

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 551.510

# Исследование колебательно-вращательной энергетической структуры состояний $(0101, F_1)$ и $(0101, F_2)$ молекулы $^{28}\text{SiH}_4$

Н.И. Распопова\*

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Физико-технический институт  
634050, г. Томск, пр. Ленина, 30*

Поступила в редакцию 24.05.2017 г.

Впервые выполнен анализ колебательно-вращательного ИК-спектра высокого разрешения деформационных полос поглощения  $\nu_2 + \nu_4(F_1)$  и  $\nu_2 + \nu_4(F_2)$  молекулы  $^{28}\text{SiH}_4$  с помощью программного пакета SPHETOM. Проинтерпретировано около 618 экспериментальных переходов с  $J^{\text{max}} = 8$ . Из решения обратной спектроскопической задачи определены вращательные, центробежные, резонансные параметры и параметры тетраэдрических расщеплений исследуемых колебательных состояний. Полученный набор параметров воспроизводит исходные экспериментальные данные с точностью, близкой к экспериментальной,  $d_{\text{rms}} = 8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ .

*Ключевые слова:* деформационные колебания, обертоны, тетраэдрические расщепления, резонансные взаимодействия; bending vibrations, overtones, tetrahedral splittings, resonance interactions.

## Введение

Колебательно-вращательным спектрам молекулы силана  $^{28}\text{SiH}_4$  посвящены различные работы: основное состояние молекулы изучено в [1, 2]; в [3–5] проанализированы полосы диады  $\nu_2/\nu_4$ ; в [6, 7] на основе спектров комбинационного рассеяния и Фурье-спектров выполнен анализ состояний  $\nu_1$  и  $\nu_3$ . Высокий интерес исследователей объясняется тем фактом, что силан находит широкое применение в различных областях науки и техники: спектроскопии, термодинамики, астрофизики, планетологии и др. [8–11]. В частности, в газовой фазе силан содержится в планетарной туманности, окружающей звезду IRC+10216, а также в атмосферах планет-гигантов (Юпитер, Сатурн). Кроме того, поскольку  $\text{SiH}_4$  — молекула типа сферического волчка, группа симметрии которой изоморфна точечной группе симметрии  $T_d$ , исследование ее спектров высокого разрешения представляет интерес и с чисто теоретической точки зрения.

Подобно метану и другим молекулам, обладающим тетраэдрической симметрией в равновесной конфигурации, силан «генерирует» сложные колебательно-вращательные спектры. Однако изотопный состав природного кремния богаче, чем углерода, что позволяет более подробно исследовать влияния изотопного смещения на молекулярные параметры. Кроме того, в отличие от метана, вторая группа сильно взаимодействующих фундаментальных полос  $\nu_1$  и  $\nu_3$  в спектрах силана расположена относительно дефор-

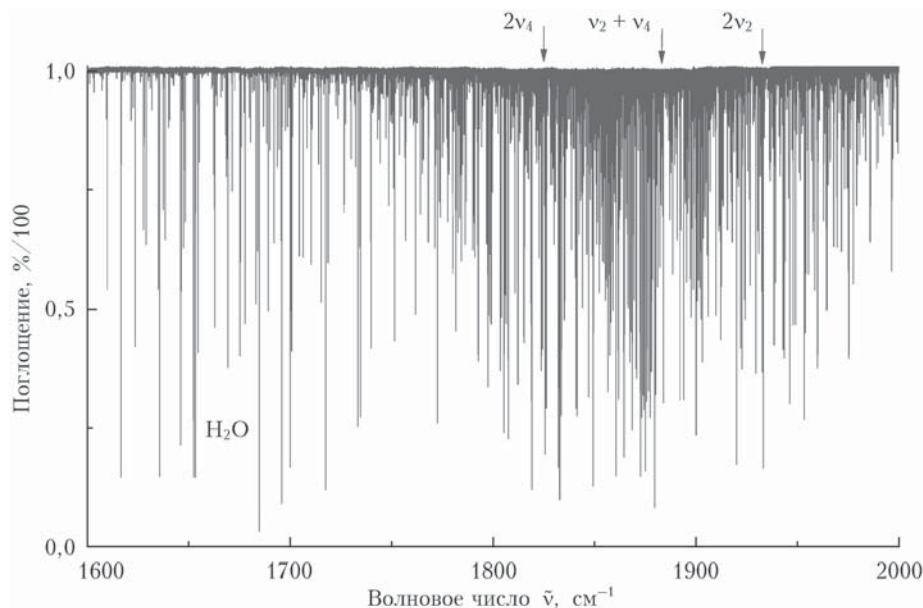
мационных  $2\nu_2$ ,  $2\nu_4$  и  $\nu_2 + \nu_4$  в области больших частот на расстоянии, позволяющем рассматривать эти группы полос отдельно.

Несмотря на все вышесказанное, на сегодняшний день в литературе отсутствует информация о тонкой колебательно-вращательной структуре спектров дважды возбужденных деформационных колебаний. Поэтому данное исследование направлено на восполнение отмеченного пробела, а именно, на определение спектроскопических параметров состояний  $(0101, F_1)$  и  $(0101, F_2)$ .

## Экспериментальные условия и описание спектра поглощения

Для решения вышеозвученной задачи использовался экспериментальный спектр, зарегистрированный на Фурье-спектрометре высокого разрешения Bruker-120 HR в Техническом университете Брауншвейга (Германия) в спектральном диапазоне  $1600\text{--}2000 \text{ см}^{-1}$ , при температуре  $298 \text{ К}$  с разрешением  $0,0025 \text{ см}^{-1}$  и давлении  $37 \text{ Па}$  в кювете из нержавеющей стали длиной  $1,0 \text{ м}$ , оснащенной окнами из КВг. Спектр был получен в результате  $1150$  сканирований и откалиброван по линиям воды. На рисунке представлен зарегистрированный спектр. Справа четко видны полосы  $\nu_2 + \nu_4(F_1)$  и  $\nu_2 + \nu_4(F_2)$  с центрами вблизи  $1880 \text{ см}^{-1}$ , а слева — линии калибровочного газа  $\text{H}_2\text{O}$ . Полосы  $2\nu_4$  и  $2\nu_2$  с центрами вблизи  $1820$  и  $1940 \text{ см}^{-1}$  соответственно практически не видны на фоне полос  $\nu_2 + \nu_4(F_1)$  и  $\nu_2 + \nu_4(F_2)$ .

\* Наталья Ивановна Распопова (gaspopovani@tpu.ru).



Спектр поглощения молекулы SiH<sub>4</sub> в районе полос 2ν<sub>4</sub>/ν<sub>2</sub> + ν<sub>4</sub> и 2ν<sub>2</sub>

Как уже отмечалось ранее, SiH<sub>4</sub> — это молекула типа сферического волчка, чья группа симметрии изоморфна точечной группе симметрии  $T_d$ . Как следствие, в спектрах поглощения проявляются только переходы между колебательными состояниями ( $\nu\Gamma$ ) и ( $\nu'\Gamma'$ ), для которых выполняется условие

$$\Gamma \otimes \Gamma' \in F_2. \quad (1)$$

Здесь знак  $\otimes$  обозначает тензорное произведение. Таким образом, из основного колебательного состояния (симметрия  $A_1$ ) переходы разрешены только на колебательные состояния симметрии  $F_2$ , в нашем случае это полосы  $\nu_2 + \nu_4$  ( $F_2$ ) и  $2\nu_4$  ( $F_2$ ). Переходы на колебательные состояния любой другой симметрии могут появляться в спектре поглощения только из-за резонансных взаимодействий с разрешенными колебательными состояниями. Однако, как видно из рисунка, кластерная структура, типичная для полос симметрии  $F_2$ , существенно искажается в виду сильных резонансных взаимодействий.

## Математическая модель

Используемый в данной работе пакет программ SPHETOM (Spherical Top Molecules) [12–14] реализован на языке FORTRAN. С его помощью можно как производить расчеты спектров высокого разрешения для различных полиад взаимодействующих колебательных состояний, так и выполнять интерпретацию спектров и решать обратную спектроскопическую задачу для молекул тетраэдрической симметрии. В ее основе лежит модель эффективных вращательных операторов (см., например, [15–20]):

$$H^{\text{vib-rot}} = \sum_{i,j} |i\rangle\langle j| H^{i,j}. \quad (2)$$

Для молекул высокой симметрии данное выражение можно представить в виде [21–24]:

$$H^{\text{vib-rot}} = \sum_{\nu\gamma, \nu'\gamma'} \sum_{m\Gamma} [(|\nu\gamma\rangle \otimes \langle \nu'\gamma'|)^{m\Gamma} \otimes H_{\nu\gamma, \nu'\gamma'}^{m\Gamma}]^{A_1} \equiv \sum_{\nu\gamma, \nu'\gamma'} \sum_{m\Gamma} \sum_{\Omega K} [(|\nu\gamma\rangle \otimes \langle \nu'\gamma'|)^{m\Gamma} \otimes R^{\Omega(K, m\Gamma)}]^{A_1} Y_{\nu\gamma, \nu'\gamma'}^{\Omega(K, m\Gamma)}. \quad (3)$$

Здесь  $Y_{\nu\gamma, \nu'\gamma'}^{\Omega(K, m\Gamma)}$  — спектроскопические параметры, которые в случае, когда  $\nu = \nu'$  и  $\gamma = \gamma'$ , описывают вращательную структуру колебательного состояния ( $\nu\gamma$ ); если  $\gamma = \gamma'$ , но  $\nu \neq \nu'$ , спектроскопические параметры описывают взаимодействие Ферми; в случае  $\gamma \neq \gamma'$  и для любых  $\nu$  и  $\nu'$   $Y_{\nu\gamma, \nu'\gamma'}^{\Omega(K, m\Gamma)}$  — параметры кориолисова взаимодействия;  $|\nu\gamma\rangle$  — это симметризованные колебательно-вращательные волновые функции:

$$|\nu\gamma_\nu; Jn_j\gamma_r; m\gamma_s\rangle \equiv (|\nu\gamma_\nu\rangle \otimes |Jn_j\gamma_r\rangle)_s^{\gamma} = \sqrt{[\gamma]} \sum_{\sigma_\nu\sigma_r} \begin{pmatrix} \gamma & \gamma_\nu & \gamma_r \\ s & \sigma_\nu & \sigma_r \end{pmatrix} |\nu\gamma_\nu\sigma_\nu\rangle |Jn_j\gamma_r\sigma_r\rangle, \quad (4)$$

где совокупность индексов  $\nu\gamma_\nu$ ,  $Jn_j\gamma_r$  и  $m\gamma_s$  однозначно определяет любую колебательно-вращательную функцию, симметризованную в группе  $T_d$ . Функции  $|\nu\gamma_\nu\sigma_\nu\rangle$  и  $|Jn_j\gamma_r\sigma_r\rangle$  в уравнении (4) — чисто колебательные и чисто вращательные волновые функции, также симметризованные в группе  $T_d$ :

$$|Jn_j\gamma_r\sigma_r\rangle = \sum_k^{(J)} G_{n_j\gamma_r\sigma_r}^k |Jk\rangle. \quad (5)$$

Операторы  $R_\sigma^{\Omega(K, m\Gamma)}$  в формуле (3) — это так называемые неприводимые относительно точечной группы тетраэдра вращательные операторы

$$R_\sigma^{\Omega(K, m\Gamma)} = \sum_m^K G_{m\sigma}^m R_m^{\Omega(K)}. \quad (6)$$

Коэффициенты  $^{(J)}G_{n_j\gamma_r\sigma_r}^k$  и  $^K G_{m\sigma}^m$  в формулах (5) и (6) — это элементы матрицы, которая осуществляет

редукцию неприводимых представлений группы вращений ( $SO_3$ ) на неприводимые представления группы тетраэдра ( $T_d$ ). Функции  $|Jk\rangle$  – обычные вращательные функции, а  $R_m^{\Omega(K)}$  – неприводимые операторы группы вращений, для которых справедливы следующие соотношения:

$$R_m^{\Omega(K)} = R_m^{\Omega=K(K)}(R^{2(0)})^{(\Omega-K)/2}, \quad (7)$$

$$R_{\bar{m}}^{\Omega+1(K+1)} = \sum_{l=-1,0,1} C_{K\bar{m}-l,1l}^{K+1\bar{m}} R_{\bar{m}-l}^{\Omega(K)} R_l^{1(1)}, \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} R_1^{1(1)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x - iJ_y) \equiv -J_+, \\ R_{-1}^{1(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x + iJ_y) \equiv J_-, \\ R_0^{1(1)} &= J_z \equiv J_0. \end{aligned} \quad (9)$$

Индекс  $\Omega$  в  $R_{\sigma}^{\Omega(K,m^{\Gamma})}$  обозначает суммарную степень элементарных операторов  $J_{\alpha}$ ,  $\alpha = x, y, z$ ;  $K$  – ранг вращательного оператора;  $n$  и  $\gamma$  – номер и симметрия вращательного оператора в группе симметрии молекулы.

## Определение спектроскопических параметров

Интерпретация экспериментальных колебательно-вращательных линий полос (0101,  $F_1$ ) и (0101,  $F_2$ ) была выполнена с помощью программного пакета

SPHETOM. На первом этапе анализа использовался метод комбинаций разностей [25–29]. Для этого были рассчитаны значения энергии основного колебательного состояния на основе параметров из работы [5], которые затем использовались для интерпретации линий в экспериментальном спектре. В результате анализа было впервые найдено 618 переходов с максимальным значением квантового числа  $J = 8$ , относящихся к 237 значениям энергии верхних колебательно-вращательных состояний исследуемых полос. В качестве иллюстрации небольшая часть результатов приведена в табл. 1: в первых двух столбцах даны экспериментальные значения энергий вращательных состояний с квантовыми числами  $J, n, \gamma$  возбужденного колебательного состояния, указанного в четвертом столбце.

Полученные значения энергий затем использовались для решения обратной спектроскопической задачи с гамильтонианом (3). Следует отметить, что состояния  $2\nu_2$  и  $2\nu_4$  использовались как темные. В итоге были определены 39 различных спектроскопических параметров  $Y_{\nu,\nu'}^{\Omega(K,m^{\Gamma})}$  (22 параметра диагональных блоков и 17 параметров резонансного взаимодействия), которые представлены в табл. 2 вместе с их  $1\sigma$  статистическими доверительными интервалами (последние приведены в скобках).

Вышеупомянутый набор из 39 параметров воспроизводит 237 начальных значений экспериментальных колебательно-вращательных энергий с  $d_{\text{rms}} = 8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ , что близко к экспериментальным погрешностям. Это можно считать хорошим подтверждением правильности полученного результата.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Томского политехнического университета по программе ВИУ-ФТИ-72/2014.

Таблица 1

Небольшая часть полученных колебательно-вращательных энергий молекулы  $^{28}\text{SiH}_4$

$J n \gamma$	$E_{\nu}, \text{ см}^{-1}$	$\delta \cdot 10^4, \text{ см}^{-1}$	Полоса	$J n \gamma$	$E_{\nu}, \text{ см}^{-1}$	$\delta \cdot 10^4, \text{ см}^{-1}$	Полоса
3 4 $A_2$	1926,7418	–1,0	(0101, $F_1$ )	4 8 $F_2$	1926,6284	5,5	(0101, $F_2$ )
3 5 $E$	1917,2588	–0,2	(0101, $F_1$ )	4 10 $F_2$	1935,2238	–1,6	(0101, $F_2$ )
3 10 $F_2$	1928,7918	–9,9	(0101, $F_1$ )	4 7 $E$	1934,7019	–0,3	(0101, $F_2$ )
3 2 $A_1$	1907,6094	4,4	(0101, $F_1$ )	4 8 $F_1$	1927,5542	4,5	(0101, $F_1$ )
3 9 $F_1$	1917,4917	–1,2	(0101, $F_1$ )	4 12 $F_2$	1951,3358	0,9	(0101, $F_1$ )
3 8 $F_1$	1912,5469	–0,4	(0101, $F_2$ )	4 6 $E$	1926,6603	4,9	(0101, $F_2$ )
3 9 $E$	1929,6841	0,4	(0101, $F_2$ )	4 4 $A_1$	1940,2822	–0,1	(0101, $F_1$ )
3 11 $F_1$	1929,3722	0,3	(0101, $F_2$ )	4 13 $F_1$	1956,3375	0,8	(0101, $F_2$ )
3 4 $E$	1906,4824	0,1	(0101, $F_2$ )	5 11 $F_1$	1953,6008	1,2	(0101, $F_2$ )
3 3 $A_1$	1928,2605	–6,2	(0101, $F_2$ )	5 13 $F_2$	1970,3365	–8,8	(0101, $F_1$ )
3 10 $F_1$	1926,9153	9,2	(0101, $F_1$ )	5 16 $F_1$	1985,2412	–1,0	(0101, $F_1$ )
3 7 $F_1$	1906,7537	3,6	(0101, $F_2$ )	5 3 $A_2$	1934,5588	–11,7	(0101, $F_2$ )
3 6 $F_2$	1906,4394	–1,9	(0101, $F_2$ )	5 14 $F_1$	1971,5148	0,3	(0101, $F_1$ )
3 6 $E$	1928,9172	–1,1	(0101, $F_1$ )	5 16 $F_2$	1989,9035	2,6	(0101, $F_2$ )
4 11 $F_2$	1939,9659	–3,7	(0101, $F_2$ )	5 9 $F_2$	1952,4159	3,8	(0101, $F_2$ )
4 13 $F_2$	1954,0033	–0,5	(0101, $F_1$ )	5 6 $A_2$	1990,4177	6,5	(0101, $F_2$ )
4 10 $F_1$	1942,2022	–4,6	(0101, $F_1$ )	5 12 $F_1$	1962,3303	1,2	(0101, $F_2$ )
4 7 $F_1$	1926,7417	–9,4	(0101, $F_2$ )	5 7 $E$	1953,6989	11,6	(0101, $F_2$ )
4 9 $F_1$	1940,2733	–3,9	(0101, $F_1$ )	5 10 $E$	1985,0191	9,4	(0101, $F_1$ )
4 14 $F_2$	1956,9648	2,8	(0101, $F_2$ )	5 13 $F_1$	1968,7290	0,1	(0101, $F_1$ )

Спектроскопические параметры  $Y_{\nu\gamma, \nu'\gamma'}^{\Omega(K, m\Gamma)}$  взаимодействующих колебательных состояний  $\nu_2 + \nu_4 (F_1)$  и  $\nu_2 + \nu_4 (F_2)$  молекулы  $^{28}\text{SiH}_4$ 

$\nu\gamma$	$\nu'\gamma'$	$\Omega(K, m\Gamma)$	$^{28}\text{SiH}_4$
(0200, $A_1$ )	(0200, $A_1$ )	0(0, $A_1$ )	-4,4565(24)
(0200, $E$ )	(0200, $E$ )	0(0, $A_1$ )	0,893501(39)
(0200, $E$ )	(0200, $E$ )	$3(3, A_2) \cdot 10^4$	0,4682(29)
(0200, $E$ )	(0101, $F_1$ )	$1(1, F_1) \cdot 10^2$	9,5913(79)
(0200, $E$ )	(0101, $F_1$ )	$2(2, F_2) \cdot 10^3$	-0,9963(52)
(0200, $E$ )	(0101, $F_2$ )	$1(1, F_1) \cdot 10^2$	2,4174(67)
(0200, $E$ )	(0101, $F_2$ )	$2(2, F_2) \cdot 10^2$	-0,219(14)
(0200, $A_1$ )	(0002, $A_1$ )	0(0, $A_1$ )	-5,6474(93)
(0200, $E$ )	(0002, $F_2$ )	$1(1, F_1)$	0,28566(41)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_1$ )	0(0, $A_1$ )	2,692743(25)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_1$ )	$1(1, F_1) \cdot 10^2$	-4,0247(55)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_1$ )	$2(0, A_1) \cdot 10^2$	-0,4036(17)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_1$ )	$2(2, E) \cdot 10^2$	0,7411(26)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_1$ )	$2(2, F_2) \cdot 10^2$	0,1816(41)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_2$ )	$1(1, F_1) \cdot 10^2$	-9,715(10)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_2$ )	$2(2, E) \cdot 10^3$	-0,5306(28)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_2$ )	$2(2, F_2) \cdot 10^3$	-0,8435(31)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_2$ )	$3(1, F_1) \cdot 10^4$	-0,3408(24)
(0101, $F_1$ )	(0101, $F_2$ )	$3(3, A_2) \cdot 10^5$	-0,437(16)
(0101, $F_2$ )	(0101, $F_2$ )	0(0, $A_1$ )	-2,73279(26)
(0101, $F_2$ )	(0101, $F_2$ )	$1(1, F_1)$	-0,20044(41)
(0101, $F_2$ )	(0101, $F_2$ )	$2(2, E) \cdot 10^3$	0,4109(29)
(0101, $F_2$ )	(0101, $F_2$ )	$2(2, F_2) \cdot 10^2$	0,18572(73)
(0101, $F_2$ )	(0101, $F_2$ )	$3(1, F_1) \cdot 10^3$	-0,16015(59)
(0101, $F_1$ )	(0002, $F_2$ )	$1(1, F_1) \cdot 10^2$	-4,981(15)
(0101, $F_1$ )	(0002, $F_2$ )	$2(2, F_2) \cdot 10^2$	-0,3841(11)
(0101, $F_2$ )	(0002, $E$ )	$1(1, F_1) \cdot 10^2$	5,538(24)
(0101, $F_2$ )	(0002, $E$ )	$2(2, F_2) \cdot 10^4$	0,737(32)
(0101, $F_2$ )	(0002, $E$ )	$3(1, F_1) \cdot 10^4$	-0,5662(58)
(0101, $F_2$ )	(0002, $F_2$ )	0(0, $A_1$ )	-4,1439(18)
(0101, $F_2$ )	(0002, $F_2$ )	$2(0, A_1) \cdot 10^2$	-0,11611(71)
(0002, $A_1$ )	(0002, $A_1$ )	0(0, $A_1$ )	-14,9796(11)
(0002, $A_1$ )	(0002, $E$ )	$2(2, E) \cdot 10^2$	0,15136(57)
(0002, $E$ )	(0002, $E$ )	0(0, $A_1$ )	0,94349(14)
(0002, $E$ )	(0002, $E$ )	$2(2, E) \cdot 10^2$	-0,10216(39)
(0002, $E$ )	(0002, $F_2$ )	$1(1, F_1) \cdot 10^2$	2,6524(23)
(0002, $F_2$ )	(0002, $F_2$ )	0(0, $A_1$ )	-2,4668(31)
(0002, $F_2$ )	(0002, $F_2$ )	$1(1, F_1) \cdot 10^2$	7,483(39)
(0002, $F_2$ )	(0002, $F_2$ )	$2(2, F_2) \cdot 10^2$	-0,21059(74)

1. Pierre G., Valentin A., Henry L. Le niveau de base du silane obtenu a partir de l'etude du spectre a transformee de Fourier de  $\nu_2$  et  $\nu_4$  // Can. J. Phys. 1984. V. 62. P. 254–259.
2. Pierre G., Valentin A., Henry L. Etude par transformee de Fourier, du spectre, du silane dans la region de  $1000 \text{ cm}^{-1}$ . Analyse de la diade  $\nu_2$  et  $\nu_4$  // Can. J. Phys. 1986. V. 64. P. 341–350.
3. Prinz H., Kreiner W.A., Pierre G. The silane isotopomers  $^{29}\text{SiH}_4$  and  $^{30}\text{SiH}_4$  constants of the  $\nu_2/\nu_4$  dyad // Can. J. Phys. 1990. V. 68. P. 551–562.
4. Prinz H., Kreiner W.A., Loete M., Jouvard J.M.  $^{29}\text{SiH}_4$  and  $^{30}\text{SiH}_4$ : Dipole moment parameters of the  $\nu_2/\nu_4$  dyad from Stark effect observations with laser sidebands // J. Mol. Spectrosc. 1990. V. 139. P. 30–38.
5. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Raspopova N.I., Kashirina N.V., Fomchenko A.L., Sydow C., Bauerecker S. High resolution study of  $^M\text{SiH}_4$  ( $M = 28, 29, 30$ ) in the dyad region: Analysis of line positions, intensities and half-widths // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2017. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.03.020.
6. Cabana A., Gray D.L., Mills I., Robiette A.G. Vibration-rotation coupling between  $\nu_1$  and  $\nu_3$  in  $\text{SiH}_4$  // J. Mol. Spectrosc. 1977. V. 66. P. 174–176.
7. Cabana A., Gray D.L., Robiette A.G., Pierre G. Analysis of the  $\nu_3$  and  $\nu_1$  infra-red bands of  $\text{SiH}_4$  // Mol. Phys. 1978. V. 36. P. 1503–1516.
8. Allen W.D., Schaefer H.F. Geometrical structures, force constants, and vibrational spectra of  $\text{SiH}$ ,  $\text{SiH}_2$ ,  $\text{SiH}_3$ , and  $\text{SiH}_4$  // Chem. Phys. 1986. V. 108. P. 243–274.
9. Chuprova L.A., Sennikov P.G., Tokhadze K.G., Ignatov S.K., Schrems O. High resolution Fourier-transform IR spectroscopic determination of impurities in silicon tetrafluoride and silane prepared from it // Inorg. Matter. 2006. V. 42. P. 924–931.
10. Cochran A.L. Solar system science enabled with the next generation space telescope // Sci. NGST ASP Conf. Ser. 1998. V. 133. P. 188–197.
11. Monnier J.D., Danchi W.C., Hale D.S., Tuthill P.G., Townes C.H. Mid-infrared interferometry on spectral lines. III. Ammonia and silane around IRC +10216 and VY canis majoris // Astrophys. J. 2000. V. 543. P. 868–879.

12. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Raspopova N.I., Sennikov P.G., Koshelev M.A., Velmuzhova I.A., Velmuzhov A.P., Bulanov A.D. High resolution study of  ${}^M\text{GeH}_4$  ( $M = 76; 74$ ) in the dyad region // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2014. V. 144. P. 11–26.
13. Koshelev M.A., Velmuzhov A.P., Velmuzhova I.A., Sennikov P.G., Raspopova N.I., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Ulenikov O.N. High resolution study of strongly interacting  $\nu_1(A_1)/\nu_3(F_2)$  bands of  ${}^M\text{GeH}_4$  ( $M = 76; 74$ ) // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2015. V. 164. P. 161–174.
14. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Raspopova N.I., Fomchenko A.L., Sennikov P.G., Koshelev M.A., Velmuzhova I.A., Velmuzhov A.P. First high resolution ro-vibrational study of the (0200), (0101) and (0002) vibrational states of  ${}^M\text{GeH}_4$  ( $M = 76, 74$ ) // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 182. P. 199–218.
15. Zheng J.-J., Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., He S.-G., Wang X.-H., Hu S.-M., Lin H., Zhu Q.-S. High resolution vibration-rotation spectrum of the  $\text{D}_2\text{O}$  molecule in the region near the  $2\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$  absorption band // Mol. Phys. 2001. V. 99. P. 931–937.
16. Ulenikov O.N., Liu A.-W., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Hao L.-Y., Hu S.-M. On the study of high-resolution rovibrational spectrum of  $\text{H}_2\text{S}$  in the region of  $7300\text{--}7900\text{ cm}^{-1}$  // J. Mol. Spectrosc. 2004. V. 226. P. 57–70.
17. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Bolotova I.B., Konov I.A., Horneman V.-M., Leroy C. High resolution analysis of the  $\text{SO}_2$  spectrum in the  $2600\text{--}2900\text{ cm}^{-1}$  region:  $2\nu_3, \nu_2 + 2\nu_3 - \nu_2$  and  $2\nu_1 + \nu_2$  bands // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2012. V. 113. P. 500–517.
18. Ulenikov O.N., Hu S.-M., Bekhtereva E.S., Onopenko G.A., He S.-G., Wang X.-H., Zheng J.-J., Zhu Q.-S. High-resolution Fourier transform spectrum of  $\text{D}_2\text{O}$  in the region near  $0.97\text{ }\mu\text{m}$  // J. Mol. Spectrosc. 2001. V. 210. P. 18–27.
19. Bykov A.D., Makushkin Yu.S., Ulenikov O.N. The vibrational analysis of  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  // J. Mol. Spectrosc. 1983. V. 99. P. 221–227.
20. Ulenikov O.N., He S.-G., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Wang X.-H., Hu S.-M., Lin H., Zhu Q.-S. High-resolution study of the ( $\nu_1 + 12\nu_2 + \nu_3 = 3$ ) polyad of strongly interacting vibrational bands of  $\text{D}_2\text{O}$  // J. Mol. Spectrosc. 2000. V. 204. P. 216–225.
21. Ulenikov O.N., Malikova A.B., Alanko S., Koivusaari M., Anttila R. High-resolution study of the  $2\nu_5$  hybrid band of the  $\text{CHD}_3$  molecule // J. Mol. Spectrosc. 1996. V. 179. P. 175–194.
22. Ulenikov O.N., Sun F.-G., Wang X.-G., Zhu Q.-S. High resolution spectroscopic study of arsine:  $3\nu_1$  and  $2\nu_1 + \nu_3$  dyad: The tendency of symmetry reduction // J. Chem. Phys. 1996. V. 105. P. 7310–7315.
23. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Albert S., Bauerecker S., Niederer H.M., Quack M. Survey of the high resolution infrared spectrum of methane ( ${}^{12}\text{CH}_4$  and  ${}^{13}\text{CH}_4$ ): Partial vibrational assignment extended towards  $12000\text{ cm}^{-1}$  // J. Chem. Phys. 2014. V. 141. P. 234302\_1–234302\_33.
24. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Leroy C., Fomchenko A.L. On the “expanded local mode” approach applied to the methane molecule // J. Mol. Spectrosc. 2010. V. 264. P. 61–65.
25. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Grebneva S.V., Hollenstein H., Quack M. High-resolution ro-vibrational analysis of vibrational states of  $A_2$  symmetry of the deuterated methane  $\text{CH}_2\text{D}_2$ : The levels  $\nu_5$  and  $\nu_7 + \nu_9$  // Mol. Phys. 2006. V. 104. P. 3371–3386.
26. He S.-G., Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Wang X.-H., Hu S.-M., Lin H., Zhu Q.-S. High-resolution Fourier transform spectrum of the  $\text{D}_2\text{O}$  molecule in the region of the second triad of interacting vibrational states // J. Mol. Spectrosc. 2000. V. 200. P. 34–39.
27. Ulenikov O.N., Ushakova G.A. Analysis of  $\text{H}_2\text{O}$  molecule second hexade interacting vibrational states // J. Mol. Spectrosc. 1986. V. 117. P. 195–205.
28. Bykov A.D., Lopasov V.P., Makushkin Yu.S., Sinitisa L.N., Ulenikov O.N., Zuev V.E. Rotation-vibration spectra of deuterated water vapor in the  $9160\text{--}9390\text{ cm}^{-1}$  region // J. Mol. Spectrosc. 1982. V. 94. P. 1–27.
29. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Aslapovskaya Y.S., Ziatkova A.G., Sydow C., Maul C., Bauerecker S. 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- $\text{d}_2$ -ethylene // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 184. P. 76–88.

**N.I. Raspopova. Investigation of the ro-vibrational energy structure of (0101,  $F_1$ ) and (0101,  $F_2$ ) states of  ${}^{28}\text{SiH}_4$  molecule.**

The high-resolution analysis of the ro-vibrational IR spectrum of the absorption bending bands  $\nu_2 + \nu_4(F_1)$  and  $\nu_2 + \nu_4(F_2)$  of the  ${}^{28}\text{SiH}_4$  molecule is performed with the SPHETOM software package. About 618 experimental transitions are assigned to  $\nu_2 + \nu_4(F_1)$  and  $\nu_2 + \nu_4(F_2)$  bands with  $J^{\text{max}} = 8$ . Rotational, centrifugal distortion, tetrahedral splitting, and resonance interaction parameters for these vibrational bands are determined from the weighted fit of experimental line positions. The obtained set of parameters reproduces the initial experimental data with the accuracy closed to experimental uncertainties,  $d_{\text{rms}} = 8 \cdot 10^{-4}\text{ cm}^{-1}$ .