

01 Определение энергетической структуры и спектроскопических параметров колебательного состояния ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) молекулы C_2D_4

© А.Г. Зятькова, М.А. Меркулова, Ю.В. Конова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050 Томск, Россия

e-mail: anastasia.litvinovskaya@mail.ru

Поступила в редакцию 24.12.2019 г.

В окончательной редакции 24.12.2019 г.

Принята к публикации 27.01.2020 г.

С помощью фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR впервые зарегистрирована колебательно-вращательная структура полосы $\nu_5 + \nu_{12}$ молекулы C_2D_4 с разрешением 0.0025 cm^{-1} . На начальном этапе исследования выполнена интерпретация переходов в спектре, результаты которой впоследствии были использованы в качестве экспериментальных данных для решения обратной спектроскопической задачи. Впервые определяется набор из 12 спектроскопических параметров исследуемого колебательного состояния. Среднеквадратичное отклонение составило 0.0013 cm^{-1} .

Ключевые слова: колебательно-вращательная структура, дейтерированный изотополог этилена, вращательные постоянные, гамильтониан Уотсона, переходы b -типа.

DOI: 10.21883/OS.2020.05.49312.348-19

1. Введение

Молекула этилена и ее различные изотопологи интенсивно исследуются экспериментаторами и теоретиками на протяжении последних десятилетий [1–7]. Интерес в изучении свойств молекулы, стоящей первой в гомологическом ряду алкенов, не ослабевает. Как простейший алкен этилен представляется молекулой-прототипом для исследования углеводородов. В связи с этим информация о внутренних свойствах данной молекулы и ее изотопологов позволяет более подробно рассмотреть вопрос о взаимосвязанных спектрах, динамике и потенциальных гиперповерхностях многих органических молекул [8]. Знание точного вида внутримолекулярной потенциальной функции молекулы этилена необходимо для изучения проблем динамики химических реакций [9], фрагментации молекул под воздействием излучения [10], моделирования колебательной структуры и идентификации молекул. Последнее невозможно без знания точной спектроскопической информации о вращательных структурах колебательных полос различных изотопологов этилена, в том числе его дейтерированных модификаций [8]. В дополнение к вышесказанному в работе [11] отмечено, что стабильность молекулы этилена делает ее полезной для мониторинга реакций, особенно в исследованиях кинетики, где она используется для выяснения констант скорости радикальных процессов. Кроме того, как показано в работе [12], сравнивая поглощение основной модификации этилена (C_2H_4) и его дейтерированного изотополога C_2D_4 в различных спектральных диапазонах, можно отслеживать реакцию взаимного обмена водорода и дейтерия между молекулами.

Таким образом, знание спектров поглощения „материнской“ и дейтерированных молекул полезно при исследовании распределения атомов Н и D при изотопозамещении. Резюмируя вышесказанное, можно заключить, что важность молекулярной структуры этилена для различных областей науки сделала эту молекулу „фаворитом“ для спектроскопических исследований в ИК диапазоне.

Предметом исследования настоящей работы является спектр молекулы C_2D_4 в диапазоне $3300\text{--}3500 \text{ cm}^{-1}$, в котором локализована сильная комбинационная полоса поглощения $\nu_5 + \nu_{12}$. Колебательное состояние ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) соответствует одновременному изменению валентных связей C–D и изменению деформационного угла D–C–D. В многоатомных молекулах при замене даже одного атома Н на D происходит смещение полос поглощения (на величину от 20 до 1000 cm^{-1}), что может привести к нарушению свойств характеристичности колебаний и изменению их формы, а следовательно, интенсивности соответствующих полос поглощения [13]. В дополнение к этому при изменении связей C–D ангармоничность проявляется наиболее сильно, особенно при сравнении со связями C–H [13]. Все эти обстоятельства существенно усложняют интерпретацию комбинационных полос в спектрах дейтерированных соединений по сравнению с исследованием аналогичных полос в спектрах незамещенных модификаций. По этой причине до настоящего времени данная полоса исследовалась только в спектрах основной модификации [14] и одного из ее изотопологов ($H_2^{12}C^{13}CH_2$) [15]. В спектре молекулы C_2D_4 полоса $\nu_5 + \nu_{12}$ исследуется впервые в рамках настоящей работы.

2. Теоретическая модель исследования

Определение энергетического спектра молекулы при квантово-механическом рассмотрении подразумевает под собой нахождение собственных значений E оператора энергии молекулы, который в общем случае зависит от координат электронов и ядер. Определение собственных значений гамильтониана заключается в построении его матрицы на полном ортогональном наборе функций с последующей диагонализацией. Знание собственных функций позволяет определить вероятность переходов, рассчитать средние значения физических величин, характеризующих молекулу и многое другое. На настоящий момент реализация выше озвученной задачи возможна лишь для простых молекулярных систем и является трудновыполнимой для многоатомных молекул.

В рамках данной работы используются два приближенных метода решения уравнения Шредингера: приближение Борна-Оппенгеймера и метод эффективных гамильтонианов. Как следствие, при решении обратной спектроскопической задачи в качестве оператора Гамильтона используется эффективный гамильтониан, имеющий вид оператора Уотсона для изолированного колебательного состояния [8]. В силу своей логической сложности, которая заключается в выборе нулевого приближения и числа варьируемых параметров, решение обратной спектроскопической задачи не является тривиальным.

Одним из перспективных методов решения данной задачи является теоретическое предсказание параметров используемой молекулярной модели. Для дейтерозамещенных модификаций особую важность играет теоретическое предсказание спектроскопических параметров. По причине изотопозамещения спектроскопические параметры колебательного состояния ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) молекулы C_2D_4 будут претерпевать значительные изменения относительно соответствующих параметров основной модификации. Для контроля решения обратной спектроскопической задачи были теоретически рассчитаны значения главных вращательных параметров (A , B и C) исследуемого колебательного состояния.

Воспользуемся известной в литературе зависимостью [16] вращательных постоянных A , B и C от колебательных квантовых чисел:

$$B_\beta = B_\beta^e - \sum_\lambda \alpha_{\beta\lambda} \left(\nu_\lambda + \frac{d_\lambda}{2} \right) + \dots \quad (1)$$

Здесь $B_x = B$, $B_y = C$ и $B_z = A$. Выбор осей обусловлен I' -представлением ($I_z < I_x < I_y$) A -редуцированного оператора Уотсона. B_β^e — значение вращательных постоянных для равновесной конфигурации, $\alpha_{\beta\lambda}$ — коэффициенты, учитывающие поправки ангармоничности к вращательным постоянным, ν_λ — квантовые числа $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_{12}$, d_λ — кратность вырождения λ -го колебания.

Численные значения вращательных постоянных $B_x^e = 0.976 \text{ cm}^{-1}$, $B_y^e = 0.810 \text{ cm}^{-1}$, $B_z^e = 4.776 \text{ cm}^{-1}$ для основной модификации C_2H_4 , а также $\tilde{B}_x^e = 0.716 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{B}_y^e = 0.551 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{B}_z^e = 2.401 \text{ cm}^{-1}$ для изотополога C_2D_4 были получены на основе решения системы уравнений (1.10)–(1.14) из работы [17]. Значения вращательных постоянных $A = 4.90502 \text{ cm}^{-1}$, $B = 1.006238 \text{ cm}^{-1}$, $C = 0.82347 \text{ cm}^{-1}$ полосы $\nu_5 + \nu_{12}$ для основной модификации взяты из работы [13].

Примем во внимание тот факт, что при изотопозамещении $C_2D_4 \leftarrow C_2H_4$ коэффициенты $\tilde{\alpha}_{\beta\lambda}$ для молекулы C_2D_4 в два раза меньше соответствующих коэффициентов $\alpha_{\beta\lambda}$ для молекулы C_2H_4 [14], т.е. справедливо соотношение

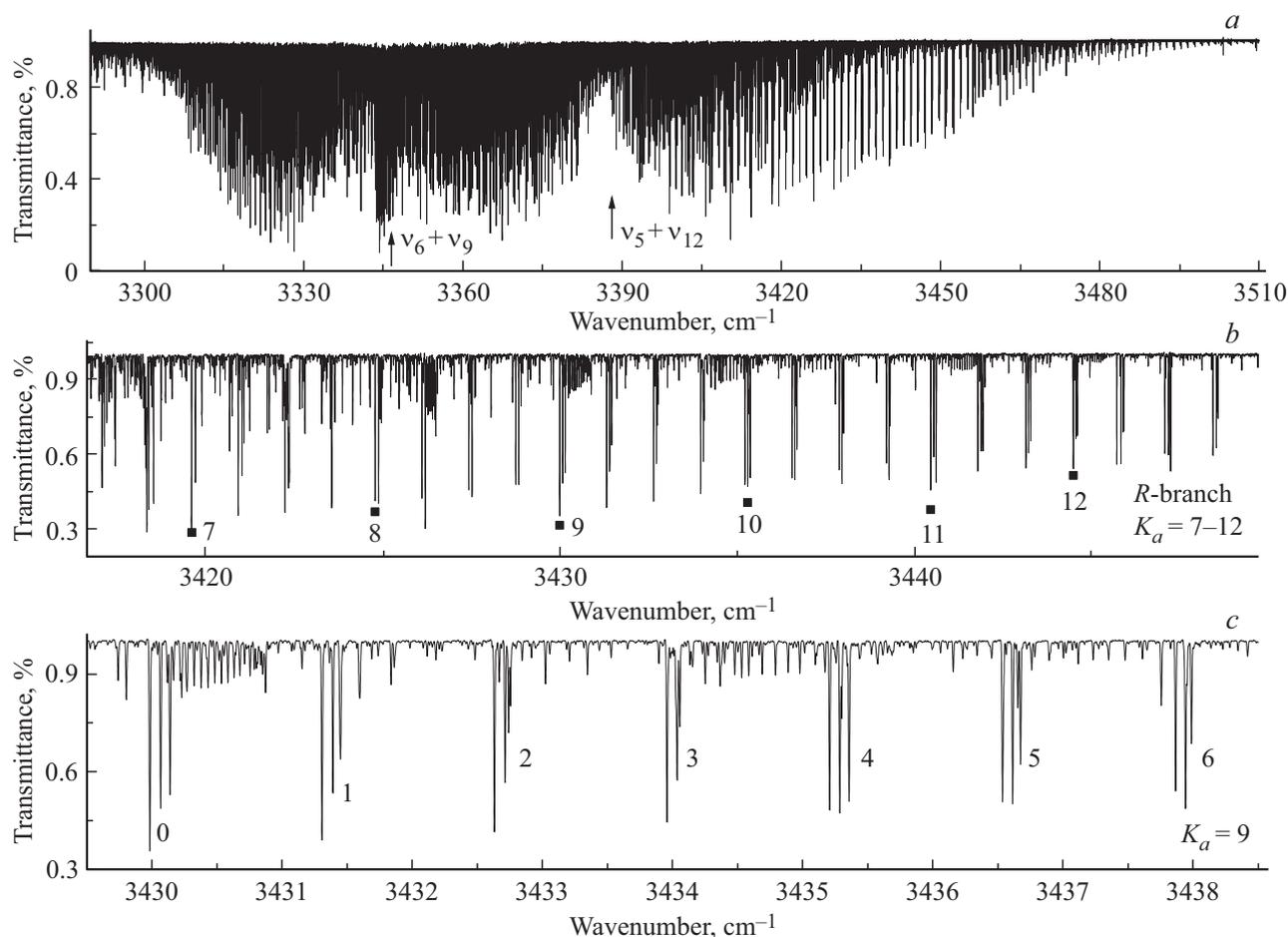
$$\tilde{\alpha}_{\beta\lambda} = \frac{1}{2} \alpha_{\beta\lambda}. \quad (2)$$

Используя уравнения (1), (2), а также численные значения равновесных вращательных постоянных для основной модификации C_2H_4 и изотополога C_2D_4 , были получены значения вращательных постоянных $\tilde{A} = 2.47 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{B} = 0.73 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{C} = 0.56 \text{ cm}^{-1}$ для колебательного состояния ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) молекулы C_2D_4 . Как можно видеть, параметры B_β для основной модификации отличаются в среднем в 0.6 раз от соответствующих параметров \tilde{B}_β для молекулы C_2D_4 , что еще раз подтверждает наличие сильного эффекта изотопозамещения при дейтерозамещении.

3. Исследование спектра молекулы C_2D_4 и решение обратной спектроскопической задачи

Спектр молекулы C_2D_4 был зарегистрирован в диапазоне длин волн от 3300 до 3500 cm^{-1} с помощью фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR с разрешением 0.0025 cm^{-1} , в основе работы которого лежит принцип интерферометра Майкельсона. Исследуемый образец находился в газообразном состоянии при комнатной температуре, давлении 1.05 mbar , оптическая длина пути составляла 24 m , количество сканирований 500 . Газ был помещен в ячейку Уайта, сделанную из нержавеющей стали, для увеличения оптической длины пути. Используемый при регистрации спектров образец газа молекулы C_2D_4 был получен в лаборатории *EQ laboratories* (Германия). Химическая и изотопическая чистота составляет 99.8 atom\% D .

Зарегистрированный спектр представлен на рисунке, центр полосы расположен около значения 3386 cm^{-1} . Исследуемая полоса является полосой b -типа, поэтому для нее характерны сильные R - и P -ветви с отсутствующими центральными Q -ветвями, которые перекрываются линиями R - и P -ветвей. Переходы b -типа удовлетворяют следующим правилам отбора: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \pm(2n + 1)$; $\Delta K_c = \pm(2m + 1)$; $n, m = 0, 1, 2, \dots$ [8]. Для интерпретации спектра был использован метод комбинационных разностей. Заметим, что данный метод



Инфракрасный спектр молекулы этилена C_2D_4 в диапазоне $3300\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$ (a); на рисунках (b) и (c) показан фрагмент R -ветви полосы $\nu_5 + \nu_{12}$.

является наиболее „простым“, так как точное комбинационное правило Ридберга-Ритца является единственным способом идентификации линий, не содержащим каких-либо математических модельных представлений [18–20]. Необходимые для этого данные о колебательно-вращательных уровнях энергии основного состояния были взяты из работы [8]. Переходы, которые были идентифицированы для исследуемой полосы, затем использовались для определения энергетической структуры колебательного состояния ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$). Энергии возбужденных колебательно-вращательных уровней рассчитывались как средние значения из нескольких переходов (P -, Q -, R -ветви) из основного колебательного состояния. В качестве иллюстрации в табл. 1 представлен небольшой фрагмент определенных колебательно-вращательных переходов b -типа для полосы $\nu_5 + \nu_{12}$, где J' , K'_a , K'_c — квантовые числа уровней основного колебательного состояния, J , K_a , K_c — квантовые числа уровней возбужденного колебательного состояния, δ — разность между экспериментальным значением положения линий и теоретически рассчитанным.

В качестве наглядного примера проведенной интерпретации, т.е. сопоставление квантовых чисел линиям в

спектре на рисунке (b) и (c) можно наблюдать структуру R -ветви исследуемой полосы. Явно прослеживается пересечение R -ветвей для серий с различными значениями квантового числа K_a . Наряду с этим необходимо отметить следующее: в процессе поиска серий $JK_aJ - K_a$ можно было наблюдать нехарактерное поведение линий в Q -ветвях. Например, для серии с $K_a = 5$ линии в спектре, соответствующие малым значениям квантового числа $J < 13$, сгущаются, и при $J = 13$ Q -ветвь полностью разворачивается. Данная ситуация возникает при близком расположении энергетических уровней, относящихся к разным колебательным состоянием, т.е. при наличии резонанса.

Данный факт подчеркивает необходимость обстоятельного рассмотрения корректности исследования колебательного состояния ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) как изолированного. Как видно из рисунка, в данном диапазоне локализована сильная комбинационная полоса поглощения $\nu_6 + \nu_9$ (центр полосы $\nu_0 \sim 3342\text{ cm}^{-1}$). Из общих принципов колебательно-вращательной теории известно [17], что близкое расположение полос может привести к сложной картине спектра. Исходя из этого, можно говорить о существовании взаимодействий между колеба-

Таблица 1. Фрагмент переходов, соответствующих полосе $\nu_5 + \nu_{12}$ молекулы C_2D_4

J	K_a	K_c	J'	K'_a	K'_c	Переход, cm^{-1}	Пропускание, в %	Энергия, cm^{-1}	Среднее значение, cm^{-1}	$\delta \cdot 10^{-4}$, cm^{-1}
1			2			3	4	5	6	7
13	7	6	12	6	7	3427.5131	43.3	3593.7163	3593.7164	4
			14	8	7	3342.3511	51.4	3593.7165		
14	7	7	13	6	8	3428.8283	48.3	3612.0575	3612.0586	9
			14	6	8	3410.4701	54.8	3612.0589		
			15	8	8	3341.0911	54.1	3612.0579		
15	7	8	14	6	9	3430.1396	52.9	3631.7258	3631.7280	9
			16	8	9	3339.8375	55.4	3631.7273		
16	7	9	16	6	10	3410.4049	68.0	3652.7289	3652.7237	3
			16	8	8	3360.8389	59.5	3652.7287		
			17	8	10	3338.5913	57.9	3652.7284		
12	8	4	11	7	5	3430.0677	48.7	3603.7548	3603.7547	-2
			12	9	3	3357.2948	80.3	3603.7547		
			13	9	5	3340.3448	56.3	3603.7544		
13	8	5	12	7	6	3431.3909	53.5	3620.7491	3620.7490	1
			14	9	6	3339.0774	61.3	3620.7489		
14	8	6	13	7	7	3432.7139	56.6	3639.0619	3639.0619	5
			14	9	5	3357.3902	73.4	3639.0618		
			15	9	7	3337.8139	62.1	3639.0619		
10	9	1	9	8	2	3431.3075	39.0	3604.4008	3604.4008	-7
			11	10	2	3339.6535	48.3	3604.4007		
11	9	2	10	8	3	3432.6323	41.5	3618.7562	3618.7558	-11
			11	10	1	3354.0082	82.6	3618.7555		
			12	10	3	3338.3795	50.1	3618.7559		
12	9	3	11	8	4	3433.9584	44.6	3634.4227	3634.4227	-7
			12	10	2	3354.0464	80.5	3634.4227		
			13	10	4	3337.1089	50.9	3634.4226		
11	10	1	10	9	2	3436.5359	50.8	3653.0268	3653.0268	-2
			11	9	2	3422.2062	79.6	3653.0271		
			12	11	2	3335.1695	59.8	3653.0264		
12	10	2	10	9	3	3437.8657	54.1	3668.6866	3668.6865	-9
			13	11	3	3333.9019	61.6	3668.6864		

тельными состояниями ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) и ($\nu_6 = \nu_9 = 1$), что приводит к необходимости использовать эффективный гамильтониан, учитывающий резонансные взаимодействия. Однако без правильных теоретических предсказаний параметров недиагональных блоков (что является нетривиальной задачей) резонансная модель эффективного гамильтониана оказывается не лучше (так как решение обратной задачи становится неустойчивым и некорректным), чем модель для изолированного состояния. Наряду с этим, как показал теоретический расчет вращательных параметров полосы с использованием метода теории изотопозамещения (как было указано выше), параметры, найденные путем решения

обратной спектроскопической задачи (при значениях квантовых чисел $K_a \leq 12$, $J \leq 22$) с помощью гамильтониана, не учитывающего резонансные взаимодействия, и параметры, рассчитанные по теории изотопозамещения, отличаются незначительно (табл. 2, колонка 2). На основании вышесказанного, для получения адекватного набора параметров достаточно рассматривать состояние ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) как локальное.

На начальном этапе решения обратной спектроскопической задачи в качестве опорных значений искомым центробежных параметров эффективного гамильтониана были взяты параметры основного колебательного состояния молекулы C_2D_4 из работы [8] (табл. 2, колонка 3).

Таблица 2. Спектроскопические параметры колебательного состояния ($\nu_5=\nu_{12}=1$) молекулы C_2D_4

Параметр	($\nu_5=\nu_{12}=1$) C_2D_4 , cm^{-1}	Основное состояние ^{a)}
1	2	3
E	3386.14881(69)	-
A	2.46485(25)	2.44158560
B	0.737601(80)	0.73492916
C	0.562587(93)	0.5635243
$\Delta_K \cdot 10^4$	0.4648(28)	0.208659
$\Delta_{JK} \cdot 10^4$	0.0049(13)	0.026825
$\Delta_J \cdot 10^4$	0.01156(86)	0.0080394
$H_K \cdot 10^8$	0.08354	0.08354
$H_{KJ} \cdot 10^8$	-0.01244	-0.01244
$H_{JK} \cdot 10^8$	0.004030	0.004030
$H_J \cdot 10^8$	0.105(23)	0.00008339
$L_K \cdot 10^{12}$	-0.02792	-0.02792
$L_{JK} \cdot 10^{12}$	-0.0005615	-0.0005615
$L_{JK} \cdot 10^{12}$	-0.87(11)	-
$L_J \cdot 10^{12}$	-0.00000430	-0.00000430
$P_K \cdot 10^{11}$	-0.2370(62)	-
$P_{KKJ} \cdot 10^{11}$	0.2407(37)	-
$\delta_K \cdot 10^4$	0.038845	0.038845
$\delta_J \cdot 10^4$	0.0064(16)	0.00214769
$h_K \cdot 10^8$	0.06732	0.06732
$h_{JK} \cdot 10^8$	0.002895	0.002895
$h_J \cdot 10^8$	0.00004948	0.00004948
d_{rms}	0.0013	
$N_E^{b)}$	176	
$N^c)$	12	

a) — параметры для основного колебательного состояния молекулы C_2D_4 , cm^{-1} , взятые из работы [8].

b) — количество энергий, используемых при решении обратной спектроскопической задачи.

c) — количество варьируемых спектроскопических параметров.

Вращательные параметры (A , B , C) были фиксированы рассчитанными значениями (см. подробнее разд. 2). Далее путем поэтапной подстановки экспериментальных энергий с весом 1 определялось оптимальное количество варьируемых параметров. В результате описанной процедуры был определен набор из 12 спектроскопических параметров (табл. 1, колонка 2), который обусловлен 177 энергетическими уровнями. Дальнейшее увеличе-

ние количества варьируемых параметров не привело к улучшению среднеквадратичного отклонения экспериментальных значений энергий от соответствующих теоретически рассчитанных значений. Итоговое среднеквадратичное отклонение $d_{rms} = 0.0013 \text{ cm}^{-1}$, что может быть рассмотрено как более чем удовлетворительный результат с учетом рассмотрения колебательного состояния ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) как изолированного.

4. Заключение

В ходе проделанной работы был исследован спектр молекулы изотополога этилена C_2D_4 в диапазоне 3300–3500 cm^{-1} . С помощью метода комбинационных разностей проинтерпретировано 529 колебательно-вращательных энергий, соответствующих 2080 переходам до $J^{max} = 22$ и $K_a^{max} = 12$. Знание разброса в значениях верхних уровней (P -, Q -, R -ветви) (см., например, табл. 1, колонка 5) позволило установить экспериментальную погрешность, которая составила 0.0006 cm^{-1} .

В результате решения обратной задачи с использованием гамильтониана Уотсона впервые получены спектроскопические параметры колебательного состояния ($\nu_5 = \nu_{12} = 1$) исследуемой молекулы, что позволяет воспроизводить вращательные уровни энергии с погрешностью $0.13 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$. Исходя из результатов, полученных в данном исследовании, можно сделать вывод, что для воспроизведения энергий (для $K_a \leq 12$, $J \leq 22$) с точностью, близкой к экспериментальной, достаточно использовать модель эффективного гамильтониана без учета резонансного взаимодействия.

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-02-00819 А, проект № 18-32-00116 мол_а).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Duncan J.L. // Mol. Phys. 1994. V. 83. N 1. P. 159–169. doi 10.1080/00268979400101151
- [2] Tan T.L., Gabona M.G., Dominique R.T.A., Godfrey P.D., McNaughton D. // J. Molec. Spectrosc. 2014. V. 303. P. 42–45. doi 10.1016/j.jms.2014.07.004
- [3] Goh K.L., Tan T.L., Ong P.P., Teo H.H. // Mol. Phys. 2000. V. 98. № 9. P. 583–587. doi 10.1080/00268970009483325
- [4] Gonzalez M.A.L., Gonzalez L.M.A., Boudon C.V., Loete M., Rotger M., Bourgeois M.-T., Didriche K., Herman M., Kapitanyov V.A., Ponomarev Yu.N., Solodov A.A., Solodov A.M., Petrova T.M. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2010. V. 111. N 15. P. 2265–2278. doi 10.1016/j.jqsrt.2010.04.010

- [5] *Tan T.L., Gabona M., Andy G., Wong Dominique Appadoo R.T., Don McNaughton* // J. Mol. Spectrosc. 2016. V. 329. P. 8–12. doi 10.1016/j.jms.2016.08.018
- [6] *Viglaska D., Rey M., Delahaye T., Nikitinc A.V.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2019. V. 230. P. 142–154.
- [7] *Adawiah R., Tan T.L.* // J. Mol. Spectrosc. 2019. V. 363. P. 1–6. doi 10.1016/j.jms.2019.111180
- [8] *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Fomchenko A.L., Zhang F., Sydow C., Maul C., Bauerecker S.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 182. P. 55–70. doi 10.1016/j.jqsrt.2016.04.026
- [9] *Аминова П.М.* Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ / Учебно-методическое пособие. Казань: Изд-во Казанского ун-та, 2009. 109 с.
- [10] *Tulub A.V., Simon K.V.* // Opt. Spectrosc. 2007. V. 102. N 2. P. 186–193. doi 10.1134/S0030400X07020051
- [11] *Wang X., Turner W.E., Agarwal J., Schaefer H.F.* // J. Phys. Chem. A. 2014. V. 118. N 35. P. 7560–7567. doi 10.1021/jp502282v
- [12] *Conn G.K.T., Twigg G.H.* // Proc. Roy. Soc. London. A. Math. Phys. Sci. 1939. V. 171. N 944. P. 70–78. doi 10.1098/rspa.1939.0054
- [13] *Волькенштейн М.В., Грибов Л.А., Ельяшевич М.А., Степанов Б.И.* Колебания молекул. 2-е изд. М.:Наука, 1972. 699 с.
- [14] *Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A.* // J. Mol. Phys. 2010. V. 108. N 5. P. 637–647. doi 10.1080/00268971003645362
- [15] *De Vleeschouwer M., Lambeau Ch., Van Lerberghe D., Janssens E., Fayt A.* // J. Mol. Spectrosc. 1981. V. 90. N 1. P. 273–286. doi 10.1016/0022-2852(81)90345-3
- [16] *Nielsen H.H.* // Rev. Mod. Phys. 1951. V. 23. P. 90–136. doi 10.1103/RevModPhys.23.90
- [17] *Howard B.J., Moss R.E.* // Mol. Phys. 1970. V. 19. P. 433–450. doi 10.1080/00268977000101471
- [18] *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Fomchenko A.L., Sydow C., Bauerecker S.* // J. Mol. Spectrosc. 2016. V. 319. P. 50–54. doi 10.1016/j.jms.2015.11.002
- [19] *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 169. P. 49–57. doi 10.1016/j.jqsrt.2015.09.015
- [20] *Watson J.K.G.* // J. Chem. Phys. 1967. V. 46. P. 1935–1949. doi 10.1063/1.1840957