

**АНАЛИЗ СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ЗАПРЕЩЕННОЙ ПОЛОСЫ V_8+V_{10}
МОЛЕКУЛЫ $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$**

Н.В. Каширина

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. О.Н. Уленев
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: nvk2@tpu.ru

**ANALYSIS OF HIGH-RESOLUTION SPECTRA OF FORBIDDEN BAND V_8+V_{10} OF THE $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$
MOLECULE**

N.V. Kashirina

Scientific Supervisor: Prof., O.N. Ulenikov
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: nvk2@tpu.ru

***Annotation.** High accurate, $(1-2)\times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, ro-vibrational spectra of the $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ molecule in the region of 1650 - 1800 cm^{-1} were recorded for the first time with Fourier transform interferometers Bruker IFS 120/125 HR and analyzed in the Hamiltonian model which takes into account Coriolis resonance interactions between the band $\nu_8 + \nu_{10}$, which is forbidden in absorption, and the bands $\nu_4 + \nu_8$ and $\nu_7 + \nu_8$.*

Идентификация колебательно-вращательного спектра позволяет объяснить происхождение каждой линии в спектре. Положение уровней, в свою очередь, определяется внутренними физическими свойствами молекулы. Т. о. можно определить точные значения межатомных расстояний, частот колебаний, силовых постоянных, энергий диссоциации и других величин, характеризующих структуру многоатомных молекул [1, 2]. Полученная информация из колебательно-вращательных спектров может использоваться как в фундаментальных, так и в прикладных областях науки. Поэтому изучение, и в том числе интерпретация спектров молекулы, является одной из актуальных и исследуемых задач в области спектроскопии [3]. Этилен является одним из объектов, информация о спектрах высокого разрешения которых имеет важное значение для самых разнообразных как чисто академических, так и прикладных задач. В частности, этилен действует как гормон в растениях, и его роль в биохимии, физиологии и экологии является предметом интенсивных исследований. Этилен является естественной структурной единицей атмосферы Земли, которая имеет существенное влияние на атмосферную химию и глобальный климат. Молекула этилена является одним из важных объектов исследования в астрофизике и планетологии, т.к. в значительных количествах он присутствует в атмосферах таких планет как Юпитер, Сатурн, Нептун и Титан [4, 5]. В области физической химии этилен интенсивно исследуется по причине того, что он может являться прототипом большого числа органических молекул.

Поэтому целью данной работы является изучение колебательно-вращательного спектра высокого разрешения для запрещенной полосы $\nu_8+\nu_{10}$ молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$, которая не исследовалась ранее.

Группа симметрии молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ изоморфна группе D_{2h} и имеет 8 неприводимых представлений. Следует отметить, что только 3 из 8 типа полос являются разрешенными в процессе поглощения из основного колебательного состояния – B_{1u} , B_{2u} и B_{3u} . Полосы симметрии A_u могут быть обнаружены только из-за резонансных взаимодействия с полосами типа B_{1u} , B_{2u} и B_{3u} , что существенно осложняет анализ данного состояния. Исследуема в данной работе полоса, как раз является запрещенной и имеет резонанс типа Кориолиса со следующими состояниями: $(\nu_4 = \nu_8 = 1)$ и $(\nu_7 = \nu_8 = 1)$.

Экспериментальные спектры высокого разрешения в области $1550\text{-}2100\text{ см}^{-1}$ (рис. 1) были зарегистрированы на Фурье-спектрометре IFS-120HR в Лаборатории инфракрасного излучения университета Оулу (Финляндия) и Техническом Университете Брауншвейга (Германия). В г. Оулу данные получены при давлении 101,3 Па и эффективной длине поглощения 6,4 м в течение 67,5 часов. В г. Брауншвейг спектры зарегистрированы при давлении 200 Па с эффективной длиной поглощения 8 м в течение 19,9 часов.

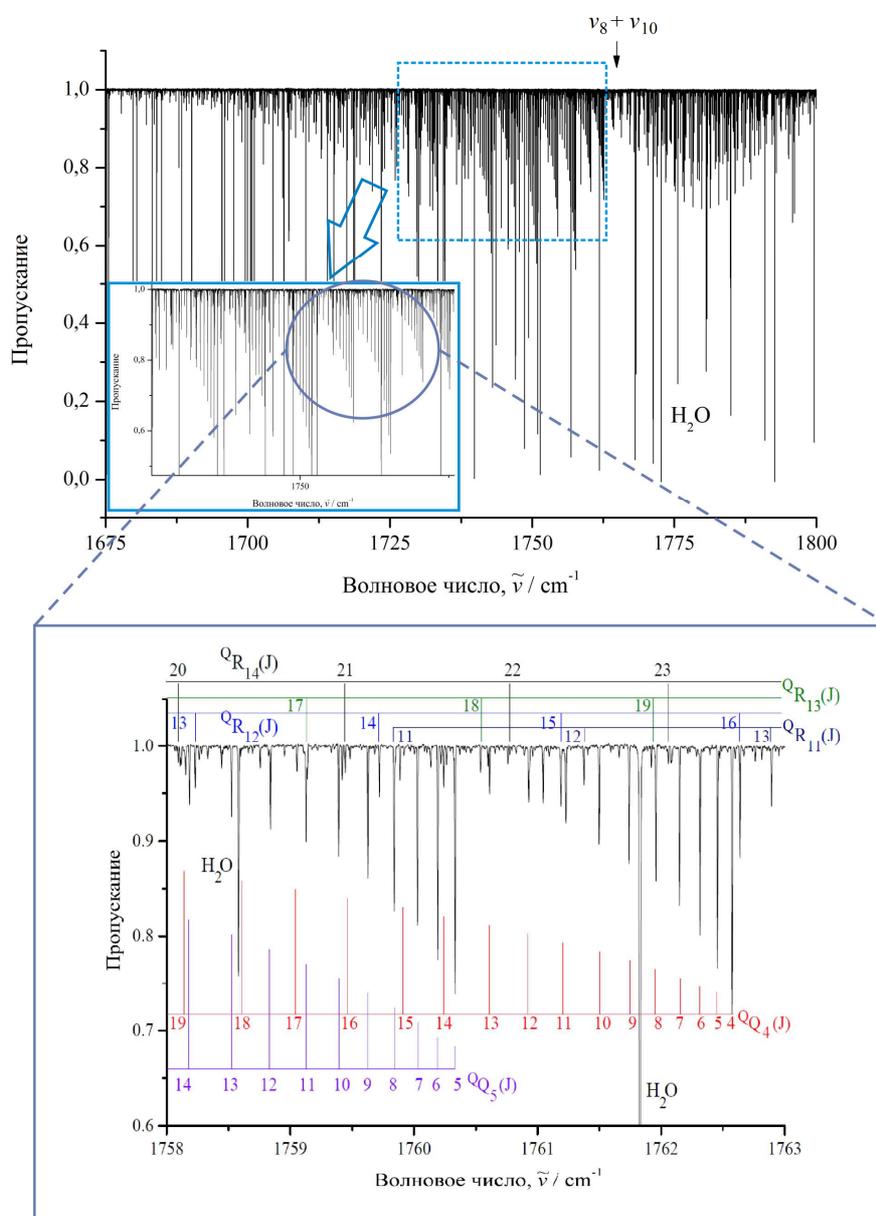


Рис. 1. Небольшая часть спектра высокого разрешения молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ в области поглощения полосы $\nu_8 + \nu_{10}$

Исследуемая полоса $\nu_8+\nu_{10}$ принадлежит к А-типу и имеет следующие правила отбора: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = 0, \pm 2$; $\Delta K_c = 0, \pm 2$. Информация об энергетических уровнях основного колебательного состояния была получена $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ из работы [6].

Максимальное значение квантового числа $J^{\text{макс.}}$ составило 35, а $k_a^{\text{макс.}}$ – 18. Всего было проинтерпретировано около 2300 переходов и определено 600 энергий для возбужденного состояния $\nu_8+\nu_{10}$. Для анализа экспериментальных данных использовалась модель эффективного оператора в наиболее общем виде [7], учитывающая наличие в молекуле различные типы резонансов. В результате решения обратной спектроскопической задачи был получен набор из 38 параметров, который воспроизводит исходные данные с экспериментальной точностью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. - М.: Изд-во иностранной литературы, 1949. - 647 с.
2. Давыдов А. С. Квантовая механика. - М.: Наука, 1975. - 703 с.
3. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул. - М.:Наука, 1970.
4. Betz L., Ethylene in IRC +10216 // *Astrophys. J.* – 1981. – V. 244. – P. L103-L105.
5. Cernicharo J., Heras A.M., Pardo J.R., Tielens A.G.G.M., Guelin M., Dartois E., Neri R., Walters L.B.F.M., Methylpolyynes and small hydrocarbons in CRL 618// *Astrophys. J.* – 2001. – V. 546. – P. L127-L130.
6. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Aslapovskaya Yu.S. and Horneman V.M., High resolution spectroscopic study of C_2H_4 : Re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} vibrational bands // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* – 2013. – V. 118. – P. 14-25.
7. Watson J. K. G., Determination of Centrifugal Distortion Coefficients of Asymmetric Top // *J. Chem. Phys.*, - 1967. - V. 46. - P. 1935.