

АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ
ПОЛОС ν_2 , ν_3 , ν_{12} ИЗОТОПОЛОГА ЭТИЛЕНА $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$

Л.Е. Федотов

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

ETHYLENE $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$ ISOTOPOLOGUE:
HIGH RESOLUTION STUDY of ν_2 , ν_3 , ν_{12} FUNDAMENTALS

L.E. Fedotov

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

***Abstract.** High Resolution Fourier transform infrared spectra of the $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$ molecule were recorded with Doppler limited resolution in the region of 1000 - 2000 cm^{-1} at room temperature. The measurements were carried out under several different absorption conditions using the Bruker 120 HR spectrometer. Fundamental bands ν_2 , ν_3 , ν_{12} were observed and found to be perturbed by different resonance interactions. About 3800 lines were assigned in the recorded spectrum.*

Введение. Колебательно-вращательные спектры молекул являются одним из наиболее полных источников информации о физико-химических свойствах молекул. Параметры спектральных линий содержат информацию о возможных энергетических состояниях молекулы, о ее электрооптических и магнитных характеристиках и многое другое. Следует отметить, что зачастую получить полную информацию о материнской молекуле затруднительно, поскольку в силу высокой симметрии не все характерные и необходимые данные возможно извлечь из анализа спектров. Объектом исследования данной работы является молекула этилена, а именно ее изотополог $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$. Необходимо отметить, что для молекулы этилена, C_2H_4 , в силу симметрии почти половина полос не проявляется в поглощении. Ввиду этого, значительная часть информации о фундаментальных свойствах, связанных с этими состояниями характеристик, является недоступной. В этой связи, чрезвычайно **важным и актуальным** является исследование различных изотопологов, в данном случае, этилена. Имеющееся многообразие дейтеро- и карбоно-замещенных модификаций служит необходимым дополнением и составляет высокоточную базу для определения фундаментальных параметров колебательно-вращательного гамильтониана этилена. Под фундаментальными параметрами гамильтониана молекулы, в данном случае, подразумевается внутримолекулярное силовое поле и параметры структуры. Наряду с решением этой большой обратной спектроскопической задачи, представляющей академический интерес, самостоятельное исследование именно изотопологов этилена имеет и важное практическое значение, поскольку все изучаемые молекулы найдены в атмосферах планет Солнечной системы и в межзвездной среде. Для целей внутреннего развития методов колебательно-вращательной спектроскопии исследование изотопологов служит основой для определения изотопических соотношений между

спектроскопическими и фундаментальными параметрами, что, в свою очередь, важно для целей анализа и предсказания спектроскопических свойств молекул. В частности, в рамках данной работы на основе использования теории изотопозамещения были получены параметры резонансного взаимодействия типа Кориолиса. Необходимо отметить, что проведение анализа и корректное решение обратной спектроскопической задачи невозможно без таких оценок. Учитывая все выше изложенное, **цель данной работы** состояла в проведении анализа спектра колебательно-вращательной полосы ν_2 , ν_3 , ν_{12} , в оценке параметров резонансного взаимодействия на основе результатов теории изотопозамещения и в решении обратной спектроскопической задачи.

Некоторые сведения о молекуле $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$. Анализ спектра высокого разрешения полос ν_2 , ν_3 , ν_{12} . Группа симметрии молекулы $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$ (Рис. 1) изоморфна точечной группе C_{2v} , так как имеет четыре элемента симметрии, данные о которых представлены в таблице 1.

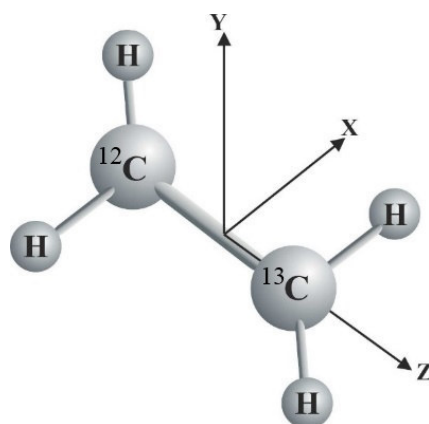


Рис. 1. Молекула $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$

В данной работе исследовались фундаментальные полосы ν_2 , ν_3 , ν_{12} , расположенные в области 1000-2000 см^{-1} . Колебательные координаты Q_2 , Q_3 , и Q_{12} преобразуются при операциях симметрии по неприводимым представлениям A_1 (Таблица 1). Это означает, что симметрия исследуемых состояний – A_1 .

Таблица 1

Преобразование фундаментальных состояний и моментов импульсов, входящих группу C_{2v}

C_s	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	Нормальные колебательные координаты	Операторы момента импульса
A_1	1	1	1	1	$Q_1, Q_2, Q_3, Q_{11}, Q_{12}$	
A_2	1	1	-1	-1	Q_4	J_z, k_{zz}
B_1	1	-1	1	-1	Q_5, Q_6, Q_9, Q_{10}	J_y, k_{zy}
B_2	1	-1	-1	1	Q_7, Q_8	J_x, k_{zx}

Найденные, на основе использования метода комбинационных разностей, переходы (около 3800), подчиняющиеся правилам отбора $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = 0, \pm 2$; $\Delta K_c = \pm 1$, были отнесены к полосам ν_2 , ν_3 , ν_{12} . Максимальные значения квантовых чисел для найденных уровней соответствующих возбужденным состояниям ν_2 , ν_3 , ν_{12} равны $J_{\text{макс.}} = 30/K_a^{\text{макс.}} = 11$; $J_{\text{макс.}} = 22/K_a^{\text{макс.}} = 8$; $J_{\text{макс.}} = 52/K_a^{\text{макс.}} = 18$. Анализ спектра проводился на основе метода комбинационных разностей.

Детали эксперимента. Спектр высокого разрешения был получен на Фурье-спектрометре Bruker 120HR в Техническом Университете Брауншвейга (Германия). При регистрации спектра в

диапазоне 1000-2000 см^{-1} использовался изотопически чистый образец $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$, при комнатной температуре.

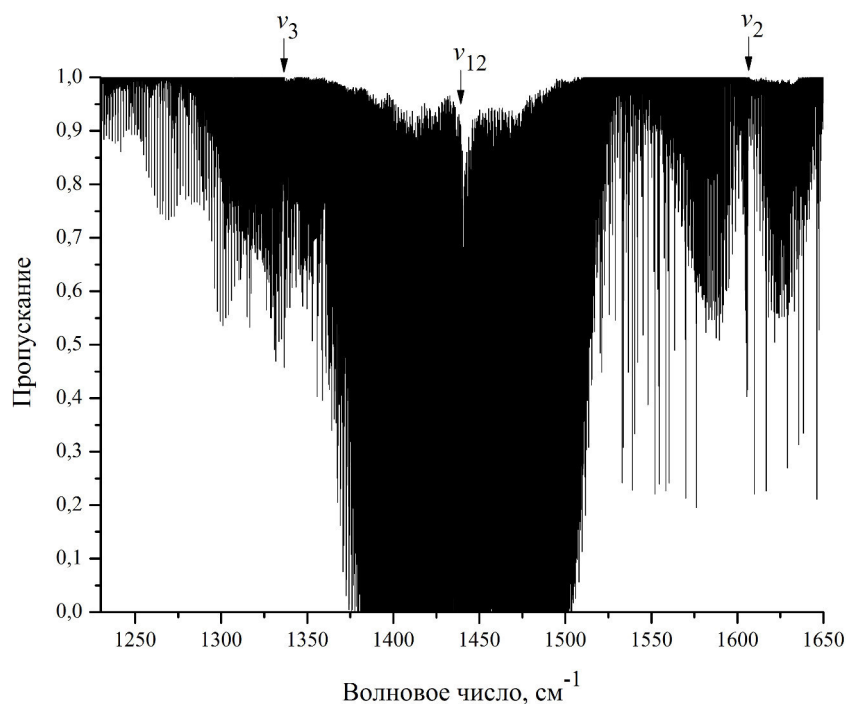


Рис. 3. Обзорный спектр высокого разрешения молекулы $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$ в диапазоне 1230 – 1650 см^{-1}

Заключение. В результате был проанализирован спектр высокого разрешения полос ν_2 , ν_3 , ν_{12} данного изотополога этилена. В итоге к полосам ν_2 , ν_3 , ν_{12} было отнесено около 3800 переходов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Томского политехнического университета по программе ВИУ-ФТИ-24/2016.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gabona M.G., Tan T.L., Woo J.Q. High-resolution FTIR analysis and rotational constants for the ν_{12} band of ethylene-1- ^{13}C ($^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$) // J Mol Spectrosc.–2014. – №305. – С. 22–4.
2. 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. – № 313. – С. 4–13.
3. Ulenikov ON, Gromova OV, Aslapovskaya Yu.S., Horneman VM. 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 Transf. – 2013. – №118. – С. 14–25.