

В.И. Стариков, С.И. Михайленко

О НОВЫХ РЕЗОНАНСАХ В МОЛЕКУЛЕ Н₂О

В работе проведен численный анализ зависимости резонансных параметров молекулы Н₂О от колебательного квантового числа V_2 , соответствующего деформационному колебанию большой амплитуды. Сильное изменение обратного тензора инерции μ_{zz} в этом колебании и его ангармоничность приводят к появлению новых типов резонансов, не связанных с обычными условиями близости частот $\omega_1 \approx \omega_3 \approx 2\omega_2$.

Введение

Молекула Н₂О относится к классу нежестких молекул. Среди проблем, возникающих при обработке колебательно-вращательного спектра Н₂О, вызванных эффектами нежесткости, отметим следующие. 1) Ряд центробежных постоянных (ЦП) эффективного вращательного гамильтониана H_{rot} , используемого в обработке, аномально сильно зависят от квантового числа V_2 , связанного с деформационным (изгибным) колебанием. 2) Степенное представление H_{rot} расходится по оператору углового момента J_z^2 (z – ось линейризации молекулы). Теоретическое объяснение аномально сильной зависимости ряда ЦП от V_2 дано в [1–3], вторая проблема обсуждается в [4–6] и в цитируемой там литературе. Полиады резонирующих колебательных состояний в молекуле Н₂О формируются по правилу $2V_1+2V_3+V_2 = p = 0, 1, 2, \dots$, следующему из выполнения соотношения

$$\omega_1 \approx \omega_3 \approx 2\omega_2 . \quad (1)$$

Резонансное взаимодействие уровней из различных полиад было отмечено в [7–8], а в [9] была проведена конкретная обработка первой декады Н₂О ($p = 6$) с учетом взаимодействия с колебательным состоянием (070), формально, с точки зрения (1) к этой декаде не относящимся.

Авторы [9] назвали этот резонанс *HEL*–резонансом и объяснили его сильным центробежным искажением, связанным с возбуждением квантового числа V_2 .

В настоящей статье представлены результаты расчета колебательной (от V_2) зависимости различных резонансных параметров (Ферми, Кориолиса и др.) для молекулы Н₂О и показано существование различных резонансов, не связанных с условием (1) и обусловленных главным образом ангармоничностью потенциальной функции молекулы, а также сильной зависимостью обратного тензора инерции от координаты изгибного колебания ρ .

Модель силового поля

Проводимые в статье вычисления основаны на модели нежесткой молекулы [10]. Техника расчета спектроскопических параметров в этой модели изложена в [1, 3] (в модели полужесткой молекулы формулы для резонансных параметров можно найти в [11–13]). При численных расчетах используются ангармоничные волновые функции $\psi_n(\rho)$ ($n \equiv V_2$), полученные путем численного интегрирования уравнения Шредингера [10, 14]:

$$H_0^b \psi_n(\rho) = \left\{ -B_\rho(\rho) \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \left[\frac{\partial}{\partial \rho} B_\rho(\rho) \right] \frac{\partial}{\partial \rho} + U_0(\rho) + V_0(\rho) \right\} \psi_n(\rho) = E_n \psi_n(\rho) , \quad (2)$$

с заданной потенциальной функцией $V_0(\rho)$. Гамильтониан H_0^b (совместно с гамильтонианом $H_0^{Sm \cdot V}$ описывающим гармонические колебания малой амплитуды) является нулевым приближением к гамильтониану $H = H_0 + W$ при преобразовании последнего к эффективному гамильтониану для полиады резонирующих колебательных состояний. H_0 и возмущение W получаются из H посредством разложения обратного тензора инерции

$$\frac{1}{2} \mu_{\alpha\beta}(\rho, q_i) = B_\alpha(\rho) \delta_{\alpha\beta} + \sum_i B_i^{\alpha\beta}(\rho) q_i + \sum_{ij} B_{ij}^{\alpha\beta}(\rho) q_i q_j + \dots = \{\mu_0\} + \{\mu_1\} + \{\mu_2\} + \dots , \quad (3)$$

где

$$B_{ij}^{\alpha\beta} = 3/8 \sum_{\gamma} (B_i^{\alpha\gamma} B_j^{\beta\gamma} + B_i^{\beta\gamma} B_j^{\alpha\gamma}) / B_{\gamma}, \quad i, j = 1, 3; \alpha, \beta, \gamma = x, y, z, \rho,$$

и потенциальной функции

$$V(\rho, q_i) = V_0(\rho) + \sum_i K_i(\rho) q_i + \sum_{i,j} K_{ij}(\rho) q_i q_j + \sum_{ijl} K_{ijl}(\rho) q_i q_j q_l + \dots = \{V_0\} + \{V_1\} + \{V_2\} + \{V_3\} + \dots \quad (4)$$

в ряды по координатам q_i , описывающим колебания малой амплитуды. Для функции $V_0(\rho)$ в данной статье выбрано 2 представления:

$$V_0(\rho) = f_{\alpha\alpha} \rho^2 + H(1 + f_{\alpha\alpha} \rho_e^2 / H)^2 / (1 + H \rho^2 / f_{\alpha\alpha} \rho_e^4) \quad (5)$$

и

$$V_0(\rho) = f_{\alpha\alpha} \rho^2 + f_{\alpha\alpha\alpha} \rho^3 + f_{\alpha\alpha\alpha\alpha} \rho^4. \quad (6)$$

Вычисленные из (2) колебательные уровни энергии с этими потенциалами приведены в табл. 1.

Таблица 1

Экспериментальные [10, 15] и вычисленные из (2) значения частот колебательных полос H_2O (в см^{-1})*

Полоса	Эксперимент	(5)	(6)	Полоса	(5)	(6)
ν_2	1594,8	1594,8	1593,7	5 ν_2	7526,6	7536,6
2 ν_2	3151,5	3153,1	3151,3	6 ν_2	8828,4	8859,6
3 ν_2	4666,3	4668,4	4667,4	7 ν_2	10032,4	10124,4
4 ν_2	6134,0	6131,4	6134,6	—	—	—

*Для потенциала $V_0(\rho)$ (5) использовались параметры $H = 10960,978 \text{ см}^{-1}$; $F_{\alpha\alpha} = 12857,902 \text{ см}^{-1}$; $\rho_e = 1,82083 \text{ рад}$. Для потенциала $V_0(\rho)$ (6) — параметры $F_{\alpha\alpha} = 16855,74 \text{ см}^{-1}$; $F_{\alpha\alpha\alpha} = -7522,05 \text{ см}^{-1}$; $F_{\alpha\alpha\alpha\alpha} = 273,85 \text{ см}^{-1}$.

Для функций $F_j(\rho)$, определяющих функцию

$$K_1(\rho) = (2\pi c)^{-1} (hc\omega_1(\rho))^{-1/2} \sum_j F_j(\rho) L_j^i(\rho) \quad (7)$$

($L_j^i(\rho)$ — линейный коэффициент перехода от естественных координат к нормальным), использовалось также 2 представления, одно из которых приведено в [14, 16], а второе

$$F_j(\rho)/hc = \sum_{i=1}^4 f_j^i (\cos \rho_e - \cos \rho)^i \quad (8)$$

приведено в [17]. Функции $K_{ij}(\rho)$, $K_{ijl}(\rho)$, ... рассчитывались по схеме из [14, 16]. Вид функции $B_{\alpha}(\rho)$, $B_i^{\alpha\beta}(\rho)$, ... из кинетической части гамильтониана можно найти в [1, 3]. Рассмотрим теперь зависимость конкретных резонансных параметров от квантового числа $n \equiv V_2$, используя для них обычную терминологию [11–13].

Резонанс Кориолиса 1-го типа

Он возникает вследствие условия $\omega_1 \approx \omega_3$ и для каждого значения квантового числа $n \equiv V_2$ описывается оператором

$$F_{13}(n) = \{F_{13}^x(n) (iJ_x) + F_{13}^{yz}(n)(J_y J_z + J_z J_y) + \dots\} |n\rangle \langle n| a_1^\dagger a_3 + \text{э. с.}, \quad (9)$$

в котором э. с. обозначает эрмитовое сопряжение,

$$F_{13}^x(n) = \langle n| B_x \zeta_{13}^x |nc(\omega_1 + \omega_3)(\omega_1 \omega_3)^{-1/2}; \quad (10)$$

$$F_{13}^{yz}(n) = B_{13}^{yz}(n) - \frac{3}{2} K_{133}(n) B_3^{yz}(n) \left\{ \frac{\omega_3}{\omega_1(2\omega_3 - \omega_1)} + \frac{1}{\omega_3} \right\}, \quad (10a)$$

а a_i^\dagger , a_i ($i, j = 1, 3$) — операторы рождения и уничтожения колебательных квантов [5], соответствующих колебаниям малой амплитуды. В формулах (10) приняты следующие обозначения: $f(n) = f(nm)$, $f(nm) = \langle n|f(\rho)|m\rangle$, $\omega_i = K_{ii}(\rho_e)$. Вынося из под интегралов значения функций $B_x(\rho)$, $\zeta_{13}^x(\rho)$, ... в точке ρ_e , получим те же, что и в модели полужесткой молекулы, выражения для этих резонансных параметров, не зависящих от V_2 [11–13]. Проведенные с различными силовыми полями расчеты $F_{13}^x(n)$ и $F_{13}^{yz}(n)$ показывают, что они могут в действительности сильно зависеть от V_2 . Типичное рассчитанное поведение этих параметров представлено на рис. 1 (вклады от редукции эффективного гамильтониана [19] в резонансные параметры в настоящей статье не учитываются). Звездочками обозначены значения параметров, полученных при обработке экспериментальных данных (смена знака у параметров в операторах для резонансов Кориолиса не влияет на восстановление последних) [20, 21].

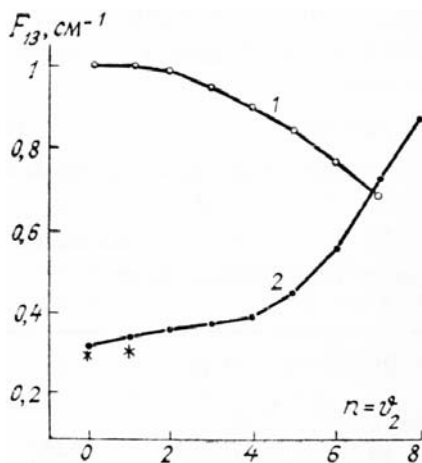


Рис. 1. Вычисленная зависимость параметров $F_{13}^x(n)$ (кривая 1) и $F_{13}^{yz}(n)$ (кривая 2) резонанса Кориолиса 1-го типа. Использовалась $V_0(\rho)$ из (5) и силовое поле из [18]

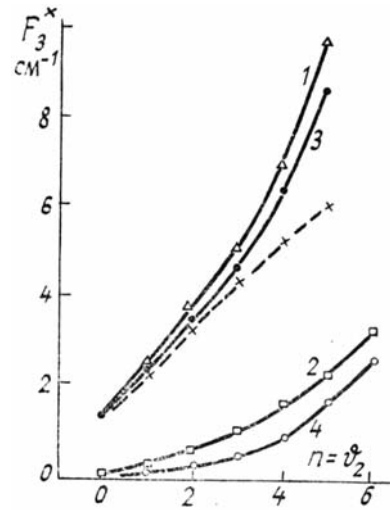


Рис. 2. Вычисленная зависимость параметров $F_3^x(n, n+2)$ (кривая 1) и $F_3^x(n, n+3)$ (кривая 2) резонанса Кориолиса 2-го типа. Использовалось силовое поле из [18] и $V_0(\rho)$ из (5). Штриховой линией представлены вычисления в модели полужесткой молекулы: $F_3^x(V_2, V_2+2) = \text{const} \cdot \sqrt{(V_2+1)(V_2+2)}$ (кривые 3, 4) — вычисления с силовым полем из [17]

Резонансы Кориолиса 2-го типа

В модели полужесткой молекулы они возникают вследствие условия $\omega_3 \approx 2\omega_2$. В модели нежесткой молекулы описываются оператором

$$F_3(n, m) = \{F_3^x(n, m) (iJ_x) + F_3^{yz}(n, m)(J_y J_z + J_z J_y) + \dots\} |n\rangle \langle m| a_3^\dagger + \text{э. с.}, \quad (11)$$

который позволяет описать все возможные резонансы, возникающие вследствие условия $\omega_3 + \Omega_{n0} \approx \Omega_{m0}$ ($\Omega_{mn} = E_m - E_n$). Очевидно, что условие $\omega_3 \approx 2\omega_2$ является частным случаем этого условия при $m = n+2$. Из формулы (11) были рассчитаны значения 1-го резонансного параметра

$$F_3^x(n, m) = -\sqrt{2} \left\{ T_3^x(nm) + \frac{1}{2} \sum_s^* K_{33}(ns) T_3^x(sm) [(\Omega_{sm} + \omega_3)^{-1} + \Omega_{sn}^{-1}] \right\} \quad (12)$$

в котором $T_3^x(nm) = \langle \Psi_n(\rho) | B_3^x(\rho) | \partial \Psi_m(\rho) / \partial \rho \rangle$, а звездочка у Σ означает, что в сумме не должны присутствовать слагаемые с резонансными знаменателями. На рис. 2 представлено рассчитанное поведение параметров $F_3^x(n, n+2)$ и $F_3^x(n, n+3)$.

Из рисунка видно, что при некоторых значениях n и p $|F_3^x(n, n+2)| \sim |F_3^x(p, p+3)|$ и, более того, при некоторых n

$$\kappa_c(n, n+2) \sim \kappa_c(n, n+3); \quad \kappa_c(n, m) = |F_3^x(n, m)| / [(\omega_3 + \Omega_{n0}) - \Omega_{m0}] = |F_3^x(n, m)| / (\omega_3 - \Omega_{mm}).$$

Это означает, что два колебательных состояния $(kn1)$ и $(km0)$ ($m = n+2, n+3, k$ — произвольное) должны быть объединены в одну полиаду. В наших расчетах такая ситуация проявляется с $n = 2$ и, в частности, состояние (021) должно рассматриваться совместно с (040) и (050) . Из формулы (12) видно, что такие резонансы описываются вкладами как из кинетической (T_3^x), так и из потенциальной частей гамильтониана.

Резонанс Дарлинга—Деннисона

Он возникает вследствие условия $2\omega_1 \approx 2\omega_3$ и описывается оператором

$$F_{13}^D(n) = F_{13}^0(n) a_1^+ a_1^+ a_3^- a_3^- + \text{э. с.}, \quad (13)$$

в котором

$$F_{13}^{(0)}(n) = \frac{1}{2} \left\{ 3K_{1133}(n) - \frac{3K_{133}^2(n)}{\omega_1} + \frac{3}{2} \frac{K_{111}(n)K_{133}(n)}{\omega_1} - \frac{1}{8} \sum_s^* \frac{K_{11}(ns)K_{33}(sn)}{\Omega_{sn}} \right\}. \quad (14)$$

В проведенных расчетах $F_{13}^{(0)}(n)$, так же как и в модели полужесткой молекулы, практически не зависит от n .

Резонанс Ферми

В модели полужесткой молекулы этот резонанс возникает вследствие условия $\omega_1 \approx 2\omega_2$. В общем случае описывается оператором

$$F_1(n, m) = \left\{ F_1^{(0)}(n, m) + \sum_{\alpha=xyz} F_{1\alpha}(n, m) J_\alpha^2 + \dots \right\} |n\rangle \langle m| a_1^+ + \text{э. с.} \quad (15)$$

Случай $\omega_1 \approx 2\omega_2$ возникает при $m = n+2$. В формуле (15)

$$F_1^{(0)}(n, m) = \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{K}_1(nm) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ K_1(nm) - \langle \Psi_n | B_1^{\text{pp}}(\rho) | \frac{\partial^2 \Psi_m}{\partial \rho^2} \rangle \right\}. \quad (16)$$

Выражение для $F_{1\alpha}$ символически можно записать в виде

$$\{F_{1\alpha}\} = \{\mu_1\} + \{\mu_0 \times V_1\} + \{\mu_1 \times V_2\} + \{\mu_2 \times V_1\} + \{T(\text{cor}) \times \mu_1^{\rho}\} + \{\mu_1^{\rho} \times \mu_1^{\rho}\} + \{V_1 \times \mu_1 \times V_3\} + \\ + \{V_1 \times V_1 \times \mu_1\} + \{V_2 \times \mu_0 \times V_1\} + \{T(\text{cor}) \times V_2 \times \mu_1^{\rho}\} + \{\mu_1^{\rho} \times \mu_1^{\rho}\} \times \{V_1 + V_3\} + \{T(\text{cor}) \times T(\text{cor}) \times V_1\}, \quad (17)$$

в котором μ_i^{ρ} означает, что один из индексов α, β в $\{\mu_i\}$ принимает значение ρ , а $T(\text{cor})$ — слагаемое из W , содержащее постоянную Кориолиса [11]. Из всех параметров $F_{1\alpha}$ ($\alpha = x, y, z$) наибольший по величине и наиболее чувствительный к изменению квантового числа V_2 является параметр F_{1z} . Численные расчеты показывают, что для определения F_{1z} из (17) нужно удерживать только первых два слагаемых, тогда

$$F_{1z}(n, m) = F_{1z}^{(nm)}(\text{cent}) + F_{1z}^{(nm)}(\tilde{a}), \quad (18)$$

$$\text{где } F_{1z}^{(nm)}(\text{cent}) = \frac{1}{\sqrt{2}} B_1^{zz}(nm);$$

$$F_{1z}^{(nm)}(\tilde{a}) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_s^* \{B_z(ns) \tilde{K}_1(sm) [(\Omega_{ns} + \omega_1)^{-1} - \Omega_{sm}^{-1}]\}. \quad (19)$$

На рис. 3 и 4 представлено вычисленное поведение некоторых из параметров $F_1^{(0)}(n, m)$ и $F_{1k}(n, m) = F_{1z}(n, m) - (F_{1x}(n, m) + F_{1y}(n, m)) / 2$.

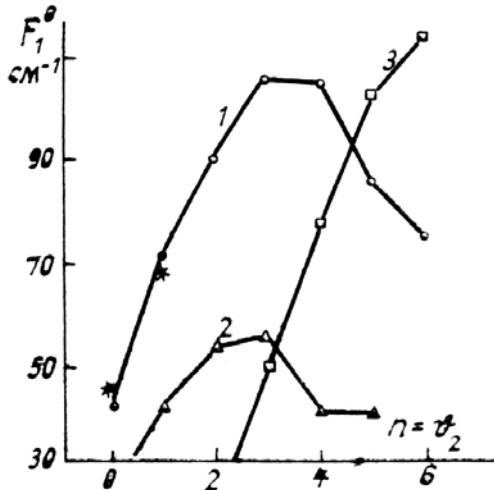


Рис. 3. Вычисленные значения параметров $F_1^{(0)}(n, n+2)$ (кривая 1) — расчёт с силовым полем из [18], (кривая 2) — расчёт с силовым полем из [17] и $F_1^{(0)}(n, n+3)$ (кривая 3), силовое поле из [18] для резонанса Ферми. Звёздочками обозначены экспериментальные данные из [20, 21]

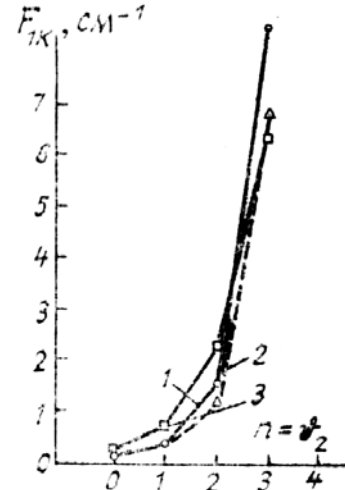


Рис. 4. Вычисленная зависимость параметров $F_{1k}(n, n+2)$ (кривая 1) — расчёт с силовым полем [18], (кривая 2) — расчёт с силовым полем [17] и $F_{1k}(n, n+3)$ (кривая 3) — силовое поле из [18] от квантового числа $n = \nu_2$ для резонанса Ферми

Оценка величины $\kappa_F(n, m) = |F_{1k}(n, m)| / (\omega_1 - \Omega_{nm})$ показывает, что ряд состояний с $\nu_1 + n\nu_2$ и $m\nu_2$ с $m = n + 2$, $n = 3$ и даже с $m = n + 4$ для высоких n должны быть объединены в одну полиаду (в частности, состояние (139) должно рассматриваться совместно с (050) и (060), (140) — совместно с (060), (070) и т. д.). В табл. 2 представлены численные значения двух вкладов из (18) в параметр F_{1z} .

Таблица 2

**Численные значения вкладов (18)
в параметры F_{1z} (нм) резонанса Ферми (в см^{-1}) ***

n	m	$F_{1z}(\text{cent}) \cdot 10$	$F_{1z}(\tilde{a}) \cdot 10$	$F_{1z} \cdot 10$
0	2	-1,9	2,5	0,6
1	3	-4,0	7,0	3,0
1	4	-1,3	7,8	6,5
2	5	-3,0	21,0	18,0

* Использовалась $V_0(\rho)$ (5) и силовое поле из [18].

Из таблицы видно, что эти вклады для малых n приблизительно равны и имеют противоположные знаки. При больших n доминирующим становится вклад от $F_{1z}(\tilde{a})$. Интересно отметить следующее. Если в качестве нулевого приближения H_0 взять гамильтониан $H_0 = H_0 + \tilde{B}_z(\rho) J_z^2$ [4], то F_{1k} будет описываться вкладом $F_{1k}(\text{cent})$. Вычисленные при этом значения $F_{1k}(0,2)$ и $F_{1k}(1,3)$ приближенно совпадают с экспериментальными значениями F_{1k} [17, 18].

Резонанс Ферми 4-го порядка

В модели полужесткой молекулы он возникает вследствие условия $2\omega_1 \approx 4\omega_2$. В модели нежесткой молекулы описывается оператором

$$F_{11}(n, m) = \{F_{11}^{(0)}(n, m) + \sum_{\alpha=xyz} F_{11\alpha}(n, m) J_{\alpha}^2 + \dots\} |n\rangle \langle m| a_1^+ a_1^+ + \text{э. с.}, \quad (20)$$

в котором

$$F_{11}^{(0)}(n, m) = \frac{1}{4} K_{11}(n, m), \quad (21)$$

а $F_{11\alpha}$ может быть представлено суммой 3-х слагаемых:

$$\{F_{11\alpha}\} = \{\mu_2\} + \{\mu_0 \times V_2\} + \{\mu_1 \times V_1\} = \{F_{11\alpha}(\text{cent})\} + \{F_{11\alpha}(h)\} + \{F_{11\alpha}(\tilde{a})\}. \quad (22)$$

Конкретный вид этих слагаемых следующий:

$$F_{11\alpha}^{(nm)}(\text{cent}) = 3/8 B_{11}^{\alpha\alpha}(nm); \quad (23)$$

$$F_{11\alpha}^{(nm)}(h) = -1/8 \sum_s^* \{B_{\alpha}(ns) K_{11}(sm) + K_{11}(ns) B_{\alpha}(sm)\} (\Omega_{sn}^{-1} + \Omega_{sm}^{-1}); \quad (23a)$$

$$F_{11\alpha}^{(nm)}(\tilde{a}) = -1/4 \sum_s^* \{\tilde{K}_1(ns) B_1^{\alpha\alpha}(sm) + B_1^{\alpha\alpha}(ns) \tilde{K}_1(sm)\} [(\Omega_{sn} - \omega_1)^{-1} + (\Omega_{sm} + \omega_1)^{-1}]. \quad (23b)$$

В табл. 3 выписаны все вклады в параметр $F_{11z}(n, n+5)$ для $n = 0, 1, 2$ и для сравнения в $F_{11z}(1,7)$. Графическая зависимость параметров $F_{11k}(n, m)$ для разных n и m подобна зависимости параметров $F_{1k}(n, m)$, представленных на рис. 4. Эти результаты получены с функциями $V_0(\rho)$ (6) и $K_1(\rho)$ (7). Оценка $\kappa_{FF}(n, m) = |F_{11k}(nm)| / (2\omega_1 - \Omega_{mm})$ показывает, что состояние $2\nu_1 + n\nu_2$ (и произвольным ν_3) должно быть объединено в одну полиаду с состоянием $m\nu_2$, начиная с $n = 1$ и $m = n+4, n+5$ и в некоторых случаях с $m = n+6$. Новый резонанс, описанный в [9], появляется в рассматриваемом случае при $n = 2$ и $m = n+5$. Табл. 3 показывает, что доминирующими вкладками в параметр $F_{11z}(n, n+5)$ являются вклады от слагаемых $F_{11z}(h)$ и $F_{11z}(\tilde{a})$, связанных с ангармоничностью потенциальной функции $V(\rho, q)$ (4) и с разложением μ_{zz} (3).

Таблица 3

Численные значения вкладов (22) в параметр F_{11z} (нм)
резонанса Ферми четвертого порядка (в см^{-1}) *

n	m	$F_{11z}(\text{cent})$	$F_{11z}(h)$	$F_{11z}(\tilde{a})$	F_{11z}
0	5	4.7E-4	4.7E-4	-1.5E-2	-1.4E-2
1	6	2.5E-3	4.1E-3	-1.1E-1	-1.0E-1
2	7	1.3E-2	2.9E-2	-8.8E-1	-8.4E-1
1	7	7.8E-3	4.2E-3	7.0E-2	7.6E-2

* Использовалась $V_0(\rho)$ из (6) и силовое поле из [18].

Заключение

Проведенные расчеты показывают, что эффекты нежесткости в молекуле H_2O нарушают правила формирования полиад резонирующих колебательных состояний, основанных на соотношении (1). Так, n -кратное возбуждение квантового числа V_2 ($n \geq 1$) делает невозможным строгое отделение одной такой полиады от другой в силу резонансного взаимодействия состояния (V_1, nV_2, V_3) с состоянием (V_1, mV_2, V_3) с $m \neq n+2$. Матричные элементы, связывающие эти состояния, так же как и для обычных резонансов Ферми и Кориолиса, формируются как слагаемыми из кинетической части гамильтониана, так и слагаемыми из разложения потенциальной функции молекулы, причем с возрастанием квантового числа V_2 значения этих матричных элементов резко возрастают.

В заключение авторы благодарят О.В. Науменко и Вл.Г. Тютерева за полезные обсуждения работы.

1. Стариков В.И., Маханчев Б.Н., Тютерев Вл.Г. //Спектроскопия атмосферных газов. Новосибирск: Наука, 1982. С. 34–54.
2. Starikov V.I., Machancheev B.N., Tyuterev V.I.G. //J. Phys. Lett. 1984. V. 45. L–11–L–15.
3. Starikov V.I., Tyuterev V.I.G. //J. Mol. Spectr. 1982. V. 95. P. 288–296.
4. Тютерев Вл.Г., Стариков В.И., Толмачев В.И. //ДАН СССР. 1987. Т. 297. С. 345–349.
5. Макушкин Ю.С., Тютерев Вл.Г. //Методы возмущений и эффективные гамильтонианы в молекулярной спектроскопии. Новосибирск: Наука, 1984. 214 с.
6. Polynsky O.L. //J. Mol. Spectr. 1985. V. 112. P. 79–87.
7. Flaud J.M., Camy-Peyret C., Rao K.N. et al. //J. Mol. Spectr. 1979. V. 75. P. 339.
8. Mandin J.Y., Chevillard J.P., Flaud J.M., Сашу-Рейрет С. //Can. J. Phys. 1988. V. 66. P. 997–1011.
9. Быков А.Д., Науменко О.В., Сеница Л.Н. //Оптика атмосферы. 1990. Т. 3. № 10. С. 1115–1119.
10. Hougen J.T., Bunker P.R., Johns J.W.G. //J. Mol. Spectr. 1970. V. 34. P. 136–172.
11. Перевалов В.И., Тютерев Вл.Г. //Оптика и спектроскопия. 1981. Т. 51. С. 640–647.
12. Перевалов В.И., Тютерев Вл.Г. //Центробежное искажение в молекулах типа асимметричного волчка при наличии случайных резонансов. Томск, 1979, 65 с. (Препринт/ИОА, № 30).
13. Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Улеников О.Н. //Колбательно-вращательная спектроскопия водяного пара. Новосибирск: Наука, 1989. 296 с.
14. Hou A.R., Bunker P.R. //J. Mol. Spectr. 1974. V. 52. P. 439–456.
15. Camy-Peyret C., Flaud J.M., Maillard J.P. //J. Phys. Lett. 1980. V. 41. L–23–L–26.
16. Jensen P., Bunker P.R. //J. Mol. Spectr. 1983. V. 99. P. 348–356.
17. Jensen P. //J. Mol. Spectr. 1989. V. 133. P. 438–460.
18. Hou A.R., Mills I.M., Strey G. //Mol. Phys. 1972. V. 24. P. 1265–1290.
19. Перевалов В.И., Тютерев Вл.Г. //Оптика и спектроскопия. 1982. Т. 52. С. 644–650.
20. Flaud J.M., Camy-Peyret C. //J. Mol. Spectr. 1974. V. 51. P. 142–150.
21. Camy-Peyret C., Flaud J.M. //J. Mol. Spectr. 1976. V. 59. P. 327–332.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,
Томск

Поступила в редакцию
26 февраля 1991 г.

V.I. Starikov, S.N. Mikhailenko. **New Resonances In the H₂O Molecules.**

The dependence of resonances parameters of the H₂O molecule on the bending quantum number V_2 is analyzed. Strong change of the inverse inertia tensor μ_{zz} due to this vibration and anharmonicity of this motion leads to new types of resonances which do not obey ordinary rule connected with the proximity of frequencies $\omega_1 \approx \omega_3 \approx 2\omega_2$.