

**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

**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

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)

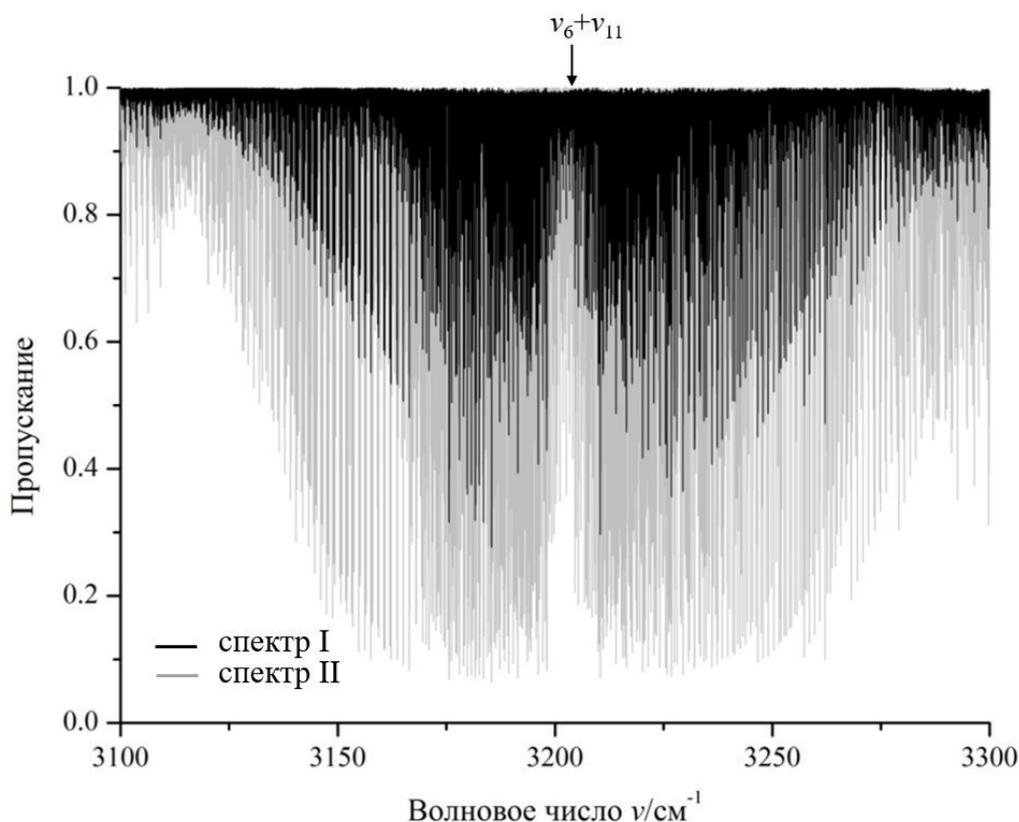


Рис. 1. Экспериментально зарегистрированный спектр молекулы C_2D_4 в районе полосы $\nu_6+\nu_{11}$

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]:

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

где $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$ и $[A, B]_{\pm} = AB + BA$, J_{α} ($\alpha = x, y, z$) – 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.