

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛОСЫ  $\nu_6+\nu_{11}$   
МОЛЕКУЛЫ  $C_2D_4$**

Ван Шэнья

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. А.Л. Фомченко  
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050  
E-mail: [471480744@qq.com](mailto:471480744@qq.com)

**DETERMINATION OF SPECTROSCOPIC PARAMETERS OF THE  $\nu_6+\nu_{11}$  BAND OF  $C_2D_4$   
MOLECULE**

Wang Shengya

Scientific Supervisors: associate professor A.L. Fomchenko  
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050  
E-mail: [471480744@qq.com](mailto:471480744@qq.com)

***Abstract.** Structures and properties of molecules can be obtained by studying the high-resolution spectra. This work is devoted to the study of vibrational-rotational spectrum of polyatomic molecule  $C_2D_4$ . High-precision infrared Fourier spectra of the  $C_2D_4$  molecule in the region of  $3100\text{--}3300\text{ cm}^{-1}$  were analyzed. The rotational structure of the absorption band  $\nu_6+\nu_{11}$  was analyzed using the method of ground state combination differences. This gave us the possibility to determine the rotational and centrifugal parameters of the ( $\nu_6=\nu_{11}=1$ ) vibrational state.*

**Введение.** Строение и свойства молекул можно изучать путем исследования спектров, которые являются очень важным источником информации. Колебательно-вращательная спектроскопия является разделом молекулярной спектроскопии, изучающей инфракрасные и комбинационные спектры молекул в газовой фазе. Переходы, связанные с изменениями как колебательного, так и вращательного состояний, обычно называют ровибрационными переходами [1]. Так как изменения в уровнях вращательной энергии обычно намного меньше, чем изменения уровней колебательной энергии, то говорят, что изменения во вращательном состоянии дают так называемую тонкую структуру колебательного спектра.

Этилен представляет собой природное соединение в атмосферном воздухе, которое влияет на атмосферную химию и глобальный климат. В результате реакции с гидроксильным (ОН) радикалом этилен играет важную роль в тропосферной химии и генерации озона. Этот вклад в химию атмосферы делает этилен климатически значимым следовым газом, а его концентрация, источники и поглотители воздуха представляют интерес для науки об атмосфере. Этилен является одним из самых изучаемых в астрофизике веществ, т.к. он был обнаружен в атмосферах планет Юпитер, Сатурн, Нептун и спутник Титан.

Этилен играет важную роль в структурной химии, а также в других областях науки; его можно рассматривать как прототип при исследовании спектров, динамики и потенциальных гиперповерхностей многих органических молекул. Поэтому в течение многих лет молекула этилена была предметом многочисленных спектроскопических исследований спектров высокого разрешения как в микроволновой, так и в инфракрасной областях спектра.

Что касается молекулы  $C_2D_4$ , которая является объектом исследования в представленной работе, данный изотополог, а также другие виды дейтерированного этилена должны быть всегда включены в анализ атмосфер других планет. Знание точной колебательно-вращательной структуры спектров молекулы  $C_2D_4$  играет важную роль в такой задаче, как определение правильной многомерной внутримолекулярной потенциальной функции этилена.

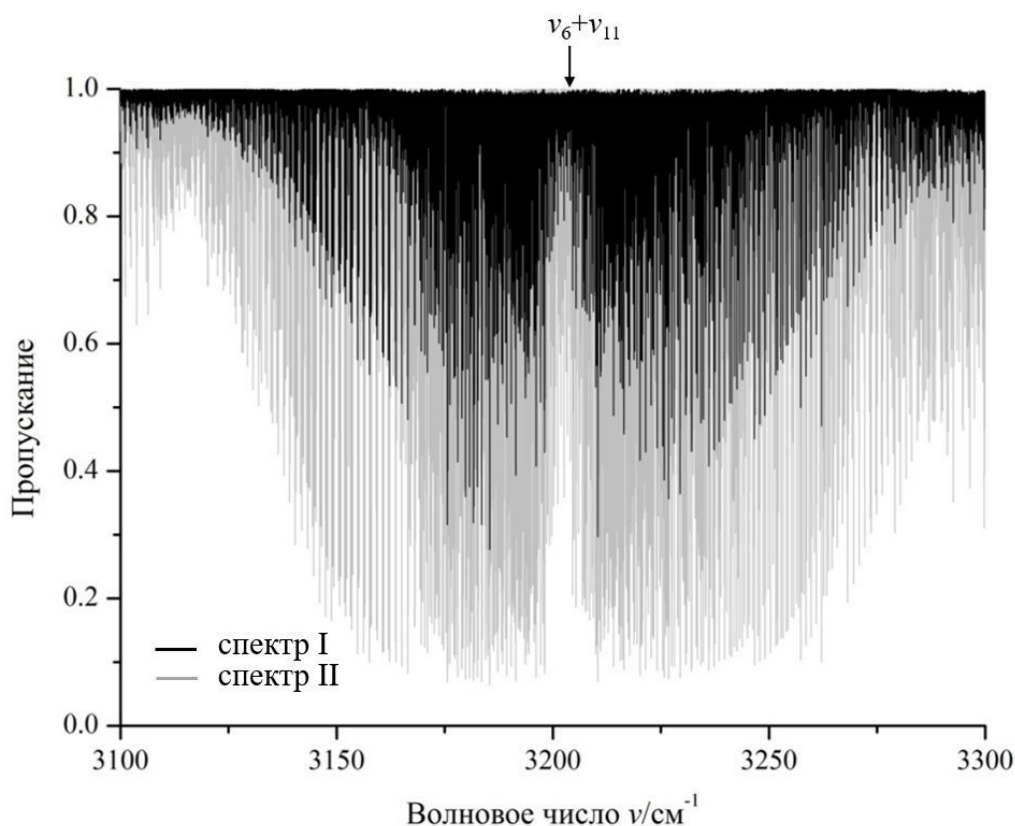
**Детали эксперимента.** Два спектра молекулы  $C_2D_4$  были зарегистрированы в диапазоне 3100-3300  $cm^{-1}$  с помощью инфракрасного (FTIR) спектрометра Bruker IFS 120 в сочетании с ячейкой Уайта из нержавеющей стали с длиной основания 1 м. Использовался полупроводниковый детектор на основе антимонида индия (InSb). Экспериментальные условия, при которых были зарегистрированы исследуемые спектры, представлены в таблице 1.

Таблица 1

Экспериментальные условия для спектров молекулы  $C_2D_4$ 

Спектр №	Диапазон, $cm^{-1}$	Давление, мбар	Длина пути, м	Температура, К	Число сканов	Разрешение, $cm^{-1}$
I	3100-3300	1,05	24	300	500	0,003
II	3100-3300	6,33	24	300	450	0,003

В пределах указанного спектрального диапазона имеется исследуемая комбинационная полоса поглощения  $\nu_6+\nu_{11}$  с центром около 3202  $cm^{-1}$  (см. рис. 1)

Рис. 1. Экспериментально зарегистрированный спектр молекулы  $C_2D_4$  в районе полосы  $\nu_6+\nu_{11}$

**Метод исследования.** Молекула  $C_2D_4$  является молекулой типа асимметричного волчка и обладает группой симметрии, изоморфной точечной группе  $D_{2h}$  [2]. Эта группа имеет восемь неприводимых представлений, в то же время, в молекуле возможны переходы только трёх типов: с основного колебательного состояния (симметрия  $A_g$ ) на колебательные состояния симметрии  $B_{1u}$ ,  $B_{2u}$  или  $B_{3u}$ . Исследуемая молекула имеет двенадцать нормальных колебаний соответствующей симметрии:  $q_1, q_2, q_3 \in A_g, q_4 \in A_u, q_5, q_6 \in B_{1g}, q_7 \in B_{1u}, q_8 \in B_{2g}, q_9, q_{10} \in B_{2u}$  и  $q_{11}, q_{12} \in B_{3u}$ . Таким образом, исследуемая полоса  $\nu_6+\nu_{11}$  имеет симметрию  $B_{2u}$  и, как следствие, для нее характерны следующие правила отбора:  $\Delta J=0, \pm 1, K_a$  – нечётные,  $K_c$  – чётные.

Для теоретического анализа экспериментальных данных была использована модель колебательно-вращательного эффективного гамильтониана Уотсона в А-редукции,  $I^r$  представлении [3]:

$$H^{vv} = E^v + [A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v)]J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v)J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v)J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2]_+ - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_{KJ}^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J^2 + h_J^v J^4]_+ + \dots,$$

где  $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$  и  $[A, B]_{\pm} = AB + BA$ ,  $J_{\alpha}$  ( $\alpha = x, y, z$ ) – компоненты оператора углового момента;  $E$  – колебательная энергия, центр полосы,  $A^v, B^v, C^v$  – вращательные постоянные,  $\Delta_K^v, \Delta_{JK}^v, \Delta_J^v, \delta_K^v, \delta_J^v$  – параметры центробежного искажения.

**Результат.** Путем интерпретации спектра одной из изотопических модификаций молекулы этилена  $C_2D_4$  удалось впервые определить спектроскопические параметры полосы ( $\nu_6+\nu_{11}=1$ ). Для определения энергетических вращательных уровней возбужденного колебательного состояния использовался метод комбинационных разностей. В результате было проинтерпретировано более 1500 переходов исследуемой полосы, на основе которых было определено более 400 колебательно-вращательных энергий состояния ( $\nu_6+\nu_{11}=1$ ).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-02-00819 А.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hollas M.J. Modern Spectroscopy. – Wiley, 1996. – 452 с.
2. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. – М.: Издательство иностранной литературы, 1949. – 413 с.
3. Watson J.K.G. Determination of Centrifugal Distortion Coefficients of Asymmetric-Top Molecules // Journal of Chemical Physics. – 1967. – V. 46. – P. 1935–1949.