**Анализ экспериментальных и вариационных энергий колебательно-вращательных состояний второй полиады D216O методом эффективных колебательно-вращательных гамильтонианов уотсоновского типа**

***Добролюбов Е.О.1, Мануйлов В.М.2, Краснощеков С.В.1***

*Аспирант, 2 год обучения*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*2Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*механико-математический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: dobroljubov@phys.chem.msu.ru*

Анализ и интерпретация инфракрасных (ИК) спектров поглощения изотопических модификаций воды актуальны в связи с ведущимися исследованиями состояния атмосферы Земли и изучения экзопланет. Стандартным инструментом анализа колебательно-вращательных спектров высокого разрешения является метод эффективных гамильтонианов (ЭГ) уотсоновского типа, которые способны описывать как изолированные колебательные состояния, так и группы (полиады) взаимодействующих состояний путём добавления соответствующих резонансных операторов. Среди основных преимуществ ЭГ необходимо выделить значительное сокращение числа параметров, определяющих энергии колебательно-вращательных состояний и вклады в их волновые функции по сравнению с выраженным в нормальных координатах полным колебательно-вращательным гамильтонианом Уотсона. Другой положительной особенностью ЭГ по сравнению с глобальными вариационными методами является корректность процедуры отнесения квантовых чисел.

Однако, проявление сильных эффектов нежёсткости оказывается критическим для высоко возбуждённых колебательно-вращательных состояний и требует включения в эффективную модель параметров резонансного взаимодействия и центробежного искажения высоких порядков, которые часто оказываются сильно скоррелированными или неустойчивыми к набору экспериментальных энергий, использованных при подгонке. В этом случае часть параметров может быть определена неэмпирически и зафиксирована.

Последнее исследование методом ЭГ второй полиады изотополога D216O было выполнено в 1981 году [1]. С тех пор были опубликованы новые экспериментальные данные [2], а также вариационные списки линий [3], основанные на высокоточной полуэмпирической поверхности потенциальной энергии. В данной работе новые литературные данные были проанализированы при помощи метода ЭГ. Полученные в рамках колебательно-вращательной теории возмущений Ван-Флека неэмпирические значения эффективных параметров были второй полиады D216O, включая параметры резонансных взаимодействий, были уточнены с помощью расширенного набора новых экспериментальных данных.

**Литература**

1. N. Papineau, J.-M. Flaud, C. Camy-Peyret. The 2n2, n1 and n3 Bands of D216O. The Ground State (000) and the Triad of Interacting States {(020), (100), (001)} // Journal of Molecular Spectroscopy, Vol. 87, p. 219–232, 1981.
2. S.N. Mikhailenko, G.Ch. Mellau, E.N. Starikova, S.A. Tashkun, Vl.G. Tyuterev. Analysis of the first triad of interacting state (020), (100), and (001) of D216O from hot emission spectra // Journal of Molecular Spectroscopy, Vol. 233, p. 32–59, 2005.
3. S.V. Shirin, N.F. Zobov, O.L. Polyansky. Theoretical line list of D216O up to 16,000 cm-1 with an accuracy close to experimental // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 109, p. 549–558, 2008.