

**АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО
РАЗРЕШЕНИЯ В ПОЛОСЕ ν_2 ДИОКСИДА СЕРЫ**

Чжоу Синьтун

Научный руководитель: ассистент А.Г. Зяткова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 354770247@qq.com

**ANALYSIS OF THE RO-VIBRATIONAL VERTICAL SPECTRUM OF HIGH RESOLUTION IN THE
BAND ν_2 OF SULFUR DIOXIDE**

Zhou Xintong

Scientific Supervisor: lecturer A.G. Ziatkova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 354770247@qq.com

***Abstract.** Present work is a continuation of our extensive high resolution study sulfur dioxide. Ro-vibrational spectrum of the $^{32}\text{SO}_2$ molecule has been recorded in the region of $400\text{-}700\text{ cm}^{-1}$ where the hybrid ν_2 band is located. The Ground State Combination Differences method is used for the spectra assignment. The subsequent weighted fit of experimentally assigned transitions was made with the Watson Hamiltonian. A set of 33 parameters is obtained which reproduces the initial 500 infrared ro-vibrational energy values from more than 3000 experimental lines with a root mean square deviation $d_{\text{rms}} = 1.5 \cdot 10^{-4}\text{ cm}^{-1}$. The obtained set of spectroscopic parameters allows us to reproduce experimental data with the mean accuracy, comparable with the experimental uncertainty in line position.*

Введение. Развитие современной колебательно-вращательной спектроскопии молекул даёт возможность более точно описывать информацию полученную из экспериментов и, путем интерпретации спектров, исследовать основные характеристики молекул, которые дают возможность для исследования различных эффектов внутримолекулярной природы. Благодаря интерпретации спектров можно определить систему уровней энергии молекулы и найти спектроскопические постоянные, структурные параметры и потенциальную функцию исследуемой молекулы. Изучение спектров молекулы $^{32}\text{SO}_2$ является актуальным и важным в планетологии, астронавтики, химии и спектроскопии.

Объектом исследования данной работы является колебательно-вращательный спектр высокого разрешения молекулы $^{32}\text{SO}_2$. Спектроскопическая информация применяется в физике, планетологии, атмосферной оптике и т.д. SO_2 имеет применение в кругах современной науки, как химия, астрофизика, лазерные технологии и др. Таким образом, диоксид серы, выбрасываемый в атмосферу в процессе извержения вулканов, потом превращается серную кислоту H_2SO_4 . Это, в свою очередь, влияет на химические процессы в атмосфере и климате. Также SO_2 является одним из основных звеньев атмосферного цикла Земли. Чтобы решать задачу дистанционного мониторинга и обнаружения диоксида серы, нужно иметь информацию о тонкой структуре спектров поглощения молекулы в различных областях электромагнитного диапазона, в частности, инфракрасной. Необходимость исследования

спектров этой молекулы, обуславливается, в том числе, тем, что для определения корректной потенциальной функции молекулы серы необходимо иметь информацию обо всех её изотопических модификациях, в том числе, $^{34}\text{SO}_2$, S^{18}O_2 и т.д.

Перечисленные выше моменты позволяют говорить о важности и актуальности анализа спектров высокого разрешения молекулы SO_2 и извлечения из них высокоточной количественной информации. В соответствии с вышесказанным, целью данной работы является получение параметров модели Гамильтониана, корректно описывающей колебательно-вращательное распределение энергетических уровней в полосе ν_2 диоксида серы.

Анализ спектра высокого разрешения полосы ν_2 молекулы диоксида серы. Молекула $^{32}\text{SO}_2$ принадлежит к группе симметрии C_{2v} и является молекулой типа асимметричного волчка и представлена её равновесная структура. Центр полосы спектров молекулы ν_2 является 517.8726 см^{-1} в диапазоне $400\text{--}700 \text{ см}^{-1}$. Правила отбора, соответствующие разрешенным переходам b-типов имеют вид $\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \pm 1; \Delta K_c = \pm 1$ соответственно [1]. В исследование включены в решение обратной спектроскопической задачи и определение спектроскопических параметров указанной полосы. В результате, это позволило получить больше экспериментальной информации о полосе ν_2 .

Для решения задачи была выбран гамильтониан типа Уотсона для молекулы типа асимметричного волчка в A -редукции и I' -представлении [2]. Фрагмент использованного оператора диагонального блока имеет следующий вид:

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

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

Экспериментальные детали. При анализе использовался спектр высокого разрешения, зарегистрированный с помощью Фурье спектрометра Bruker IFS 120HR в университете г. Брауншвейг (Германия). Эксперимент проводился при давлении 10 Па, инструментальное разрешение представлено $0,0025 \text{ см}^{-1}$, длине оптического пути представлена 4 м. После 695 сканирований и времени 32 ч получен спектр. Спектры были калиброваны с помощью линий газа N_2O .

В этом спектральном диапазоне локализована полоса ν_2 (в качестве иллюстрации на Рис. 1.1 показан спектр молекулы $^{32}\text{SO}_2$ в диапазоне $400\text{--}700 \text{ см}^{-1}$, а также фрагмент Q-ветви полосы ν_2 на Рис. 1.2). Анализ спектра был выполнен с помощью методом комбинационных разностей.

Результаты. Проведен анализ колебательно-вращательной структуры полосы ν_2 молекулы $^{32}\text{SO}_2$ на основе метода комбинационных разностей. В результате, достигли максимальных значений квантовых чисел $J = 50$ и $K_a = 18$. Около 500 экспериментальных значений колебательно-вращательных энергий полученный в эксперименте состояния ν_2 . Получены 33 параметра, воспроизводимые данное значение колебательно-вращательной энергии, определенные 3000 экспериментальных линий с среднеквадратичным отклонением $d_{\text{rms}} = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

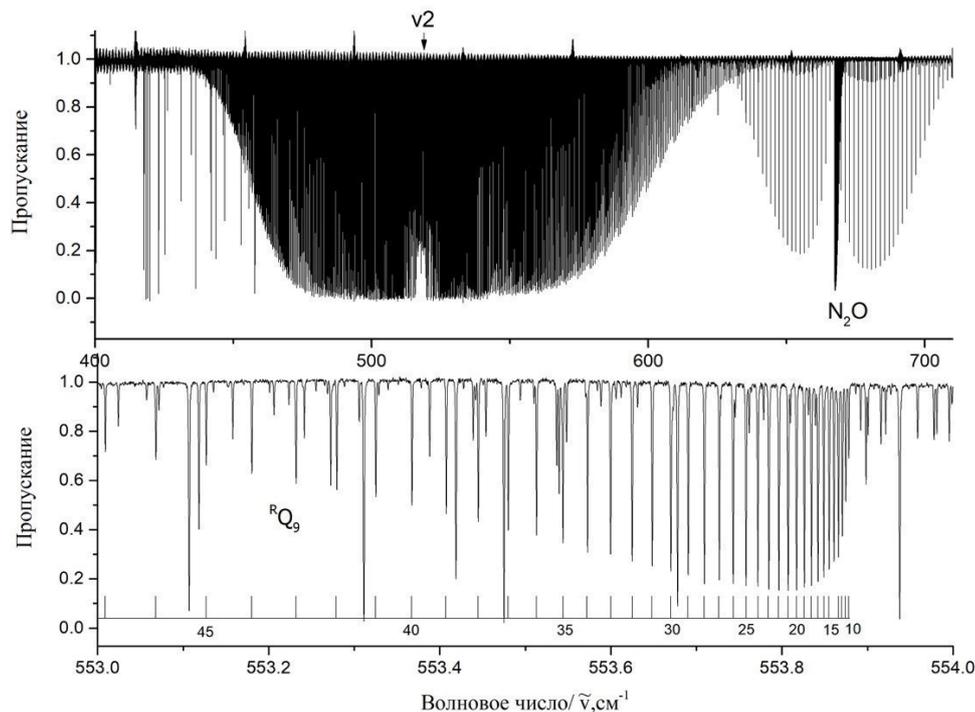


Рис. 1. Активная в инфракрасном поглощении колебательно-вращательная полоса молекулы $^{32}\text{SO}_2$ в области $400\text{-}700\text{ см}^{-1}$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, M. Quack, G. Ch. Mellau, C.Sydow, S.Bauerecker. T Extended analysis of the high resolution FTIR spectrum of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ in the region of the ν_2 band: Line positions, strengths, and pressure broadening widths//J.Mol. Spectrosc. – 2018. –V. 210. –P. 141-155
2. Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А.Е. Симметрия и ее применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. – М. Издательство Томского Университета, 1990. – 224 с.