

**ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЫ C₂H₄ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ
ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ**ТяньИфань

Научный руководитель: к.ф.-м.н., ассистент Ю.С.Аслаповская
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: yifantian1@gmail.com

THE STUDY OF THE MOLECULE C₂H₄ METHODS OF HIGH-RESOLUTION SPECTROSCOPYTianYifan

Scientific Supervisors: Ph.D., Teaching Assistant Yu.S. Aslapovskaya
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin av., 30, 634050
E-mail: yifantian1@gmail.com

Abstract. *We report here the results of high accurate, analysis of the ethylene molecule in the region of 1800 – 2000 cm⁻¹. More than 1044 transitions belonging to the $\nu_7+\nu_8$ band were assigned in the experimental spectrum with the maximum values of quantum numbers J^{max}/K_a^{max} , equal to 40/14, respectively. The inverse spectroscopic problem was solved using these transition energy and the Hamiltonian parameters was gotten.*

Введение. Актуальность работы заключается в том, что посредством исследования колебательно – вращательных спектров можно изучать строение и свойства молекул. С помощью анализа спектров можно получить большое количество информации, необходимой в различных разделах физики, химии, астрофизики и т.д. Например, изучая спектры, можно непосредственно определить отдельные уровни энергии молекулы. Причём, из спектра можно узнать конкретные особенности движения электронов в молекуле, вращательных и колебательных движений ядер. Из вышесказанного следует, что спектры являются очень точным инструментом для определения наиболее важных характеристик молекул [1].

Молекулярная колебательно-вращательная спектроскопия высокого разрешения играет ключевую роль в понимании структуры материи и развитии квантовой механики. В настоящее время достижения молекулярной спектроскопии имеют большое значение для астрофизики, плазменной и лазерной физики. Быстрое развитие колебательно-вращательной спектроскопии оказывает значительное влияние на исследования в экологии, химии и астрофизики, а в особенности на технологию электронной и лазерной спектроскопии.

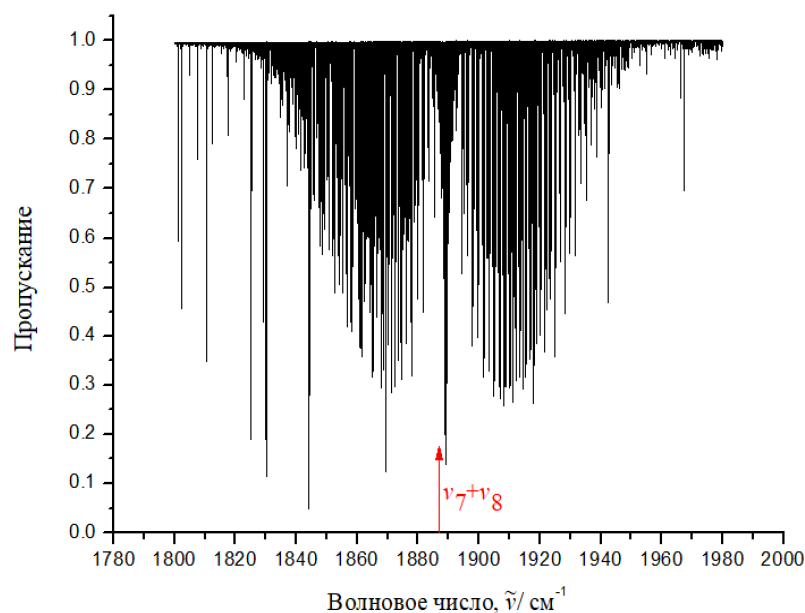


Рис. 1. Спектр высокого разрешения молекулы C_2H_4 в районе полосы $\nu_7+\nu_8$

В этой работе рассматриваются результаты исследования молекулы этилена (C_2H_4). Для анализа полученных из эксперимента данных о данной молекуле, была использована модель колебательно-вращательного эффективного гамильтониана, которая получена на основе использования свойств симметрии молекулы и с использованием теории неприводимых тензорных операторов. Данная модель гамильтониана учитывает наличие резонансных взаимодействий [2]:

$$H^{vib.-rot.} = \sum_{v, \tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| H^{v\tilde{v}}$$

где суммирование ведется по всем колебательным состояниям, а параметр $H^{v\tilde{v}}$ представлен в следующем виде:

$$\begin{aligned} H^{v, \tilde{v}} = & E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \\ & + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{Jk}^v J_z^4 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \\ & - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + \dots \end{aligned}$$

где $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$ и $[A, B]_+ = AB + BA$.

Метод исследования. В современных научных экспериментальных исследованиях мы часто используем метод комбинационных разностей для определения энергетических уровней молекулярных колебательных состояний. Суть этого метода состоит в том, что мы рассматриваем уровни вращательной энергии основного колебательного состояния и уровень возбужденного колебательного состояния. Всегда есть переходы от нескольких вращательных уровней основного колебательного состояния на вращательный уровень возбужденного колебательного состояния. Если известна точная вращательная

структура основного колебательного состояния (положение линии), то возможно определить уровни вращательной энергии возбужденного колебательного состояния.

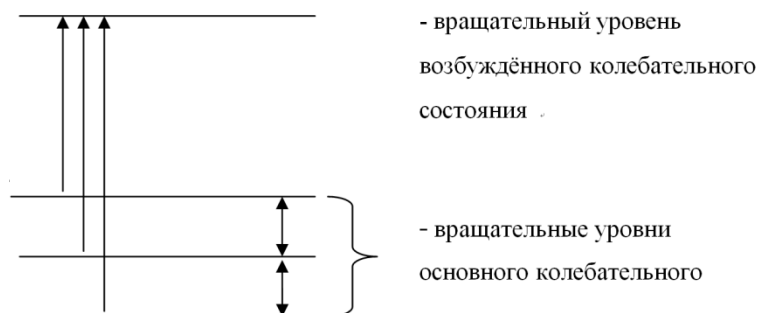


Рис. 2 Переход с вращательных уровней основного колебательного состояния на один из вращательных уровней возбужденного состояния

Результаты. В ходе выполнения научной работы был осуществлен анализ тонкой структуры экспериментально зарегистрированного спектра молекулы C_2H_4 в районе полосы $\nu_7+\nu_8$. Анализ спектра проводился методом комбинационных разностей. В результате проведенного исследования получена новая информация для полосы $\nu_7+\nu_8$ о порядка 1150 переходах с максимальным значением квантовых чисел $J=40$ и $K_a=14$. Полученные результаты позволили определить около 900 значений верхних уровней энергии.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Банкер А. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. –Москва: Мир, 1981. – 451 с.
2. Папусек А.В. , Алиев М.Р. Применение теории молекулярных колебательных вращательных спектров. - Амстердам: Elsevier, 1982. - 324с..