

УДК 530.145

Исследование спектра высокого разрешения полосы ν_2 диоксида серы

А.Г. Зятькова¹, В.А. Замотаева¹, И.А. Конов^{2*}

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, 30

²Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36

Поступила в редакцию 7.11.2017 г.

Полоса ν_2 исследована на основе метода комбинационных разностей с использованием FTIR-спектра высокого разрешения молекулы SO_2 в диапазоне 400–700 см^{-1} . Проинтерпретировано более 4500 линий с максимальными значениями квантовых чисел J и K_a , равными 96 и 25 соответственно. На этой основе определено 1294 энергетических колебательно-вращательных уровней состояния (010). В результате решения обратной задачи с использованием этих уровней получено 32 параметра эффективного гамильтониана, которые позволяют воспроизводить исходные экспериментальные данные с точностью $d_{\text{rms}} = 1,9 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

Ключевые слова: диоксид серы, спектр высокого разрешения, фундаментальная полоса; sulfur dioxide, high resolution spectrum, fundamental band.

Введение

Молекулярная спектроскопия — уникальный инструмент для изучения структуры и внутренних свойств молекул и решения связанных с этим проблем, например в физической химии, газоанализе, атмосферной оптике, астрофизике и многих других разделах науки. В настоящей работе исследуется двуокись серы SO_2 , роль которой в физике и химии окружающей среды хорошо известна. В частности, двуокись серы образуется при сжигании ископаемого топлива на предприятиях топливно-энергетического комплекса, в двигателях внутреннего сгорания, на предприятиях нефтехимического комплекса и др. Сернистый газ вреден не только для окружающей среды, но и для человека. В атмосфере он реагирует с водяным паром с образованием вторичного загрязнителя — серной кислоты (H_2SO_4) [1]. Исследование спектров высокого разрешения двуокиси серы также важно для планетологии и астрофизики. Например, анализ спектра атмосферы Венеры выявил наличие молекул диоксида серы, причем их содержание в атмосфере Венеры в миллион раз больше, чем в атмосфере Земли [2].

Спектры SO_2 в течение длительного времени исследуются в лабораторных условиях. Методы молекулярной спектроскопии позволяют получать экс-

периментальную информацию с высокой точностью, а также, на основе теоретических моделей, предсказывать характеристики ранее неисследованных возбужденных колебательных состояний и таким образом пополнять банки спектроскопических данных. Данная статья продолжает цикл работ, проводимых в течение последних лет в группе молекулярной спектроскопии ТПУ, направленных на изучение спектров высокого разрешения диоксида серы (например, [3–17]). В статье анализируется колебательно-вращательная структура полосы ν_2 . Найденные значения параметров превышают результаты, полученные ранее в [18, 19].

Экспериментальные условия

Инфракрасный Фурье-спектр молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ был зарегистрирован в Техническом университете Брауншвейга (Германия) в диапазоне 400–700 см^{-1} с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS120 HR, оснащенного оптической кюветой из нержавеющей стали с базовой длиной 1 м. Выполнено четыре прохода. Использовался источник ИК-излучения глобар. Всего было сделано 395 сканирований; длина оптического пути составила 4 м. Давление равнялось 0,1 мбар, инструментальное разрешение — 0,00096 см^{-1} . Калибровка спектра осуществлялась с помощью линий молекулы CO_2 .

На рис. 1 показана структура Q -ветви для квантового числа $K_a = 13$. Центры линий определялись с точностью $2 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

* Анастасия Георгиевна Зятькова (anastasia.litvinovskaya@mail.ru); Валерия Александровна Замотаева (lera.zamotaeva@mail.ru); Иван Александрович Конов (kiaff1188@mail.ru).

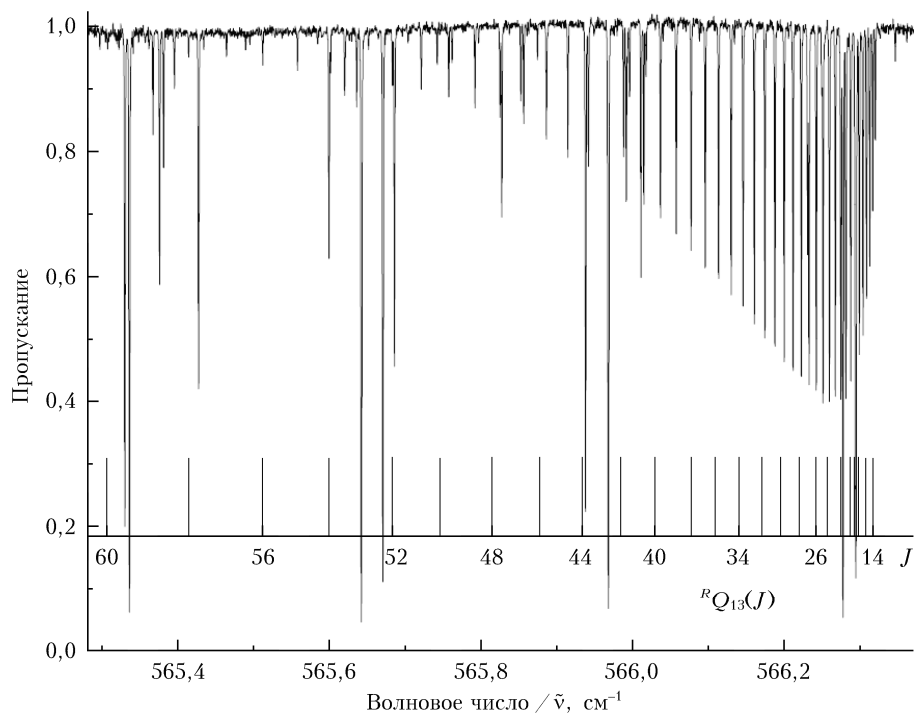


Рис. 1. Q-ветвь в диапазоне 565,2–566,4 см⁻¹

Общая информация о молекуле и анализ спектра поглощения

Молекула ³²S¹⁶O₂ — это молекула типа асимметричного волчка с параметром асимметрии $\kappa = (2B - A - C)/(A - C) \sim 0,948$. Группа симметрии этой молекулы изоморфна точечной группе симметрии C_{2v}. В молекуле возможны три нормальных колебания: q_1 , q_2 и q_3 (см., например, [20–22]). При операциях симметрии колебания q_1 (валентное симметричное колебание связи S=O) и q_2 (деформационное симметричное колебание связи O=S=O) преобразуются по неприводимому представлению A₁. В свою очередь, колебание q_3 (валентное асимметричное колебание связи S=O) обладает симметрией B₁. Длина связи S=O равна 1,43 Å, а равновесный угол O=S=O равен 119°. К особенностям данной молекулы относится также то, что только вращательные уровни с четными значениями $K_a + K_c$ допускаются для симметричных колебательных состояний вследствие спиновой статистики, обусловленной наличием двух эквивалентных ядер молекулы кислорода с нулевыми спинами.

Переход (ν_{A_1}) ← (ν_{gr}) соответствует так называемому *b*-типу колебательных полос; правила отбора для них имеют вид $\Delta J = 0 \pm 1$; $\Delta K_a = \pm 1$; $\Delta K_c = \pm 1$. Полоса ν_2 , для которой верхним является симметричное состояние (010), как раз и есть полоса *b*-типа.

Интерпретация спектра была выполнена на основе метода комбинационных разностей (см., например, [23–26]); параметры основного состояния взяты из работы [8]. В результате было проинтерпретировано более 4500 линий в исследуемом спектре.

Эффективный гамильтониан и определение его параметров

Поскольку молекула SO₂ — это молекула типа асимметричного волчка, то для описания энергетической структуры ее полос используется гамильтониан Уотсона [27–30]:

$$H = E + \left[A - \frac{1}{2}(B + C) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B + C) J^2 + \frac{1}{2}(B - C) J_{xy}^2 - \Delta_K J_z^4 - \Delta_{JK} J_z^2 J^2 - \Delta_J J^4 - \delta_K [J_z^2, J_{xy}^2]_+ - 2\delta_J J^2 J_{xy}^2 + \dots, \quad (1)$$

где $A, B, C, \Delta_K, \Delta_{JK}, \Delta_J$ — вращательные параметры и параметры центробежного искажения; E — центр полосы; оператор $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$; $[A, B]_+ = AB + BA$.

На основе анализа экспериментальных данных было получено 1294 значения колебательно-вращательной энергии с $J_{\max} = 96$, $K_{a\max} = 25$. В качестве иллюстрации часть из них приведена во второй колонке табл. 1.

В результате решения обратной спектроскопической задачи найдено 32 параметра, описывающих вращательную структуру колебательного состояния (010). В табл. 2 представлены полученные спектроскопические параметры состояния ν_2 (числа в скобках — 68,3% доверительные интервалы для полученных значений параметров). Эти параметры воспроизводят исходные экспериментальные данные с точностью, сопоставимой с экспериментальной (среднеквадратичное отклонение 0,00019 см⁻¹).

Таблица 1

Фрагмент списка значений колебательно-вращательных энергий состояния (010)

$J K_a K_c$	$E, \text{см}^{-1}$	$\delta^* \cdot 10^{-4}, \text{см}^{-1}$	Экс. — теор. $\times 10^{-4}, \text{см}^{-1}$	$J K_a K_c$	$E, \text{см}^{-1}$	$\delta \cdot 10^{-4}, \text{см}^{-1}$	Экс. — теор. $\times 10^{-4}, \text{см}^{-1}$
4 0 4	524,2280	2	-8	9 1 9	547,0627	1	-9
4 1 3	526,2460	-3	-6	9 2 8	553,4876	-3	-6
4 2 2	531,2515	5	-6	9 3 7	562,3219	4	-8
4 3 1	539,9726	4	-5	9 4 6	574,5271	4	-8
4 4 0	552,1900	1	-8	9 5 5	590,2162	8	-7
5 1 5	528,7870	4	-6	9 6 4	609,3775	0	-4
5 2 4	534,4184	9	-7	9 7 3	631,9962	1	-5
5 3 3	543,1627	8	-4	9 8 2	658,0567	8	-1
5 4 2	555,3793	-7	-8	9 9 1	687,5425	1	-6
5 5 1	571,0746	-2	-9	10 0 10	552,3960	3	-6
6 0 6	531,1762	0	-7	10 1 9	555,9303	0	-10
6 1 5	533,5228	3	-6	10 2 8	560,3532	-3	-8
6 2 4	538,3149	6	-6	10 3 7	568,7399	5	-8
6 3 3	546,9934	4	-9	10 4 6	580,9148	5	-10
6 4 2	559,2072	-3	-8	10 5 5	596,5996	9	-8
6 5 1	574,9019	-5	-8	10 6 4	615,7593	0	-5
6 6 0	594,0649	4	-1	10 7 3	638,3775	4	-6
7 1 7	536,7155	1	-6	10 8 2	664,4384	8	-6
7 2 6	542,6888	4	8	10 9 1	693,9248	7	-6
7 3 5	551,4615	-9	-11	10 10 0	726,8179	-9	-7
7 4 4	563,6742	-8	-7	11 1 11	559,8153	-5	-7
7 5 3	579,3678	7	-7	11 2 10	566,8019	7	-9
7 6 2	598,5306	-2	-5	11 3 9	575,7471	-2	-7
7 7 1	621,1493	0	-5	11 4 8	587,9428	0	-6
8 0 8	540,5826	3	-10	11 5 7	603,6229	7	-4
8 1 7	543,4248	6	-9	11 6 6	622,7802	6	-5
8 2 6	548,0025	4	-6	11 7 5	645,3977	9	-8
8 3 5	556,5784	-1	-7	11 8 4	671,4587	-1	-7
8 4 4	568,7807	5	-10	11 9 3	700,9457	5	-5
8 5 3	584,4724	-8	-7	11 10 2	733,8398	6	-7
8 6 2	603,6347	7	-7	11 11 1	770,1203	-3	-5
8 7 1	626,2535	-2	-7	12 0 12	566,5719	8	-12
8 8 0	652,3138	0	-6	12 1 11	571,0085	7	-9

* δ — экспериментальная погрешность значения энергии, равная стандартной ошибке.

Таблица 2

Спектроскопические параметры состояния $v_2 = 1$

Параметр	Основное состояние*	$v_2, \text{см}^{-1}$	Параметр	Основное состояние*	$v_2, \text{см}^{-1}$
E	—	517,8725680000(81)	$L_K \cdot 10^{11}$	-0,2608919	0,37214000(91)
A	2,027354204070	2,0665901690(16)	$L_{KKJ} \cdot 10^{12}$	0,1807804	0,2487(11)
B	0,344173882136	0,3442513817(24)	$L_{JK} \cdot 10^{13}$	-0,1097261	-0,1774(22)
C	0,293526503766	0,2929979019(26)	$L_{JJK} \cdot 10^{16}$	-0,0995080	0,1880(42)
$\Delta_K \cdot 10^4$	0,864015421000	0,9581020000(23)	$L_J \cdot 10^{17}$	-0,1103600	-0,1411(40)
$\Delta_{JK} \cdot 10^5$	-0,390123832000	-0,4071319000(20)	$l_K \cdot 10^{12}$	-0,3191920	-0,5219(58)
$\Delta_J \cdot 10^6$	0,220539487000	0,2210274000(16)	$l_{KJ} \cdot 10^{14}$	0,2544160	0,5860(22)
$\delta_K \cdot 10^5$	0,084629150900	0,1035275000(29)	$l_{JK} \cdot 10^{16}$	—	-0,3310(32)
$\delta_J \cdot 10^7$	0,567423257000	0,5707332000(32)	$l_J \cdot 10^{18}$	-0,6075680	-0,4980(13)
$H_K \cdot 10^7$	0,123604280000	0,1532990000(19)	$P_K \cdot 10^{14}$	0,0584163	0,1075(22)
$H_{KJ} \cdot 10^9$	-0,649606850000	-0,7571300000(21)	$P_{KKJ} \cdot 10^{16}$	-0,4087130	-0,9460(38)
$H_{JK} \cdot 10^{11}$	0,116031100000	0,4402000000(14)	$P_{KJ} \cdot 10^{17}$	-0,0623763	0,8300(12)
$H_J \cdot 10^{12}$	0,374617000000	0,3770400000(42)	$P_{JK} \cdot 10^{18}$	0,6493690	0,1100(36)
$h_K \cdot 10^9$	0,567987200000	0,7532100000(60)	$p_K \cdot 10^{15}$	—	0,1870(24)
$h_{JK} \cdot 10^{12}$	-0,243030000000	-0,7020000000(17)	$S_K \cdot 10^{18}$	-0,0885870	-0,2590(20)
$h_J \cdot 10^{12}$	0,183006740000	0,1824800000(11)	$S_{KKJ} \cdot 10^{19}$	0,0815360	-0,2480(25)

* Параметры фиксированы к значениям соответствующих параметров основного состояния из [8].

Исследование выполнено при финансовой поддержке грантов РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00116 мол_а, а также в рамках международного научно-образовательного сотрудничества по программе «Михаил Ломоносов» 3.9960.2017/5.2.

1. *McCormic M.P., Thompson L.W., Trepte C.R.* Atmospheric effects of the Mount Pinatubo eruption // *Nature (Gr. Brit.)*. 1995. V. 373. P. 399–404.
2. *Marcq E., Betraux J.-L., Montmessin F., Belyaev D.* Variations of sulfur dioxide at the cloud top of Venus's dynamic atmosphere // *Nature Geosci.* 2013. V. 6. P. 25–28.
3. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Horneman V.-M., Alanko S., Gromova O.V.* High resolution study of the $3\nu_1$ band of SO_2 // *J. Mol. Spectrosc.* 2009. V. 255, iss. 2. P. 111–121.
4. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Alanko S., Horneman V.-M., Gromova O.V., Leroy C.* On the high resolution spectroscopy and intramolecular potential function of SO_2 // *J. Mol. Spectrosc.* 2009. V. 257, iss. 2. P. 137–156.
5. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Alanko S., Horneman V.-M., Leroy C.* Analysis of highly excited “hot” bands in the SO_2 molecule: $\nu_2 + 3\nu_3 - \nu_2$ and $2\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ // *Mol. Phys.* 2010. V. 108. P. 1253–1261.
6. *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Bolotova I.B., Leroy C., Horneman V.-M., Alanko S.* High resolution study of the $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$ and $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ “hot” bands and ro-vibrational re-analysis of the $\nu_1 + \nu_2/\nu_2 + \nu_3/3\nu_2$ polyad of the $^{32}\text{SO}_2$ molecule // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 2011. V. 112. P. 486–512.
7. *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 SO_2 spectrum in the 2600–2900 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.
8. *Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Horneman V.-M.* Re-analysis of the (100), (001), and (020) rotational structure of SO_2 on the basis of high resolution FTIR spectra // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2013. V. 130. P. 220–232.
9. *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Belova A.S., Bauerecker S., Maul C., Sydow C., Horneman V.-M.* High resolution analysis of the (111) vibrational state of SO_2 // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2014. V. 144. P. 1–10.
10. *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Krivchikova Yu.V., Sklyarova E.A., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S.* High resolution FTIR study of $^{34}\text{S}_{16}\text{O}_2$: The bands $2\nu_3$, $2\nu_1 + \nu_2$, and $2\nu_1 + \nu_2 - \nu_2$ // *J. Mol. Spectrosc.* 2015. V. 318. P. 26–33.
11. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Krivchikova Yu.V., Morzhikova Yu.B., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S.* High resolution analysis of $^{32}\text{S}_{18}\text{O}_2$ spectra: The ν_1 and ν_3 interacting bands // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2015. V. 166. P. 13–22.
12. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Zamotaeva V.A., Kuznetsov S.I., Sydow C., Maul C., Bauerecker S.* First high resolution analysis of the $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ bands of S^{18}O_2 // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2016. V. 179. P. 187–197.
13. *Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Fomchenko A.L., Sydow C., Bauerecker S.* First high resolution analysis of the $3\nu_1$ band of $^{34}\text{S}_{16}\text{O}_2$ // *J. Mol. Spectrosc.* 2016. V. 319. P. 50–54.
14. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Zamotaeva V.A., Sklyarova E.A., Sydow C., Maul C., Bauerecker S.* First high resolution analysis of the $2\nu_1$, $2\nu_3$, and $\nu_1 + \nu_3$ bands of S^{18}O_2 // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2016. V. 185. P. 12–21.
15. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S.* High resolution FTIR study of $^{34}\text{S}_{16}\text{O}_2$: The bands $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2$, and $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2016. V. 169. P. 49–57.
16. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S.* High resolution FTIR study of $^{34}\text{S}_{16}\text{O}_2$: Re-analysis of the bands $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$, and first analysis of the hot band $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ // *J. Mol. Spectrosc.* 2016. V. 319. P. 17–25.
17. *Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Horneman V.-M., Sydow C., Bauerecker S.* High resolution FTIR spectroscopy of sulfur dioxide in the 1550–1950 cm^{-1} region: First analysis of the $\nu_1 + \nu_2/\nu_2 + \nu_3$ bands of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ and experimental line intensities of ro-vibrational transitions in the $\nu_1 + \nu_2/\nu_2 + \nu_3$ bands of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, and $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2017. V. 203. P. 377–91.
18. *Flaud J.M., Perrin A., Salan L.M., Lafferty W.J., Guelachvill G.* A reanalysis of the (010), (020), (100), and (001) rotational levels of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ // *J. Mol. Spectrosc.* 1993. V. 160, iss. 1. P. 272–278.
19. *Muller H.S.P., Brunken S.* Accurate rotational spectroscopy of sulfur dioxide, SO_2 , in its ground vibrational and first excited bending states, $\nu_2 = 0, 1$, up to 2 THz // *J. Mol. Spectrosc.* 2005. V. 232, iss. 2. P. 213–222.
20. *Ulenikov O.N., Malikova A.B., Li H.-F., Qian H.-B., Zhu Q.-S., Thrush B.A.* High-resolution spectroscopic study of $2\nu_1$, $2\nu_3$ and $\nu_1 + \nu_3$ stretching states: The local-mode effects of H_2Se // *J. Chem. Soc., Faraday Transfer*. 1995. V. 91, N 1. P. 13–16.
21. *Ulenikov O.N., Liu A.-W., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Hao L.-Y., Hu S.-M.* On the study of high-resolution ro-vibrational spectrum of H_2S in the region of 7300–7900 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 2004. V. 226, iss. 1. P. 57–70.
22. *Liu A.-W., Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Wan L., Hao L.-Y., Hu S.-M., Flaud J.-M.* Global fit of the high-resolution infrared spectrum of D_2S // *J. Mol. Spectrosc.* 2006. V. 238, iss. 1. P. 11–28.
23. *Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Tyabaeva N.E., Alanko S., Koivusaari M., Anttila R.* Precise Study of the lowest vibration-rotational bands ν_5 and ν_3/ν_6 of the CHD_3 molecule // *J. Mol. Spectrosc.* 1997. V. 313, iss. 2. P. 293–313.
24. *Ulenikov O.N., Cheglokov A.E., Shevchenko G.A., Winnewisser M., Winnewisser B.P.* High-resolution Fourier transform spectra of AsH_3 : The vibrational bands $2\nu_2(A_1)$, $\nu_2 + \nu_4(E)$, $\nu_1(A_1)$, and $\nu_3(E)$ // *J. Mol. Spectrosc.* 1993. V. 157, iss. 1. P. 141–160.
25. *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 MGeH_4 ($M = 76, 74$) // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2015. V. 164. P. 161–174.
26. *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 cm^{-1} // J. Chem. Phys. 2014. V. 141. P. 234302-1–234302-33.
27. Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov A.A. High resolution study of the $\nu_5 + \nu_{12}$ band of C_2H_4 // Mol. Phys. 2010. V. 108. P. 637–647.
28. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Maul C., Bauerecker S., Gabona M.G., Tan T.L. High resolution ro-vibrational analysis of interacting bands ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} of $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2015. V. 151. P. 224–238.
29. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Onopenko G.A., Aslapovskaya Yu.S., Gericke K.-H., Bauerecker S., Horneman V.-M. 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 // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2014. V. 149. P. 318–333.
30. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Kashirina N.V., Bauerecker S., Horneman V.-M. Precise ro-vibrational analysis of molecular bands forbidden in absorption: The $\nu_8 + \nu_{10}$ band of the $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ molecule // J. Mol. Spectrosc. 2015. V. 313. P. 4–13.

A.G. Ziatkova, V.A. Zamotaeva, I.A. Konov. **High resolution study of the ν_2 band of sulfur dioxide.**

The ν_2 band is analyzed on the basis of the combination difference method. The high resolution FTIR spectrum of the SO_2 molecule in the region 400–700 cm^{-1} is used for the analysis. More than 4500 lines with the maximum values of the quantum numbers J and K_a equal to 96 and 25, respectively, are interpreted. On this basis, 1294 vibrational-rotational energy levels of the state (010) are determined. As a result of solution of the inverse spectroscopic problem with these levels, 32 effective Hamiltonian parameters are obtained, which allow us to reproduce the initial experimental data with the accuracy $d_{\text{rms}} = 1.9 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$.