

Анализ колебательно-вращательной структуры фундаментальной полосы ν_6 молекулы $^{13}\text{CHF}_3$

© Е.С. Бехтерева¹, А.Л. Фомченко^{1¶}, Т. Ерсин¹, С. Bauerecker²

¹ Исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

² Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Technische Universität Braunschweig, D-38106, Braunschweig, Germany

¶ e-mail: fomchenko@tpu.ru

Поступила в редакцию 01.11.2021 г.

В окончательной редакции 20.12.2021 г.

Принята к публикации 30.12.2021 г.

Исследован ИК спектр высокого разрешения фундаментальной полосы ν_6 молекулы $^{13}\text{CHF}_3$, расположенной в районе $450\text{--}750\text{ cm}^{-1}$. Анализ спектра выполнялся на основе метода комбинационных разностей основного состояния. В результате анализа было проинтерпретировано около 5500 переходов, на основе которых определено 2607 экспериментальных значений энергий колебательно-вращательных уровней в состоянии $\nu_6 = 1$. Полученные результаты превосходят известную в литературе информацию как по объему полученной экспериментальной информации, так и по числу извлеченных из экспериментальных данных высоковозбужденных колебательно-вращательных уровней энергии. На основе извлеченных из спектра данных были определены спектроскопические параметры исследуемого состояния, которые воспроизводят исходные данные с погрешностью $4.4 \cdot 10^{-5}\text{ cm}^{-1}$.

Ключевые слова: трифторметан, колебательно-вращательный спектр, спектроскопические параметры.

DOI: 10.21883/OS.2022.04.52277.2731-21

Введение

На современном этапе развития науки о микромире практически вся высокоточная как количественная, так и качественная информация о молекулах как физических объектах извлекается спектроскопическими методами из анализа спектров поглощения молекул. Анализ колебательно-вращательных спектров высокого разрешения позволяет определить энергетические уровни молекулы и найти спектроскопические постоянные, из которых впоследствии могут быть определены структурные характеристики и потенциальная функция молекулы. Имея информацию о спектроскопических свойствах молекул, можно решать многочисленные задачи в области физиологии, биохимии, экологии, планетологии, астрофизики и других областей науки.

Трифторметан — это химическое органическое инертное соединение, которое используется в различных областях, например, в полупроводниковой промышленности при плазменном травлении оксида кремния и нитрида кремния, в качестве средства пожаротушения, производится в качестве побочного продукта при производстве тефлона и т.д. Также следует отметить, что CHF_3 является мощным парниковым газом. Согласно данным секретариата Всемирной метеорологической организации в последние годы развивающиеся страны стали крупнейшими производителями трифторметана и его выбросы учтены в Киотском протоколе. На основе

вышесказанного можно сделать вывод, что исследование спектров молекулы CHF_3 представляет большой интерес для многочисленных как чисто академических, так и прикладных задач атмосферной оптики, физики и химии молекул.

В колебательно-вращательной спектроскопии различные изотопологи молекулы трифторметана изучались неоднократно. Изотополог $^{12}\text{CHF}_3$ является наиболее распространенным в природе, поэтому он исследовался гораздо чаще и более подробно, чем другие изотопологи [1–16]. В настоящей работе предметом исследования является другой изотополог данной молекулы — $^{13}\text{CHF}_3$, спектры которого были изучены лишь в нескольких работах [17–21]. Однако информация о нем, хоть и менее распространенном в естественных условиях изотопологе трифторметана, имеет важное значение для корректного решения задач молекулярной спектроскопии. Настоящая работа посвящена исследованию тонкой колебательно-вращательной структуры полосы ν_6 молекулы $^{13}\text{CHF}_3$.

Детали эксперимента

Исследуемый спектр молекулы $^{13}\text{CHF}_3$ был измерен на фурье-спектрометре Bruker IFS 125HR (Технический университет Брауншвейга, Германия) в диапазоне $350\text{--}900\text{ cm}^{-1}$ с разрешением 0.00096 cm^{-1} . Спектр из-

Таблица 1. Экспериментальные условия для ИК спектра молекулы $^{13}\text{CHF}_3$

| Разрешение, cm^{-1} | Оптическая длина пути, m | Давление, Pa | Температура, K | Число сканов |
|------------------------------|--------------------------|--------------|----------------|--------------------------------------|
| 0.00096 | 4.05 | 50 | 297 | 240 |
| Приемник | Апертура, mm | Источник | Светоделитель | Калибровочный газ |
| GeCu | 1.5 | Globar | KBr | H_2O , CO_2 |

мерялся в ячейке Уайта из нержавеющей стали с длиной основания 1 m и максимальной длиной пути 50 m. Экспериментальные условия для наблюдения данного спектра приведены в табл. 1. Спектральное разрешение ограничивалось лишь доплеровским уширением. Погрешность определения волнового числа в исследуемом спектральном диапазоне для ненасыщенных, неперекрывающихся и не аномально слабых линий оценена как $(2-3) \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$.

На рис. 1 представлен зарегистрированный спектр в диапазоне $440-570 \text{ cm}^{-1}$, в котором расположена фундаментальная полоса ν_6 . Центр полосы находится около 506.7 cm^{-1} .

Общая информация о молекуле $^{13}\text{CHF}_3$ и теоретическое описание спектра

Молекула $^{13}\text{CHF}_3$ является молекулой типа симметричного волчка, группа симметрии которой изоморфна точечной группе C_{3v} [22,23]. Как следствие, любое колебательное состояние данной молекулы является состоянием симметрии A_1 , A_2 или E . Таким образом, все колебательно-вращательные переходы между двумя колебательными состояниями разрешены симметрией молекулы (за исключением переходов A_1/A_1 и A_2/A_2). Полоса ν_6 , которая рассматривается в настоящем исследовании, является „перпендикулярной“ полосой ($E \leftarrow A_1$) с правилами отбора (так называемые „разрешенные“ переходы) [24,25] $\Delta J = 0, \pm 1$ и $\Delta K = \pm 1$. Следует также учитывать дополнительное правило: переходы разрешены только между двумя вырожденными колебательно-вращательными состояниями (типа $E \leftarrow E$) или между двумя невырожденными колебательно-вращательными состояниями (типа $A_1 \leftarrow A_2$ или $A_2 \leftarrow A_1$). Также в данном спектре возможны слабые „запрещенные“ переходы, правила отбора для которых такие же, как и для „разрешенных“, за исключением ограничения на значение ΔK : для „запрещенных“ переходов оно произвольное.

Известно, что одним из наиболее успешных методов исследования спектров высокого разрешения различного типа многоатомных молекул является метод эффективных операторов [26–28]. Показано [29,30], что для исследования состояний симметрии E молекул типа симметричного волчка соответствующий эффективный гамильтониан имеет вид

$$H^E = H_1^E + H_2^E + H_3^E, \quad (1)$$

где

$$H_1^E = (|E_1\rangle\langle E_1| + |E_2\rangle\langle E_2|) \left\{ E + B(J_x^2 + J_y^2) + C J_z^2 - D_J J^4 - D_{JK} J^2 J_z^2 - D_K J_z^4 + H_J J^6 + H_{JK} J^4 J_z^2 + H_{KJ} J^2 J_z^4 + H_K J_z^6 + L_J J^8 + L_{JK} J^6 J_z^2 + L_{JK} J^4 J_z^4 + L_{KKJ} J^2 J_z^6 + L_K J_z^8 + P_J J^{10} + P_{JK} J^8 J_z^2 + \dots \right. \\ \left. + [(\epsilon_J J_z + \epsilon_J J_z J^2 + \epsilon_K J_z^3 + \dots), (J_+^3 + J_-^3)]_+ + \dots \right\}, \quad (2)$$

$$H_2^E = (|E_1\rangle\langle E_2| - |E_2\rangle\langle E_1|) \left\{ 2(C\xi) J_z + \eta_J J_z J^2 + \eta_K J_z^3 + \eta_{JJ} J_z J^4 + \eta_{JK} J_z^3 J^2 + \eta_{KK} J_z^5 + \eta_{JJJ} J_z J^6 + \eta_{JJK} J_z^3 J^4 + \eta_{JKK} J_z^5 J^2 + \eta_{KKK} J_z^7 + \eta_{JJJJ} J_z J^8 + \eta_{JJJK} J_z^3 J^6 + \dots \right\}, \quad (3)$$

$$H_3^E = (|E_2\rangle\langle E_2| - |E_1\rangle\langle E_1|) \left\{ [C, (J_+^2 + J_-^2)]_+ + [F, (J_+^4 + J_-^4)]_+ + (|E_1\rangle\langle E_2| + |E_2\rangle\langle E_1|) \times [iC, (J_+^2 - J_-^2)]_+ + [iF, (J_+^4 - J_-^4)]_+ \right\}, \quad (4)$$

и

$$C = \frac{1}{2} \gamma + \frac{1}{2} \gamma_J J^2 + \gamma_K J_z^2 + \frac{1}{2} \gamma_{JJ} J^4 + \gamma_{JK} J^2 J_z^2 + \gamma_{KK} J_z^4 + \dots, \\ F = \frac{1}{2} \kappa + \frac{1}{2} \kappa_J J^2 + \kappa_K J_z^2 + \frac{1}{2} \kappa_{JJ} J^4 + \kappa_{JK} J^2 J_z^2 + \kappa_{KK} J_z^4 + \dots, \quad (5)$$

где $E, B, C, D_J, D_{JK}, D_K, H_J, H_{JK}, H_{KJ}, H_K, L_J, \dots$ — вращательные параметры и параметры центробежного искажения. Операторы $(J_+^3 + J_-^3)$ связывают вращательные состояния $|JK\rangle$ и $|JK'\rangle$ с различными значениями квантовых чисел K , а именно $\Delta K = K - K' = \pm 3$, а операторы J_+ и J_- имеют вид $J_{\pm} = J_x \mp iJ_y$. Параметры ϵ_J и ϵ_K описывают зависимость главного параметра ϵ от квантовых чисел J и K . Выражение $[\dots, \dots]_+$ обозначает антикоммутатор. Оператор (3) описывает так называемое $k-l$ -расщепление в молекулах типа симметричного волчка. Например, первое слагаемое $2(C\xi)J_z$ описывает его главный вклад; остальные параметры описывают различные порядки поправок центробежного искажения. Оператор (4) описывает разного рода связи

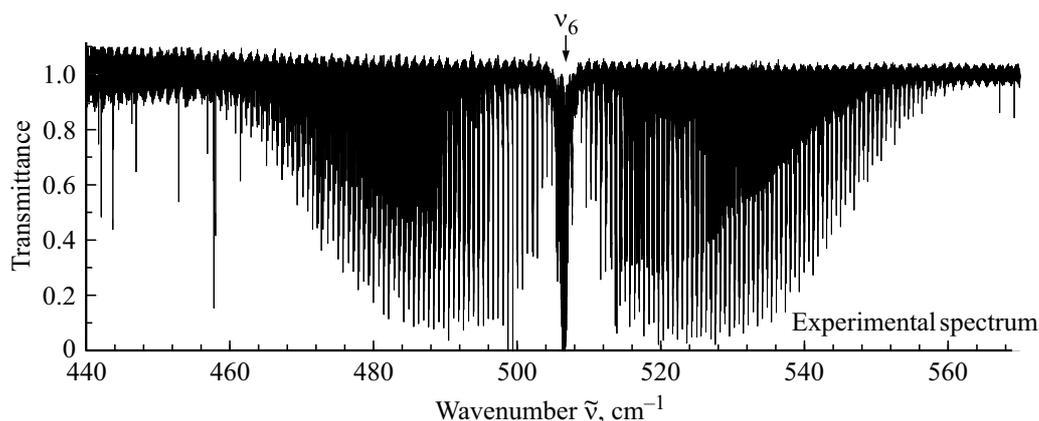


Рис. 1. Экспериментальный спектр молекулы $^{13}\text{CHF}_3$ в районе полосы ν_6 .

между колебательно-вращательными состояниями с разными значениями K .

Интерпретация спектра и результаты анализа

В данной работе был проведен анализ спектра полосы ν_6 , которая ранее не была изучена. Анализ спектра проводился на основе метода комбинационных разностей, ранее широко использовавшегося авторами для исследования спектров различного типа молекул [31–33]. Все переходы осуществлялись с основного колебательно-вращательного состояния, параметры которого были взяты из работы [18].

На рис. 2 представлена небольшая часть спектра высокого разрешения в районе $489.05\text{--}489.5\text{ cm}^{-1}$, на которой изображена P -ветвь полосы ν_6 (а именно кластер $^P P_{26}(K, \Gamma)$) молекулы $^{13}\text{CHF}_3$. Можно видеть четкую структуру спектра.

В результате анализа было проинтерпретировано около 5500 линий, которые были использованы для определения колебательно-вращательных уровней верхнего состояния $\nu_6 = 1$. В результате было определено 2607 колебательно-вращательных энергий исследуемого колебательно-вращательного состояния, которые соответствуют максимальным значениям квантовых чисел $J^{\text{max}} = K^{\text{max}} = 54$. В качестве иллюстрации часть полученных значений энергий представлена в табл. 2.

Полученные значения энергий были использованы в процедуре варьирования с эффективным гамильтонианом (1). В результате решения обратной спектроскопической задачи был получен набор вращательных и центробежных параметров колебательного состояния $\nu_6 = 1$, приведенный в табл. 3. В скобках при значениях параметров приведены величины статистических 66-процентных доверительных интервалов. Параметры, приведенные без доверительных интервалов, были взяты равными параметрам основного состояния. Такое допущение было сделано, поскольку, во-

Таблица 2. Фрагмент списка экспериментальных колебательно-вращательных энергий возбужденного колебательного состояния $\nu_6 = 1$ молекулы $^{13}\text{CHF}_3$

| J | K | Γ | $E, \text{ cm}^{-1}$ | $\delta \cdot 10^{-5}, \text{ cm}^{-1}$ | J | K | Γ | $E, \text{ cm}^{-1}$ | $\delta \cdot 10^{-5}, \text{ cm}^{-1}$ |
|-----|-----|----------|----------------------|---|-----|-----|----------|----------------------|---|
| 8 | 8 | E | 523.99362 | -3 | 9 | 4 | A_2 | 536.43383 | -1 |
| 8 | 7 | A_1 | 526.02440 | 1 | 9 | 3 | $1E$ | 537.21420 | -4 |
| 8 | 7 | A_2 | 526.02440 | 1 | 9 | 2 | E | 537.68251 | 4 |
| 8 | 6 | $1E$ | 527.74297 | 1 | 9 | 0 | E | 537.79038 | 8 |
| 8 | 5 | E | 529.14937 | 5 | 9 | 1 | E | 537.32563 | -10 |
| 8 | 4 | A_1 | 530.24340 | 1 | 9 | 4 | E | 534.07350 | 0 |
| 8 | 4 | A_2 | 530.24340 | 1 | 9 | 5 | A_1 | 532.36983 | 3 |
| 8 | 3 | $1E$ | 531.02502 | -4 | 9 | 5 | A_2 | 532.36983 | 3 |
| 8 | 0 | E | 531.58111 | -15 | 9 | 6 | $2E$ | 530.35622 | 1 |
| 8 | 1 | E | 531.11743 | -5 | 9 | 7 | E | 528.03268 | 0 |
| 8 | 2 | A_1 | 530.34435 | 1 | 9 | 8 | A_1 | 525.39915 | -1 |
| 8 | 2 | A_2 | 530.34435 | 1 | 9 | 8 | A_2 | 525.39915 | -1 |
| 8 | 3 | $2E$ | 529.26163 | 0 | 9 | 9 | $2E$ | 522.45555 | -3 |
| 8 | 4 | E | 527.86915 | -3 | 10 | 10 | A_1 | 532.08179 | -4 |
| 8 | 5 | A_1 | 526.16678 | -7 | 10 | 10 | A_2 | 532.08179 | -4 |
| 8 | 5 | A_2 | 526.16678 | -7 | 10 | 9 | $1E$ | 534.73403 | -2 |
| 8 | 6 | $2E$ | 524.15451 | -2 | 10 | 8 | E | 537.07387 | 1 |
| 8 | 7 | E | 521.83210 | -3 | 10 | 7 | A_1 | 539.10137 | 2 |
| 8 | 8 | A_1 | 519.19959 | -1 | 10 | 7 | A_2 | 539.10137 | 2 |
| 8 | 8 | A_2 | 519.19959 | -1 | 10 | 6 | $1E$ | 540.81657 | -8 |
| 9 | 9 | $1E$ | 527.84891 | 4 | 10 | 5 | E | 542.21985 | 0 |
| 9 | 8 | E | 530.19038 | 2 | 10 | 4 | A_1 | 543.31107 | 0 |
| 9 | 7 | A_1 | 532.21958 | 2 | 10 | 4 | A_2 | 543.31107 | 0 |
| 9 | 7 | A_2 | 532.21958 | 2 | 10 | 2 | E | 544.55809 | 10 |
| 9 | 6 | $1E$ | 533.93654 | 2 | 10 | 2 | A_1 | 543.44856 | -10 |
| 9 | 5 | E | 535.34125 | -2 | 10 | 2 | A_2 | 543.44856 | -10 |
| 9 | 4 | A_1 | 536.43383 | -1 | 10 | 3 | $2E$ | 542.36350 | 8 |

первых, спектроскопические параметры возбужденного колебательного состояния не должны сильно отличаться по величине и знаку от параметров основного колебательного состояния. Во-вторых, при варьировании данных параметров не наблюдается улучшения результатов расчета (не уменьшается среднеквад-

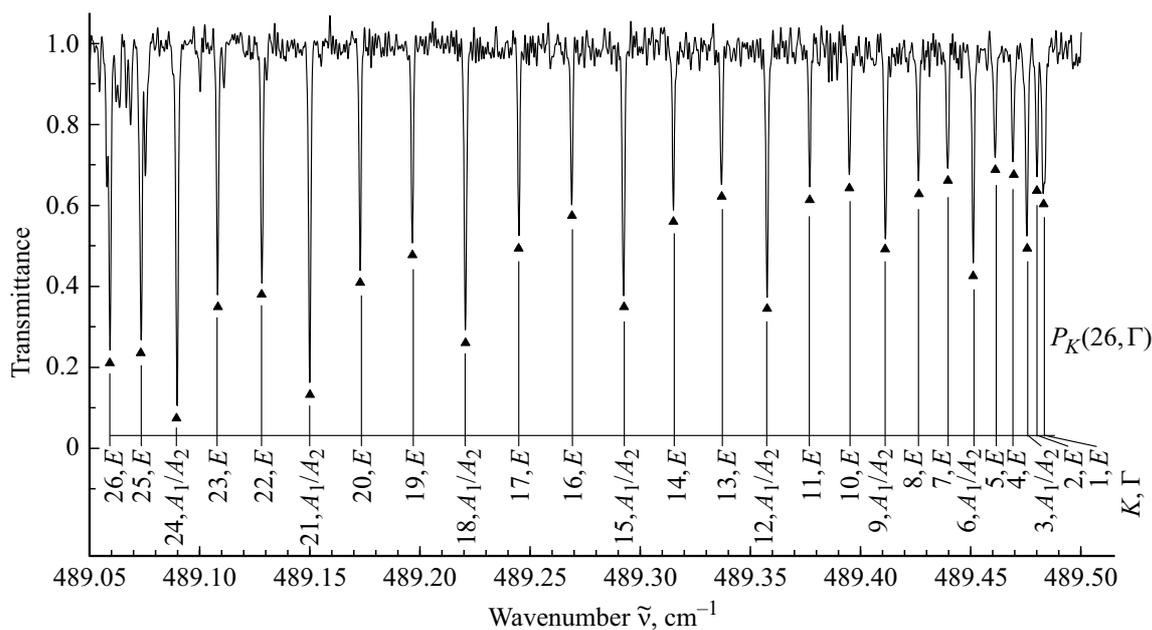


Рис. 2. Фрагмент спектра высокого разрешения полосы ν_6 молекулы $^{13}\text{CHF}_3$ в диапазоне $489.05\text{--}489.5\text{ cm}^{-1}$.

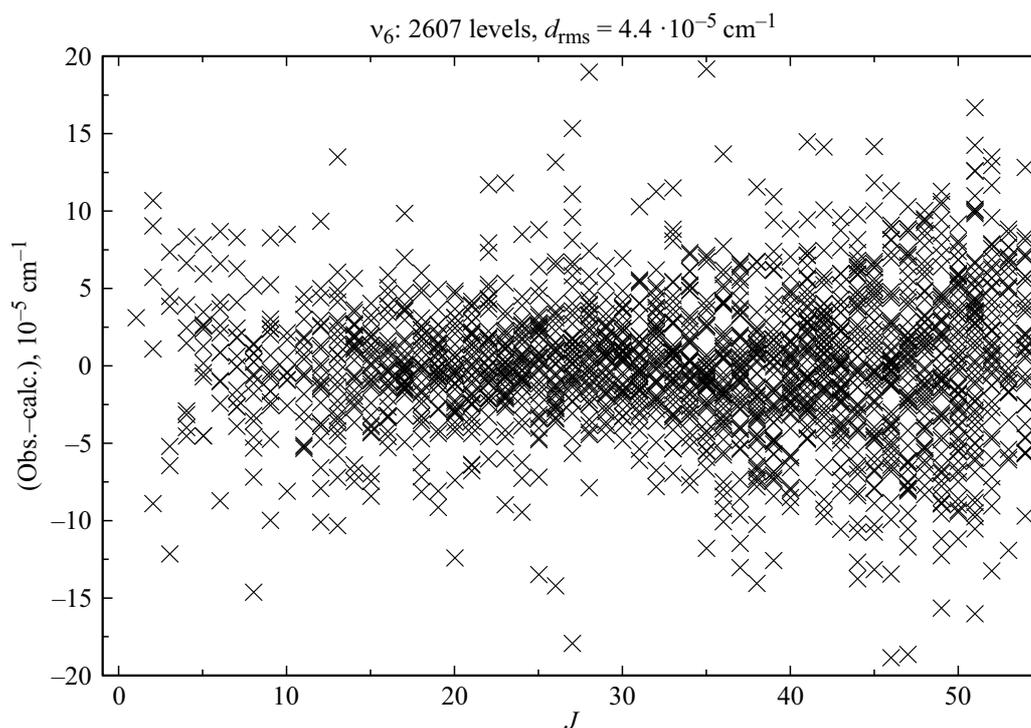


Рис. 3. Разности между экспериментальными и расчетными значениями энергетических уровней состояния $\nu_6 = 1$ в зависимости от квантового числа J .

ратичное отклонение), а при их занулении происходит искажение параметров, задействованных в процедуре подгонки. Здесь же для удобства читателя приведены параметры основного колебательного состояния, взятые из работы [18]. Полученный в данной работе набор параметров является физически разумным и воспроизводит исходные экспериментальные данные со средне-

квадратичным отклонением $d_{\text{rms}} = 4.4 \cdot 10^{-5}\text{ cm}^{-1}$, что соответствует точности нашего эксперимента. В качестве иллюстрации качества полученных результатов на рис. 3 представлены разности между экспериментальными и расчетными значениями энергетических уровней состояния $\nu_6 = 1$ в зависимости от квантового числа J .

Таблица 3. Спектроскопические параметры основного состояния и состояния $\nu_6=1$ молекулы $^{13}\text{CHF}_3$ (в см^{-1})

| Параметр | Основное состояние [18] | ($\nu_6 = 1$) |
|-----------------------------|-------------------------|-----------------|
| E | | 506.7518878(41) |
| B | 0.344304863 | 0.344432202(26) |
| C | 0.1892506 | 0.188909725(26) |
| $\Delta_J \cdot 10^6$ | 0.373859 | 0.375938(45) |
| $\Delta_{JK} \cdot 10^6$ | -0.596077 | -0.601015(76) |
| $\Delta_K \cdot 10^6$ | 0.3024 | 0.304719(39) |
| $H_J \cdot 10^{11}$ | 0.06217 | 0.0598(24) |
| $H_{JK} \cdot 10^{11}$ | -0.283 | -0.1857(41) |
| $H_{KJ} \cdot 10^{11}$ | 0.343 | 0.2255(31) |
| $L_J \cdot 10^{16}$ | | -0.337(52) |
| $L_{JK} \cdot 10^{16}$ | -0.0138 | 0.750(74) |
| $L_{JKK} \cdot 10^{16}$ | 0.28 | -0.0138 |
| $\epsilon \cdot 10^7$ | | 0.28 |
| $2C\xi$ | | 0.5157(74) |
| $\eta_J \cdot 10^5$ | | -0.29970142(40) |
| $\eta_K \cdot 10^5$ | | 0.12787(21) |
| $\eta_{JJ} \cdot 10^9$ | | -0.13075(21) |
| $\eta_{JK} \cdot 10^9$ | | 0.2638(32) |
| $\eta_{KK} \cdot 10^9$ | | -0.5247(29) |
| $\eta_{JJJ} \cdot 10^{12}$ | | 0.2681(56) |
| $\eta_{JKK} \cdot 10^{12}$ | | -0.1674(57) |
| $\eta_{KKK} \cdot 10^{12}$ | | 0.3349(11) |
| $\gamma \cdot 10^3$ | | -0.1674(57) |
| $\gamma_J \cdot 10^8$ | | -0.2962029(61) |
| $\gamma_{JK} \cdot 10^{12}$ | | 0.147846(72) |
| $\kappa_J \cdot 10^{11}$ | | -0.79041(23) |
| $\kappa_{JJ} \cdot 10^{14}$ | | -0.04445(66) |
| | | 0.013719(28) |

Заключение

В работе впервые проведен анализ колебательно-вращательной структуры спектра высокого разрешения полосы ν_6 молекулы $^{13}\text{CHF}_3$. В результате анализа было проинтерпретировано около 5500 переходов, принадлежащих исследуемой полосе с максимальными значениями квантовых чисел $J^{\text{max}} = K^{\text{max}} = 54$. Полученные экспериментальные данные о более 2600 колебательно-вращательных энергиях уровней возбужденного колебательного состояния ($\nu_6 = 1$) были использованы для определения спектроскопических параметров эффективного гамильтониана исследуемого состояния. Полученные параметры воспроизводят исходные экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $4.4 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$.

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке Томского политехнического университета.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] S.N. Ghosh, R. Trambarulo, W. Gordy. *J. Chem. Phys.*, **20** (4), 605 (1952). DOI: 10.1063/1.1700501
- [2] G. Graner, R. Anttila, J. Kauppinen. *Mol. Phys.*, **38** (1), 103 (1979). DOI: 10.1080/00268977900101551
- [3] H-R. Dübal, M. Quack. *Chem. Phys. Lett.*, **80** (3), 439 (1981). DOI: 10.1016/0009-2614(81)85053-1
- [4] G. Graner, G. Guelachvili. *J. Mol. Spectrosc.*, **107** (2), 215 (1984). DOI: 10.1016/0022-2852(84)90001-8
- [5] J.P. Champion, G. Graner. *Mol. Phys.*, **58** (3), 475 (1986). DOI: 10.1080/00268978600101301
- [6] M. Carlotti, G. Di Lonardo, L. Fusina, A. Trombetti. *J. Mol. Spectrosc.*, **123** (1), 135 (1987). DOI: 10.1016/0022-2852(87)90266-9
- [7] A. Amrein, M. Quack, U. Schmitt. *Mol. Phys.*, **60** (1), 237 (1987). DOI: 10.1080/00268978700100181
- [8] A.S. Pine, G.T. Fraser, J.M. Pliva. *J. Chem. Phys.*, **89** (5), 2720 (1988). DOI: 10.1063/1.455023
- [9] A.S. Pine, J.M. Pliva. *J. Mol. Spectrosc.*, **130** (2), 431 (1988). DOI: 10.1016/0022-2852(88)90090-2
- [10] M.A.O. Pashaev, O.I. Baskakov, B.I. Polevoy, S.F. Dyubko. *J. Mol. Spectrosc.*, **131** (1), 1 (1988). DOI: 10.1016/0022-2852(88)90100-2
- [11] R. Bocquet, D. Boucher, W.D. Chen, J. Cosleou, J. Demaison. *J. Mol. Spectrosc.*, **158** (2), 494 (1993). DOI: 10.1006/jmsp.1993.1096
- [12] G. Cazzoli, L. Cludi, G. Cotti, L. Dore, C. Degli Esposti, M. Bellini, P. De Natale. *J. Mol. Spectrosc.*, **163** (2), 521 (1994). DOI: 10.1006/jmsp.1994.1044
- [13] K.M. Smith, G. Duxbury, D.A. Newnham, J. Ballard. *J. Mol. Spectrosc.*, **212** (1), 6 (2002). DOI: 10.1006/jmsp.2002.8525
- [14] A. Ceausu-Velcescu, H. Bürger, G. Graner. *J. Mol. Spectrosc.*, **220** (2), 298 (2003). DOI: 10.1016/S0022-2852(03)00133-4
- [15] A. Ceausu-Velcescu, J. Cosléou, J. Demaison, G. Graner, G. Duxbury, H. Bürger. *J. Mol. Spectrosc.*, **220** (2), 291 (2003). DOI: 10.1016/S0022-2852(03)00132-2
- [16] S. Albert, S. Bauerecker, E.S. Bekhtereva, I.B. Bolotova, H. Hollenstein, M. Quack, O.N. Ulenikov. *Mol. Phys.*, **116** (9), 1091 (2018). DOI: 10.1080/00268976.2017.1392628
- [17] H.F. Chambers, R.W. Kirk, J.K. Thompson, M.J. Warner, P.M. Wilt. *J. Mol. Spectrosc.*, **58** (1), 76 (1975). DOI: 10.1016/0022-2852(75)90157-5
- [18] I.B. Bolotova, O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, S. Albert, Z. Chen, H. Hollenstein, D. Zindel, M. Quack. *J. Mol. Spectrosc.*, **337**, 96 (2017). DOI: 10.1016/j.jms.2017.05.003
- [19] S. Albert, E.S. Bekhtereva, I.B. Bolotova, Z. Chen, C. Fábri, H. Hollenstein, M. Quack, O.N. Ulenikov. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19** (39), 26527 (2017). DOI: 10.1039/c7cp04762b
- [20] H. Hollenstein, M. Lewerenz, M. Quack. *Chem. Phys. Lett.*, **165** (2-3), 175 (1990). DOI: 10.1016/0009-2614(90)85425-c
- [21] M. Pashaev, O.I. Baskakov, B.I. Polevoy, S.F. Dyubko. *J. Mol. Spectrosc.*, **131** (1), 1 (1988). DOI: 10.1016/0022-2852(88)90100-2
- [22] P. Bunker. *Molecular symmetry and spectroscopy*, 1st ed. (Academic Press, New York, 1979). DOI: 10.1016/B978-0-12-141350-7.X5001-0

- [23] O.N. Ulenikov, G.A. Onopenko, N.E. Tyabaeva, S. Alanko, M. Koivusaari, R. Anttila. *J. Mol. Spectrosc.*, **186** (2), 293 (1997). DOI: 10.1006/jmsp.1997.7431
- [24] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, V.A. Kozinskaia, J.-J. Zheng, S.-G. He, S.-M. Hu, Q.-S. Zhu, C. Leroy, L. Pluchart. *J. Mol. Spectrosc.*, **215** (2), 295 (2002). DOI: 10.1016/S0022-2852(02)98667-4
- [25] O.N. Ulenikov, A.E. Cheglov, G.A. Shevchenko, M. Winnewisser, B. Winnewisser. *J. Mol. Spectrosc.*, **157** (1), 141 (1993). DOI: 10.1006/jmsp.1993.1012
- [26] G. Guelachvili, O.V. Naumenko, O.N. Ulenikov. *J. Mol. Spectrosc.*, **131** (2), 400 (1988). DOI: 10.1016/0022-2852(88)90247-0
- [27] O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, N.I. Raspopova, P.G. Sennikov, M.A. Koshelev, I.A. Velmuzhova, A.P. Velmuzhov, A.D. Bulanov. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, **144**, 11 (2014). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2014.03.025
- [28] O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, Y.V. Krivchikova, E.A. Sklyarova, T. Buttersack, C. Sydow, S. Bauerecker. *J. Mol. Spectrosc.*, **318**, 26 (2015). DOI: 10.1016/j.jms.2015.09.009
- [29] H. Lin, O.N. Ulenikov, S. Yurchinko, X.-G. Wang, Q.-S. Zhu. *J. Mol. Spectrosc.*, **187** (1), 89 (1998). DOI: 10.1006/jmsp.1997.7463
- [30] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, A.L. Fomchenko, C. Sydow, S. Bauerecker. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, **272**, 107795 (2021). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107795
- [31] O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, I.B. Bolotova, I.A. Konov, V.-M. Horneman, C. Leroy. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, **113** (7), 500 (2012). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.01.006
- [32] O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, G.A. Onopenko, Y.S. Aslapovskaya, K.-N. Gericke, S. Bauerecker, V.-M. Horneman. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, **149**, 318 (2014). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2014.08.013
- [33] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, Y.V. Krivchikova, Yu.B. Morzhikova, T. Buttersack, C. Sydow, S. Bauerecker. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, **166**, 13 (2015). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.07.004