

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ $^{34}\text{SO}_2$
ДИАПОЗОНЕ 440-620 CM^{-1}**

И. Инь, А.Г. Зяткова

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.С. Бехтерева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

e-mail:741276784@qq.com

RO-VIBRATIONAL ANALYSIS OF THE $^{34}\text{SO}_2$ MOLECULE IN REGION OF 440-620 CM^{-1}

Y. Yin, A. Ziatkova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.S. Bekhtereva

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

e-mail:741276784@qq.com

***Abstract.** Present work is a continuation of our extensive study $^{34}\text{SO}_2$. Ro-vibrational spectrum of the $^{34}\text{SO}_2$ molecule has been recorded in the region of 440–620 cm^{-1} where the ν_2 band is located. The method of Ground State Combination Differences is used for the spectra assignment. Finally more than 600 transitions of b-type belonging to the ν_2 band are founded. A set of 30 parameters is obtained which reproduces the initial 570 infrared ro-vibrational energy values from more than 4100 experimental lines with a root mean square deviation $d_{\text{rms}} = 1.5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$.*

Введение. Для многих задач науки и техники важным является знание внутренних свойств и фундаментальных характеристик молекул. Методы молекулярной спектроскопии позволяют извлечь из полученной экспериментальной информации структурные постоянные, дипольные моменты молекулы, моменты инерций, параметры силового поля, и энергетическую колебательно-вращательную структуру. Подобного рода информация является чрезвычайно важной при решении многих не только академических, но и прикладных задач физической химии, пищевой технологии, атмосферной оптики и других областей науки.

Объектом исследования данной работы является колебательно-вращательный спектр высокого разрешения молекулы $^{34}\text{SO}_2$. Для исследования молекулы $^{34}\text{SO}_2$, как и для любой другой, важно иметь

точный вид потенциальной функции. Корректная информация о внутримолекулярной потенциальной функции, является необходимой для решения задач касающихся внутренней динамики, процессов, происходящих в молекуле. В Земной атмосфере диоксид серы является естественной составляющей, происходящей из вулканической эмиссии, а также является антропогенным загрязнителем. Отметим, что в реальной смеси газов, например, в атмосферном воздухе, кроме самих молекул, по разным причинам, возникают их изотопологи. Большую роль исследования спектров молекулы $^{34}\text{SO}_2$ и ее изотопологов играет также в астрофизике, планетологии, так как данная молекула и ее изотопологи были обнаружены в атмосферах планет Солнечной системы, а именно, Сатурн, Уран, Нептун. Перечисленные выше моменты позволяют говорить о **важности и актуальности** анализа спектров высокого разрешения молекулы $^{34}\text{SO}_2$ и извлечения из них высокоточной количественной информации. В соответствии с вышесказанным, **целью** данной работы является решение обратной спектроскопической задачи, т.е. получения параметров гамильтониана, на основе экспериментальной информации, извлеченной из спектра.

Метод исследования. Был выполнен анализ спектра высокого разрешения полосы $\nu_2(A_1)$ молекулы $^{34}\text{SO}_2$, центр которой локализован на $440,620 \text{ см}^{-1}$. Вследствие симметрии молекулы для этой полосы разрешены переходы b-типа. Правила отбора имеют вид: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \pm 1$; $\Delta K_c = \pm 1$. В настоящем исследовании найдены переходы b-типа и включены в решение обратной спектроскопической задачи. В качестве математической модели выбран гамильтониан Уотсона A-редукции и Γ^1 -представлении, описывающий энергетическую структуру молекул типа асимметричного волчка [1]. Фрагмент использованного оператора диагонального блока имеет следующий вид (1):

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

Экспериментальные детали. При анализе использовался спектр высокого разрешения, зарегистрированный с помощью Фурье спектрометра Bruker IFS 120 (Германия). Эксперимент проводился при давлении 0,62 мбар, в спектральном диапазоне $440\text{-}620 \text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,0025 \text{ см}^{-1}$ при комнатной температуре.

В этом спектральном диапазоне локализована одна полоса поглощения, а именно, ν_2 . В качестве иллюстрации на Рис. 1 показан спектр молекулы $^{34}\text{SO}_2$ в диапазоне $440\text{-}620 \text{ см}^{-1}$, а также фрагмент Q-ветви. Как видно, линии хорошо разрешены и имеют четкий контур. Анализ спектра проводился на основе метода комбинационных разностей.

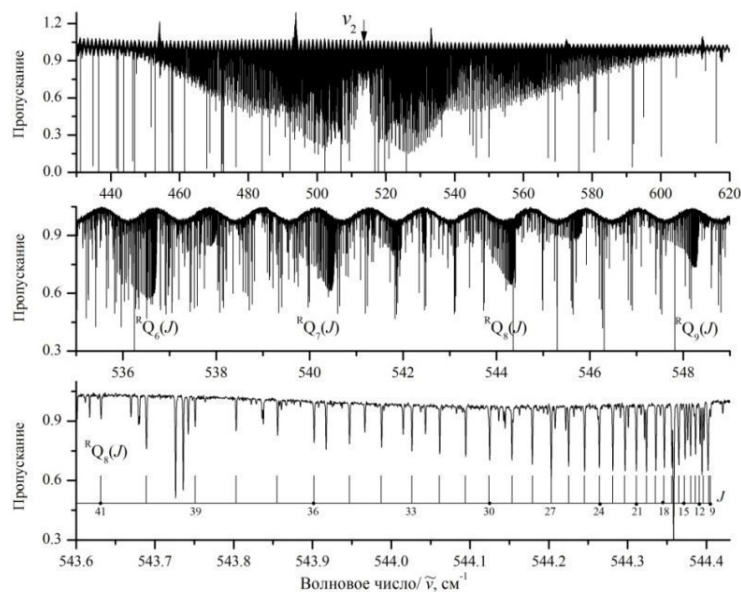


Рис. 1. Активная в инфракрасном поглощении колебательно-вращательная полоса молекулы $^{34}\text{SO}_2$ в области $440\text{-}620\text{ см}^{-1}$

Результаты. На основе анализа экспериментальных данных было определено более 4100 энергетических уровней. В результате решения обратной спектроскопической задачи получено 30 параметров, описывающих вращательную структуру колебательного состояния ($d_{\text{rms}} = 1.5 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.