметров центробежного искажения, параметров резонансных взаимодействий между всеми исследуемыми состояниями. В таблице 1 представлена статистическая информация по всем исследуемым состояниям с указанием среднеквадратичного отклонения. При сравнении полученных результатов с данными аналогичных исследований (см. например [1, 2]), можно сказать, что в рамках данной работы было определено и использовано количество уровней (для определения параметров эффективного гамильтониана) в среднем в 2,5 раза больше.

В параграфе 2.4 рассмотрен анализ переходов «горячих» полос $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$.

Единственным способом извлечения информации о возбужденных колебательных состояниях g – типа молекулы этилена из колебательно – вращательных спектров поглощения, является изучение горячих полос. В этом

Таблица 2 – Статистическая информация для горячих полос молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$

Полоса	Центр/ cm^{-1}	$J^{\text{макс}}$	$K_a^{\text{макс}}$	Число переходов	Число ур. энергии	d_{rms}
$\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$	955.0821	27	14	929	404	5.4
$\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$	1439.0381	20	9	376	185	7.9

параграфе обсуждается анализ вращательной структуры нижних «горячих» полос молекулы C_2H_4 , которые характеризуются переходами из колебательного состояния ($\nu_{10} = 1, B_{2u}$) на наименьшие по энергии колебательные состояния ($\nu_7 = \nu_{10} = 1, B_{3g}$), ($\nu_{10} = \nu_{12} = 1, B_{1g}$) и ($\nu_{10} = 2, A_g$). Полосы поглощения $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$ впервые рассматриваются именно в рамках настоящей диссертационной работы.

Для определения переходов был использован метод комбинационных разностей. Поскольку переходы, принадлежащие исследуемым «горячим» полосам очень слабые по интенсивности, как правило, их линии накрываются линиями переходов относящихся к более сильным фундаментальным полосам ν_7 и ν_{12} , что значительно затрудняет определение положений линий. Значения колебательно вращательных энергий нижнего колебательного состояния были рассчитаны с параметрами основного колебательного состояния, представленными в параграфе 2.1 настоящего исследования. В результате около 930 и 370 переходов с максимальными значениями квантовых чисел $J^{\text{макс}}/K_a^{\text{макс}}$ равными 27/14 и 20/9 для полос $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$ соответственно были идентифицированы в экспериментальном спектре. В таблице 2 представлена статистическая информация об исследованных полосах.

Параграф 2.5 на основе данных полученных, для горячих полос $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$, были впервые определены колебательно - вращательные энергии колебательных состояний g - типа $(\nu_7 = \nu_{10} = 1, B_{3g})$ $(\nu_{10} = \nu_{12} = 1, B_{1g})$. Было определено 404 энергии для состояния $(\nu_7 = \nu_{10} = 1)$ и 185 для $(\nu_{10} = \nu_{12} = 1)$. Для корректного анализа была использована модель колебательно - вращательного гамильтониана, включающая 12 сильно взаимодействующих состояний:

$$H^{к.-в.} = \sum_{\nu, \tilde{\nu}} |\nu\rangle \langle \tilde{\nu} | H^{\nu \tilde{\nu}} \quad (1)$$

В (1) суммирование ведется от 1 до 12 как для ν , так и для $\tilde{\nu}$, которые представляют собой:

симметрия - A_g : $|1\rangle = (\nu_{10} = 2)$, $|2\rangle = (\nu_8 = 2)$, $|3\rangle = (\nu_{10} = 2)$, $|4\rangle = (\nu_4 = 2)$, $|5\rangle = (\nu_{12} = 2)$;

симметрия - B_{2g} : $|6\rangle = (\nu_4 = \nu_{10} = 1)$, $|7\rangle = (\nu_3 = \nu_8 = 1)$, $|8\rangle = (\nu_{10} = \nu_{12} = 1)$;

симметрия - B_{3g} : $|9\rangle = (\nu_{10} = \nu_{10} = 1)$, $|10\rangle = (\nu_4 = \nu_{12} = 1)$;

симметрия - B_{1g} : $|12\rangle = (\nu_4 = \nu_{10} = 1)$, $|11\rangle = (\nu_{10} = \nu_{12} = 1)$.

Вид операторов, описывающих резонансные взаимодействия типа Ферми и Кориолиса представлен в полном тексте диссертационной работы. В результате набор из 77 параметров (18 параметров диагональных блоков и 59 параметров резонансных взаимодействий) воспроизводят 589 исходных экспериментальных значений энергии колебательных состояний $(\nu_7 = \nu_{10} = 1)$, $(\nu_{10} = \nu_{12} = 1)$ со среднеквадратичным отклонением $d_{rms} = 6,1 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

В третьей главе рассматриваются вопросы корректного описания вращательной структуры различных колебательных состояний изотопозамещенной модификации этилена $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$.

Как показывает анализ, очень часто данных, получаемых из анализа спектров исследуемой молекулы недостаточно для решения тех или иных прикладных задач. В таких случаях разумным является дополнительно исследовать спектры изотопозамещенных модификаций, чьи физико-химические особенности непосредственно связаны с особенностями «материнской» молекулы.

В параграфе 3.1 описана используемая в настоящей диссертационной работе модель эффективного гамильтониана, и операторы, описывающие резонансные типы взаимодействия, такие как Ферми и Кориолиса.

В параграфе 3.2 представлена математическая модель оценки спектроскопических параметров для изотопической модификации молекулы этилена, основанной на теории изотопозамещения.

В параграфе 3.4 описана процедура корректного определения вращательной структуры основного колебательного состояния молекулы $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$.

Первоначальный анализ спектра показал, что информация о вращательной структуре основного колебательного состояния, известная на данный момент в литературе не является корректной и может быть значительно улучшена. Для этого, в нашем исследовании было определено 3400 комбинационных разностей из анализа полос a -типа: ν_{12} , ν_2 , ν_3 . Для корректности настоящего исследования были дополнительно исследованы полосы b -типа, ν_{10} , и c -типа, ν_7 и ν_8 , что позволило получить комбинационные разности основного колебательного состояния не только вида $^{(\text{эксн.})}\delta_{J'K'_aK'_c}^{JK_aK_c}$ (где $K'_a = K_a$), но и более 1500 комбинационных разностей вида $^{(\text{эксн.})}\delta_{J'K'_aK'_c}^{JK_aK_c} (K'_a = K_a) = \pm 2$. Таким образом, около 5000 экспериментальных комбинационных разностей были использованы в процедуре варьирования, и на этой основе были определены параметры основного колебательного состояния, которые воспроизводят исходные комбинационные разности со среднеквадратичным отклонением $d_{\text{rms}} = 2,1 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Среднеквадратичные отклонения значений энергий, рассчитанных на основе параметров известных в литературе, порядка $0,48 \text{ см}^{-1} - 5,6 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, что свидетельствует о высокой точности определенных в настоящей диссертационной работе значений параметров основного состояния молекулы $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$.

В параграфе 3.5 был исследован диапазон $640 - 1700 \text{ см}^{-1}$ экспериментально зарегистрированных спектров молекулы $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$. Спектры получены на Фурье спектрометре Bruker 125 HR высокого разрешения в техническом университете Наньянг (Сингапур) с разрешением $0,0021 - 0,0063 \text{ см}^{-1}$ при различных давлениях: $0,3 - 1000 \text{ Па}$.

Новые параметры основного колебательного состояния, определенные автором, были использованы для расчета уровней энергии, которые, в свою очередь, легли в основу нового анализа спектров высокого разрешения молекулы $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ в диапазоне $1200 - 1700 \text{ см}^{-1}$ (область локализации полос ν_2 , ν_3 , ν_{12} и $2\nu_{10}$). В результате было определено 3800 переходов и 1562 верхних колебательно - вращательных уровней энергии с максимальными квантовыми числами $J^{(\text{макс})} = 52$ и $K_a^{(\text{макс})} = 18$ для полосы ν_{12} . Также, для впервые зарегистрированных слабых полос ν_2 , ν_3 и $2\nu_{10}$, определено 910, 480 и 14 переходов, соответственно.

Полученные экспериментальные данные были использованы для расчета вращательных, центробежных параметров, а также параметров, описывающих резонансные взаимодействия между состояниями ($\nu_2 = 1$), ($\nu_3 = 1$), ($\nu_{12} = 1$) и ($\nu_{10} = 2$). Значения параметров, полученных в данной работе, не только хорошо коррелируют с известными в литературе, но и существенно лучше описывают экспериментальные

данные ($d_{rms}=2,6\times 10^{-4}$ см⁻¹). Как показал анализ, корректного описания экспериментальных данных можно достичь лишь с учетом сильных резонансных взаимодействий, которые возникают между исследуемыми состояниями.

В параграфе 3.6 выполнен анализ колебательно – вращательных спектров высокого разрешения молекулы ¹³C¹²CH₄ в диапазоне 1500 – 2050 см⁻¹.

В результате анализа было проинтерпретировано около 5244 переходов для запрещенной полосы $\nu_8+\nu_{10}$ с максимальными квантовыми числами $J^{(макс)} = 30$ и $K_a^{(макс)} = 14$. Для разрешенных как комбинационных $\nu_4+\nu_8$, $\nu_7+\nu_8$, $\nu_4+\nu_8$, $\nu_4+\nu_{10}$, так и дважды возбужденных полос $2\nu_7$ и $2\nu_8$ определено около 7500 переходов с максимальными значениями квантовых чисел $J^{(макс)} = 25$ и $K_a^{(макс)} = 12$. На основе полученных экспериментальных данных была решена обратная спектроскопическая задача, и получены 124 параметра (98 параметров диагональных блоков гамильтониана (1) и 26 параметров резонансного взаимодействия). Полученные параметры воспроизводят экспериментальные значения энергий со среднеквадратичным отклонением $d_{rms}=6,4\times 10^{-4}$ см⁻¹.

В четвертой главе рассматриваются вопросы определения абсолютных интенсивностей спектральных линий поглощения, которые имеют большое теоретическое и прикладное значение. Подобного рода исследования позволяют определить такие важные параметры молекул, как ее дипольный момент, параметры уширения, поляризуемость и производные от этих величин по колебательным координатам. Такие параметры дают ценные сведения о природе химических связей в молекулах, структурных изменениях, внутримолекулярных взаимодействиях, в той или иной степени позволяют производить количественный анализ, изучать химическое равновесие, кинетику химических реакций и др.

В параграфе 4.1 описана экспериментальная часть, выполненная для исследования абсолютных интенсивностей спектральных линий поглощения молекулы ¹²C₂H₄. Регистрация спектров поглощения была проведена совместно с автором настоящей диссертации в Техническом университете Брауншвейга (Германия) на Фурье - спектрометре Bruker 120 HR в области 2900 - 3300 см⁻¹. Образец газа ¹²C₂H₄ был изготовлен в кембриджской лаборатории изотопов, штат Массачусетс, США, чистота составила 99,9 %. Дополнительно для настоящего исследования были использованы спектры, полученные зарубежными экспертами в инфракрасной лаборатории университета Оулу Финляндии на Фурье - спектрометре Bruker 120 HR. Экспериментальные условия представлены в таблице 3.

Таблица 3 – Условия экспериментальной регистрации спектров $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$

Место регистрации	№ спектра	Давление мбар	Длина пути м	Число сканирований	Разрешение см^{-1}	Источник	Детектор	Калибров. газ	Температура К
Германия	I	1	0.0825	300	0.0021	Globalar	MCT	N_2O	297
Германия	II	3.33	0.0825	500	0.0021	Globalar	MCT	N_2O	297
Германия	III	6.66	0.0825	500	0.0021	Globalar	MCT	N_2O	297
Германия	IV	10	0.0825	500	0.0021	Globalar	MCT	N_2O	297
Германия	V	33.3	0.0825	500	0.0021	Globalar	MCT	N_2O	297
Германия	VI	66.6	0.0825	500	0.0021	Globalar	MCT	N_2O	297
Германия	VII	100	0.0825	300	0.0021	Globalar	MCT	N_2O	297
Финляндия	VIII	0.2	3.2	300	0.0046	Tangsten	Insb	OCS	297
Финляндия	IX	1	35.2	2259	0.0046	Tangsten	Insb	OCS	297
Финляндия	X	1	115.2	1830	0.0046	Tangsten	Insb	OCS	297

В параграфе 4.2 описано исследование энергетической структуры спектров молекулы C_2H_4 в районе локализации полос ν_9 , ν_{11} и $\nu_2+\nu_{12}$.

Для интерпретации были использованы спектры VIII, IX и X (условия эксперимента представлены в таблице 4). Определение положений линий производилось с помощью метода комбинационных разностей. Было определено 1350 переходов и 332 уровней энергии для полосы ν_9 с максимальными квантовыми числами $J_{\text{макс}}/K_a^{\text{макс}} = 45/13$, для полосы ν_{11} найдено 812 переходов и 296 уровней энергии для $J_{\text{макс}}/K_a^{\text{макс}} = 52/13$, для более слабой полосы $\nu_2 + \nu_{12} - 208$ переходов (100 энергий) с $J_{\text{макс}}/K_a^{\text{макс}} = 23/13$. В таблице 4 представлена статистическая информация об исследованных полосах в сравнении с данными взятыми из литературы [3, 4]. Из Таблица 4 – статистическая информация для полос ν_9 , ν_{11} и $\nu_2+\nu_{12}$.

Полосы	Центр/ см^{-1}	$J_{\text{макс}}$	$K_a^{\text{макс}}$	$J_{\text{макс}}$ $K_a^{\text{макс}}$		$J_{\text{макс}}$ $K_a^{\text{макс}}$	
				Раб.[3]		Раб.[4]	
ν_{11}	2988,6441	52	13	32	-	24	6
ν_9	3104,8825	50	13	32	-	20	10
$\nu_9 + \nu_{12}$	3078,4701	23	12	-	-	11	2
Число переходов		2370		2370		1161	

сравнения видно, что в настоящей работе получено в два раза больше переходов, чем в [3, 4]. На основе полученных данных, в ходе решения обратной спектроскопической задачи, используя процедуру варьирования, были определены параметры для колебательных состояний, описывающие исходные экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $0,00023 \text{ см}^{-1}$

В параграфе 4.3 впервые определены абсолютные интенсивности и коэффициенты уширения спектральных линий поглощения в районе 2900 - 3300 см⁻¹.

Для анализа интенсивностей линий был использован спектр III (подробности см. в таблице 4). В качестве первого шага анализа были определены интенсивности линий поглощения около 200 отобранных переходов. Для расчета использовался профиль Хартманна - Тран. Использование профиля такого типа в нашем исследовании (основанное на модели бинарных столкновений) мотивировано тем, что эта модель обобщает профили более низкого порядка, учитывающие различные эффекты, влияющие на форму линии. Будучи одной из моделей, учитывающей зависимость от скорости, профиль Хартмана - Тран позволяет правильно учесть сужение вследствие столкновения для изолированных спектральных линий при давлениях менее 100 Торр. Интенсивность линий поглощения рассчитывались с помощью формулы:

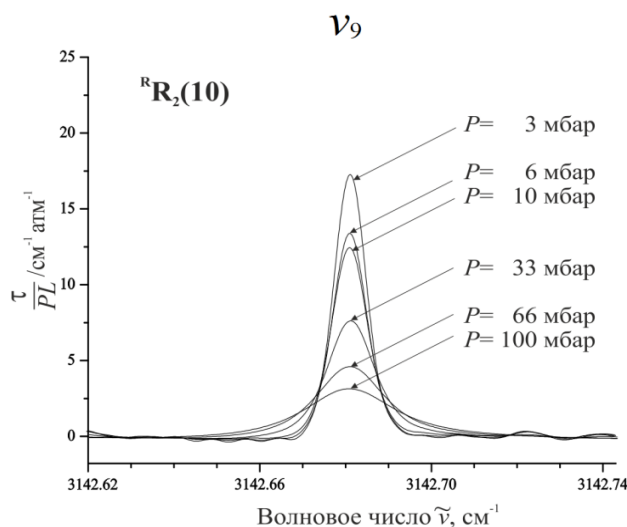
$$S_{\bar{\nu}_0} = \frac{8\pi^2\sigma}{4\pi^3h\varepsilon_0c} \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_bT}\right) \right] N \frac{g_a}{N(T)} \exp\left(-\frac{E_a}{k_bT}\right) |P_{\alpha\beta}|^2,$$

где $P_{\alpha\beta}$ – матричный элемент эффективного оператора дипольного момента ($\mu'_z = G^+ \mu_z G$):

$$\mu'_z = G^+ \sum_{\alpha} k_{z\alpha} \left(\mu_{\alpha}^0 + \sum_{\lambda} \mu_{\alpha}^{\lambda} q_{\lambda} + \sum_{\lambda, v \geq \lambda} \mu_{\alpha}^{\lambda v} q_{\lambda} q_v + \dots \right) G.$$

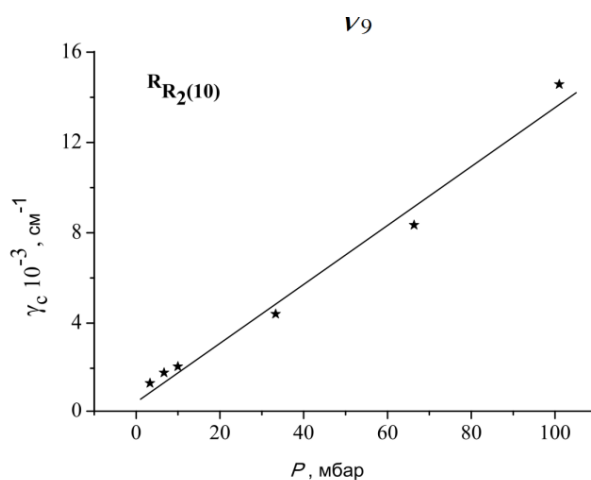
Около 200 экспериментальных интенсивностей линий использовались в процедуре взвешенного варьирования для определения эффективных параметров дипольного момента исследуемых полос. В качестве второго шага анализа полученные значения параметров эффективного дипольного момента использовались для оценки индивидуальных интенсивностей дополнительных неперекрывающихся, ненасыщенных и не слишком слабых линий, которые не были определены на первом этапе. Как результат, около 600 экспериментальных интенсивностей линий были определены. Полученные параметры воспроизводят начальные значения интенсивностей 600 линий поглощения со среднеквадратичным отклонением $d_{rms} = 5,5\%$. Для анализа полуширин линий (полная ширина, измеренная на половине максимума амплитуды линии) были записаны 5 дополнительных спектров молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ в 23 сантиметровой ячейке с длиной оптического пути 8,25 см (условия эксперимента представлены в таблице 4). Всего было проанализировано 98 изолированных, ненасыщенных и не слабых линий.

Рисунок 1 – Сравнение экспериментальных линий поглощения при различных давлениях



В ходе анализа использовался мультиспектральный подход в определении линий и профиль Хартмана - Гран, а коэффициенты уширения γ_{self} были получены путем варьирования измеренных форм линий, записанных при разных давлениях (см. II-VI в таблице 4).

Рисунок 2 – Зависимость полуширин спектральных линий от давления



Для иллюстрации качества полученных результатов на рисунке 1 показаны зависимости полуширины спектральной линии поглощения от давления для нескольких анализируемых переходов. На рисунке 2 представлены измеренные полуширины линии поглощения $R_{R_2(10)}$ для полосы ν_9 (в $\text{cm}^{-1} \text{ атм}^{-1}$ при температуре 297 К) при разных давлениях, которые могут служить подтверждением корректности используемой модели. В частности, d_{rms} среднеквадратичные отклонения между экспериментальными и рассчитанными значениями интенсивностей спектральных линий поглощения составляют не более 9,8 %.

Основные результаты и выводы работы, сформулированные в заключении:

1. Полученные параметры основных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ позволяют с точностью, превосходящей в разы точность известных в литературе значений параметров описывать вращательную структуру основного колебательного состояния этих молекул.
2. На основе модели эффективного колебательно-вращательного гамильтониана и спектров, зарегистрированных впервые либо с характеристиками, существенно превосходящими известные в литературе, были впервые получены или существенно уточнены данные об энергетической структуре всех фундаментальных полос, ряда комбинационных и обертоновых полос.
3. Впервые исследовано 5 запрещенных по симметрии полос проявляющиеся в спектрах только как следствие сильных резонансных взаимодействий с разрешенными колебательно - вращательными состояниями.
4. Выполнен анализ спектров молекулы этилена в диапазоне $2900 - 3100 \text{ см}^{-1}$ и на этой основе впервые исследованы абсолютные интенсивности спектральных линий поглощения полос ν_9 и ν_{11} .
5. Проведенное исследование полуширин спектральных линий поглощения полос ν_9 и ν_{11} , позволило определить их коэффициенты самоуширения.
6. Впервые проведено исследование переходов в «горячих» полосах $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$, что позволило получить информацию о состояниях g - типа ($\nu_7 = \nu_{10} = 1$) и ($\nu_{10} = \nu_{12} = 1$).

В результате исследования было проанализировано 22 возбужденных колебательных состояния молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$, в общей сложности, содержащих около 34000 колебательно-вращательных переходов. Полученная информация представляет интерес, как для российских, так и международных баз данных, таких как GEISA, HITRAN, IUPAC, SPECTRA.

Цитируемая литература

- [1] Rusinek, E., Fichoux, H., Khelkhal, M., Herlemont, F., Legrand, J., Fayt, A. Sub-Doppler study of the ν_7 band of C_2H_4 with a CO_2 laser sideband spectrometer // J. Mol. Spectrosc. - 1998. - V.189. - P. 64-73.
- [2] Willaert, F., Demaison, J., Margules, L., Mader, H., Spahn, H., Giesen, T., Fayt, A. The spectrum of ethylene from microwave to submillimetre-wave // J. Mol. Phys. - 2006. - V. 104. - P. 273-292.
- [3] Boudon, V., Loete, M., Rotger, M., Bourgeois, M.-T., Didrich, K., Herman, M., Kapitanov, V. A., Ponomarev, Yu. N., Solodov, A. A., Solodov, A. M., Petrova, T. M. High-resolution spectroscopy and preliminary global analysis of C-H stretching vibrations of C_2H_4 in the 3000 and 6000 cm^{-1} regions // Journal of Quantitative Spectroscopy Radiative Transfer. - 2010. - V. 111. - P. 2265-2278.

- [4] Bach, M., Georges, R., Hepp, M., Herman, M. Slit-jet Fourier transform infrared spectroscopy in $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$: cold 24 and hot bands near 3000 cm^{-1} // Chemical Physics Letters. - 1998. - V. 294. - P. 533-537.

Список публикаций по теме диссертации

Статьи в журналах, включённых 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. Ulenikov O. N. High resolution spectroscopic study of C_2H_4 : re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} vibrational bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, **Yu. S. Aslapovskaya**, V.-M. Horneman // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2013. – Vol. 118. – P. 14–25. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.11.032. – 1.35 / 0.8 а.л. (*Web of Science*).

2. Фомченко А. Л. Некоторые вопросы определения спектроскопических параметров в аксиально-симметричных молекулах XYZ_3 симметрии C_{3v} / А. Л. Фомченко, А. Г. Литвиновская, И. Б. Болотова, Н. И. Распопова, **Ю. С. Аслаповская**, В. А. Замотаева, Ю. В. Кривчинова, Ю. В. Чертавских // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2013. – Т. 56, № 7. – С. 104–109. – 0.34 / 0.04 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science:

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, Yu. V. Chertavskikh // Russian Physics Journal. – 2013. – Vol. 56, № 7. – P. 837–844.

3. Ulenikov O. N. High resolution FTIR study of the $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ and $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ «hot» bands of C_2H_4 / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, G. A. Onopenko, **Yu. S. Aslapovskaya**, K.-H. Gericke, S. Bauerecker, V.-M. Horneman // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2014. – Vol. 149. – P. 318–333. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2014.08.013. – 1.44 / 0.25 а.л. (*Web of Science*).

4. Конов И. А. Анализ Фурье-спектра высокого разрешения полосы ν_6 молекулы $\text{Cis-C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ / 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 / 0.12 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science:

Konov I. A. Analysis of the high-resolution Fourier spectrum of the ν_6 band of the $\text{cis-C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ molecule / Yu. V. Chertavskikh, A. L. Fomchenko, **Yu. S. Aslapovskaya**, S. A. Zhdanovich, C. Sydow // Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 58, № 11. – P. 1587–1591. – DOI: 10.1007/s11182-016-0687-x.

5. Ulenikov O. N. First high resolution study of the interacting $\nu_8+\nu_{10}$, $\nu_6+\nu_{10}$, $\nu_6+\nu_7$ bands and re-analysis of the $\nu_7+\nu_8$ band of trans-D₂-ethylene / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **Yu. S. Aslapovskaya**, A. G. Ziatkova, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2016. – Vol. 184. – P. 76–88. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.06.040. – 1.44 / 0.6 а.л. (*Web of Science*).

6. Зятыкова А. Г. Инфракрасный спектр высокого разрешения молекулы транс-C₂H₂D₂ полосы $\nu_7+\nu_8$ / А. Г. Зятыкова, **Ю. С. Аслаповская**, О. В. Громова, Е. С. Бехтерева, А. Л. Фомченко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. – Т. 59, № 10. – С. 77–81. – 0.75 / 0.15 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science:

Ziatkova A. G. High resolution infrared spectrum of the $\nu_7+\nu_8$ band of the trans-C₂H₂D₂ molecule / A. G. Ziatkova, **Yu. S. Aslapovskaya**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, A. L. Fomchenko // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 59, № 10. – P. 1604–1609. – DOI: 10.1007/s11182-017-0951-8.

7. Ulenikov O. N. Ethylene-1-¹³C (¹³C¹²CH₄): first analysis of the ν_2 , ν_3 and $2\nu_{10}$ bands and re-analysis of the ν_{12} band and of the ground vibrational state / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **Yu. S. Aslapovskaya**, T. L. Tan, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2017. – Vol. 187. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.10.009. – P. 403–413. – 1.21 / 0.7 а.л. (*Web of Science*).

8. Берёзкин К. Б. Спектроскопия высокого разрешения молекулы CH₂=CD₂: анализ «горячей» полосы $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ / К. Б. Берёзкин, А. Л. Фомченко, **Ю. С. Аслаповская**, О. В. Громова, Е. С. Бехтерева, К. Мауль // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 4. – С. 3–6. – 0.46 / 0.05 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science:

Berezkin K. B. High-resolution spectroscopy of the CH₂ = CD₂ molecule : analysis of the hot $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ band / K. B. Berezkin, A. L. Fomchenko, **Yu. S. Aslapovskaya**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, K. Maul // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, № 4. – P. 557–561. – DOI: 10.1007/s11182-017-1108-5.

9. **Аслаповская Ю. С.** Анализ основного колебательного состояния молекулы этилена-1-¹³C (¹³C¹²CH₄) / Ю. С. Аслаповская, О. В. Громова, К. Б. Берёзкин, И. А. Конов, К. Зидо // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 2. – С. 68–73. – 0.79 / 0.59 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science:

Aslapovskaya Yu. S. Analysis of the ground vibrational state of the ethylene -1-¹³C (¹³C¹²CH₄) molecule / Yu. S. Aslapovskaya, O. V. Gromova, K. B. Berezkin, I. A. Konov, K. Zido // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, № 2. – P. 273–278. – DOI: 10.1007/s11182-017-1071-1.

10. Замотаева В. А. Исследование спектра высокого разрешения полосы $2\nu_3$ молекулы ³²S¹⁸O₂ / В. А. Замотаева, **Ю. С. Аслаповская**, К. С. Васильев, Л. Е. Федотов, Е. С. Бехтерева, А. Г. Зятыкова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 1. – С. 3–7. – 0.67 / 0.1 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science:

Zamotaeva V. A. Study of the high-resolution spectrum of the $2\nu_3$ band of the $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ molecule / V. A. Zamotaeva, **Yu. S. Aslapovskaya**, K. S. Vasil'ev, L. A. Fedotov, E. S. Bekhtereva, A. G. Ziatkova // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, № 1. – P. 1–6.

11. Распопова Н. И. Определение параметров тетраэдрических расщеплений в состояниях A_1 - и A_2 -типа молекул сферической симметрии (T_d или O_h) / Н. И. Распопова, Е. А. Склярова, **Ю. С. Аслаповская**, С. И. Кузнецов, Г. К. Мауль // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 10. – С. 34–38. – 0.27 / 0.02 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science:

Raspopova N. I. Determining the parameters of tetrahedral splittings in the A_1 - and A_2 -type states of molecules with spherical symmetry (T_d or O_h) / N. I. Raspopova, E. A. Sklyarova, **Yu. S. Aslapovskaya**, S. I. Kuznetsov, K. Maul // Russian Physics Journal. – 2018. – Vol. 60, № 10. – P. 1684–1689. – DOI: 10.1007/s11182-018-1269-x.

12. **Аслаповская Ю. С.** Определение параметров эффективного колебательно-вращательного гамильтониана полосы $\nu_7+\nu_8$ молекулы этилен- $1\text{-}^{13}\text{C}$ / Ю. С. Аслаповская // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2018. – Т. 61, № 2. – С. 87–90. – 0.6 а.л. (*Web of Science*).

Публикации в прочих научных изданиях:

13. Konov I. A. Analytical calculations of spectroscopic parameters caused by the third and fourth orders of operator perturbation theory : application to the XY_2 C_{2v} molecules / I. A. Konov, **Yu. S. Aslapovskaya**, O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva // HRMS Dijon 2011 : Abstracts of the Twenty-second Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Dijon, France, August 29 – September 02, 2011. – Dijon, 2011. – P. 420. – 0.05 / 0.01 а.л.

14. **Аслаповская Ю. С.** Исследование спектров высокого разрешения молекулы C_2H_4 : основное колебательное состояние и сильно резонирующие полосы ν_4 , ν_7 и ν_{10} / Ю. С. Аслаповская // Инноватика 2012 : сборник материалов VIII Всероссийской научно-практической школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием. Томск, 25–28 апреля 2012 г. – Томск, 2012. – Т. 1. – С. 55–59. – 0.21 а.л.

15. Ulenikov O. N. High resolution spectroscopic study of C_2H_4 : Re-analysis of the ground and strongly interacting ν_4 , ν_7 , and ν_{10} , vibration bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **Yu. S. Aslapovskaya**, V.-M. Horneman // 22th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy : Book of Abstracts. Prague, Czech Republic, September 04–08, 2012. – Prague, 2012. – P. 145. – 0.05 / 0.01 а.л.

16. **Аслаповская Ю. С.** Спектры высокого разрешения для молекулы C_2H_4 : основное колебательное состояние и сильно резонирующие полосы ν_4 , ν_7 и ν_{10} / Ю. С. Аслаповская / ВНКСФ-18 : материалы Восемнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых. Красноярск, 29 марта – 05 апреля 2012 г. – Красноярск, 2012. – С. 446–447. – 0.16 / 0.1 а.л.

17. Ulenikov O. N. On the ro-vibrational study of «hot» transitions in C_2H_4 : the $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ and $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, G. A. Onopenko, **Yu. S. Aslapovskaya**, V.-M. Horneman // HRMS 2013 : Book of Abstracts of the Twenty-third Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Budapest, Hungary, August 25–30, 2013. – Budapest, 2013. – P. 90. – 0.08 / 0.02 а.л.

18. **Аслаповская Ю. С.** Колебательно вращательное исследование «горячих» переходов в молекуле C_2H_4 . Полосы $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ и $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ / Ю. С. Аслаповская, О. Н. Улеников, О. В. Громова // ФИАН 2013 : сборник трудов Пятой всероссийской молодежной конференции по фундаментальным и инновационным вопросам современной физики. Москва, 10–15 ноября 2013 г. – Москва, 2013. – С. 30. – 0.07 / 0.04 а.л.

19. **Аслаповская Ю. С.** Новый колебательно-вращательный анализ основного состояния молекулы этилена / Ю. С. Аслаповская // Международный научно-исследовательский журнал. – 2014. – № 11 (30), ч. 1. – С. 4–5. – 0.19 а.л.

20. Ulenikov O. N High resolution ro-vibrational analysis of C_2H_4 in the 2900–3300 cm^{-1} spectral range / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **Yu. S. Aslapovskaya**, V. A. Zamotaeva, V.-M. Horneman, C. Sydow, S. Bauerecker // 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy : Book of Abstracts. Bologna, Italy, September 02–06, 2014. – Bologna, 2014. – P. 239. – 0.07 / 0.04 а.л.

21. Ulenikov O. N. High resolution Fourier transform spectrum of trans- $C_2H_2D_2$ in the region of 1200–2000 cm^{-1} / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **Yu. S. Aslapovskaya**, A. G. Litvinovskaya, S. Bauerecker // 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy : Book of Abstracts. Bologna, Italy, September 02–06, 2014. – Bologna, 2014. – P. 242. – 0.07 / 0.01 а.л.

22. **Aslapovskaya Yu. S.** High Resolution Study of C_2H_4 : the $\nu_2+\nu_9$ and $\nu_5+\nu_{12}$ bands / Yu. S. Aslapovskaya, Yu. V. Chertovskih, K. B. Beryezkin // Saint-Petersburg OPEN 2014 : Book of Abstracts of the 1st International School and Conference Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures. Saint-Petersburg, Russia, March 25–27, 2014. – Saint-Petersburg, 2014. – P. 387–388. – 0.08 / 0.06 а.л.

23. **Аслаповская Ю. С.** Исследование спектра высокого разрешения молекулы C_2H_4 в диапазоне 2700–2950 cm^{-1} / Ю. С. Аслаповская, Н. И. Распопова // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2015. – № 6, ч. 1. – С. 56–59. – 0.24 / 0.14 а.л.

24. **Aslapovskaya Yu. S.** High Resolution Fourier Transform Spectrum of C_2H_4 in the Region of 2500–3000 cm^{-1} / Yu. S. Aslapovskaya, A. L. Litvinovskaya // Saint-Petersburg OPEN 2015 : Book of Abstracts of the 2nd International School and Conference Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures. Saint Petersburg, Russia, April 06–08, 2015. – Saint Petersburg, 2015. – P. 336–337. – 0.14 / 0.1 а.л.

25. Belova A. S. On the «expanded local mode» approach to ethylene / A. S. Belova, A. L. Fomchenko, **Yu. S. Aslapovskaya** // HighRus-2015 : Abstracts of Reports of the XVIIIth Symposium and School on High Resolution Molecular Spectroscopy. Tomsk, Russia, June 30 – July 04, 2015. – Tomsk, 2015. – P. 27. – 0.08 / 0.02 а.л.

26. Ulenikov O. N. High resolution analysis of the ethylene-1-¹³C spectrum in the region 600–1700 cm⁻¹ / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **Yu. S. Aslapovskaya**, M. G. Gabona, T. L. Tan // HRMS Dijon 2015 : Book of Abstracts of the 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Dijon, France, August 24–28, 2015. – Dijon, 2015. – P. 300. – 0.06 / 0.01 а.л.

27. Ulenikov O. N. High resolution analysis of the C₂H₂D₂-trans molecule in the region of 1400–2000 cm⁻¹ / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, A. G. Litvinovskaya, **Yu. S. Aslapovskaya**, S. Bauerecker, C. Sydow // HRMS Dijon 2015 : Book of Abstracts of the 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Dijon, France, August 24–28, 2015. – Dijon, 2015. – P. 301. – 0.05 / 0.01 а.л.

28. **Aslapovskaya Yu. S.** Ro-vibration analysis of high-resolution spectra of ethylene molecule : $\nu_7 + \nu_8$ band / Yu. S. Aslapovskaya // Saint Petersburg OPEN 2016 : Book of Abstracts 3rd International School and Conference Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures : Book of Abstracts. Saint Petersburg, Russia, March 28–30, 2016. – Saint Petersburg, 2016. – P. 349–351. – 0.16 а.л.

29. Zyatkova A. G. The High-Resolution Infrared Spectrum of the set of weak bands of trans-D₂-ethylene in the region 1450–1750 cm⁻¹/ A. G. Zyatkova, **Yu. S. Aslapovskaya** // Saint Petersburg OPEN 2016 : Book of Abstracts of the 3rd International School and Conference Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures. Saint Petersburg, Russia, March 28–30, 2016. – Saint Petersburg, 2016. – P. 599–600. – 0.09 / 0.02 а.л.

30. **Aslapovskaya Yu. S.** High Resolution Spectroscopic Study of Ethylene -1-¹³C : Re-analysis of the Ground State and Strongly Interacting the ν_2 , ν_3 , ν_4 , ν_7 , ν_8 , and ν_{12} Vibration Bands / Yu. S. Aslapovskaya, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, T. L. Tan, 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. 61. – 0.02 / 0.01 а.л.

31. Ziatkova A. G. Sulfur Dioxide Application of Operator Perturbation and Isotopic Substitution Theories to the Dipole Moment Analysis / A. G. Ziatkova, N. V. Kashirina, **Yu. S. Aslapovskaya**, 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. 172. – 0.02 / 0.01 а.л.

32. Aslapovskaya Yu. S. Ro-vibration study of the $\nu_8 + \nu_{10}$, $\nu_4 + \nu_{10}$, $\nu_7 + \nu_8$, $2\nu_8$, $2\nu_7$, $\nu_4 + \nu_8$ strongly interacting bands of ethylene-1-¹³C / **Yu. S. Aslapovskaya**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, Fangce Zhang, S. Bauerecker, O. N. Ulenikov // HRMS 2017 : Book of Abstracts of the 25th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy. Helsinki, Finland, August 20–25, 2017. – Helsinki, 2017. – P. 110. – 0.02 / 0.01 а.л.

Методические указания:

33. Чайковская О. Н. Лабораторная работа «Исследование спектрально-люминесцентных свойств смеси органических молекул» : методические указания / О. Н. Чайковская, А. Ю. Петрова, **Ю. С. Аслаповская**. – Томск, 2014. – 20 с. – 0.59 / 0.3 а.л.

Издание подготовлено в авторской редакции.
Отпечатано на участке цифровой печати
Издательского Дома Томского государственного университета
Заказ № 01-0718 от «03» июля 2018 г. Тираж 100 экз.
г. Томск Московский тр.8 тел. 53-15-28