

**АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ И  
РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СИСТЕМЫ  
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ СОСТОЯНИЙ  $\nu_6$ ,  $\nu_4$ ,  $\nu_8$ ,  $\nu_7$ , и  $\nu_{10}$  ИЗОТОПОЛОГА ЭТИЛЕНА  $C_2H_3D$**

С.А. Жданович

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: [stas.zhdanovich@hotmail.com](mailto:stas.zhdanovich@hotmail.com)

**ETHYLENE  $C_2H_3D$  ISOTOPOLOGUE:  
HIGH RESOLUTION STUDY OF  $\nu_6$ ,  $\nu_4$ ,  $\nu_8$ ,  $\nu_7$  AND  $\nu_{10}$  FUNDAMENTALS**

S.A. Zhdanovich

Scientific Supervisor: Prof. E.S. Bekhtereva

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

E-mail: [stas.zhdanovich@hotmail.com](mailto:stas.zhdanovich@hotmail.com)

***Abstract.** High Resolution Fourier transform infrared spectra of the  $C_2H_3D$  molecule were recorded with Doppler limited resolution in the region of 600 - 1250  $cm^{-1}$  at room temperature. The measurements were carried out under several different absorption conditions using the Bruker 120 HR spectrometer in Braunschweig Technical University. Five fundamentals  $\nu_6$ ,  $\nu_4$ ,  $\nu_8$ ,  $\nu_7$ , and  $\nu_{10}$  were observed and found to be perturbed by different resonance interactions. About 6000 lines were assigned in the recorded spectrum. They were used then in the weighted fit procedure with the effective Hamiltonian taking into account five strongly interacting states.*

**Введение.** Анализ спектров высокого разрешения позволяет определить систему колебательно-вращательных уровней энергии молекулы. Решение обратной спектроскопической задачи, в свою очередь, позволяет найти спектроскопические параметры, из которых впоследствии могут быть определены структурные параметры и внутримолекулярное силовое поле (PES-Potential Energy Surface). Знание фундаментальных параметров PES дает представление о процессах, происходящих в молекуле. Моделирование колебательно-вращательных спектров на основе полученных из решений обратной спектроскопической задачи данных также требует знания корректной потенциальной функции исследуемой молекулы. В свою очередь, для того чтобы ее определить из экспериментальных данных, необходимо обладать информацией о как можно большем числе различных изотопических модификаций молекулы. В этой связи, исследование молекулы  $C_2H_3D$  представляет большой интерес, с точки зрения определения потенциальной функции молекулы этилена. Банки данных высокого разрешения, повсеместно используется для анализа состава атмосфер планет. Задача дистанционного мониторинга и обнаружения определенных молекул в составе атмосфер планет решается в том числе для поиска землеподобных экзопланет, и/или поиска жизни на них. При этом метан, полимеризующийся в этилен на планетах, имеющих твердую поверхность, служит одним из биомаркеров (сигналов возможного существования форм жизни). [4-6]

**Детали эксперимента.** Спектр высокого разрешения монодейтерированного этилена был получен на Фурье-спектрометре Bucker 120HR в диапазоне волновых чисел 600 – 1250  $\text{cm}^{-1}$  (Рис. 1) при комнатной температуре, использовался изотопически чистый образец  $\text{CH}_2=\text{CHD}$ .

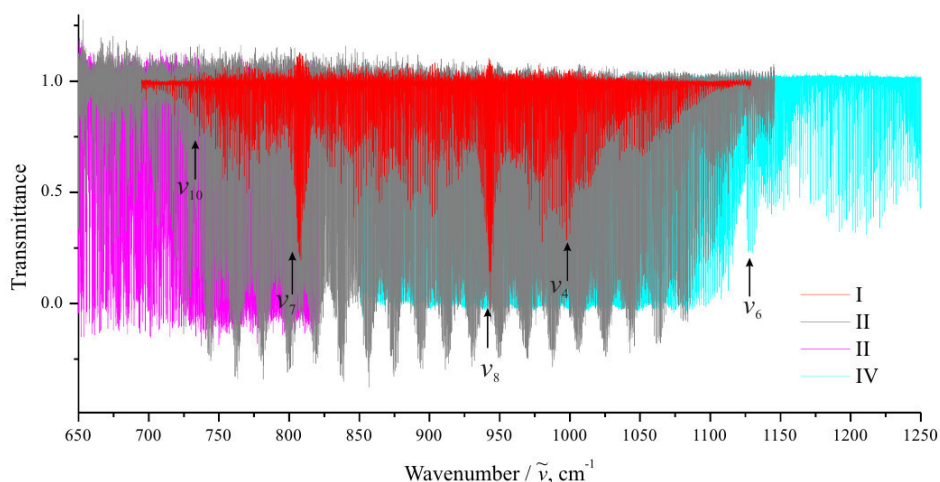


Рис. 1. Обзорный спектр высокого разрешения молекулы  $\text{C}_2\text{H}_3\text{D}$  в диапазоне 600 – 1250  $\text{cm}^{-1}$

**Результаты.** Набор спектроскопических параметров (Таблица 1) полученный из решения обратной спектроскопической задачи воспроизводит данные исходного эксперимента с точностью до погрешности эксперимента ( $d_{rms} = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ). Результаты анализа спектра приведены в таблице 2.

Таблица 1

Параметры диагонального блока матрицы эффективного гамильтониана молекулы  $\text{C}_2\text{H}_3\text{D}$

Параметр	Основное состояние	( $\nu_{10}=1$ )	( $\nu_7=1$ )	( $\nu_8=1$ )	( $\nu_4=1$ )	( $\nu_6=1$ )
E		730,2381189 (321)	806,4678871 (171)	943,5981282 (289)	1000,0379747 (315)	1125,2749524 (242)
A	4,0058896	4,03248514 (214)	4,12725701 (115)	4,09309725 (435)	3,94571062(221)	4,0158546(654)
B	0,9163247	0,91673441 (105)	0,92594582 (605)	0,95447154 (351)	0,9163247(315)	0,9163247(468)
C	0,7437730	0,7405725 (383)	0,7493574(324)	0,7422074(546)	0,74377311(418)	0,74377308(245)
$\Delta_K \times 10^4$	0,7096	0,715841 (245)	0,72071855 (151)	0,697651172 (454)	0,72178511(115)	0,69574212 (487)
$\Delta_{JK} \times 10^5$	0,6023	0,6101542 (452)	0,6023	0,59430413 (441)	0,6110452(368)	0,60045716 (331)
$\Delta_J \times 10^5$	0,12941	0,1328557 (112)	0,1404541(274)	0,1182345(227)	0,13047719(192)	0,1273544(164)
$\delta_K \times 10^5$	0,789	0,789	0,788147(157)	0,790454(884)	0,789	0,77345(229)
$\delta_J \times 10^6$	0,2839	0,2839	0,26170(452)	0,26185(283)	0,2839	0,278431(201)
$H_K \times 10^8$	0,70	0,72061 (323)	0,71844(133)	0,70	0,72617(405)	0,68541(115)
$H_{KJ} \times 10^9$	-0,53	-0,53	-0,53	-0,53	-0,53	-0,53
$H_{JK} \times 10^{10}$	0,58	0,58	0,58	0,58	0,58	0,58
$H_J \times 10^{11}$	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21

Таблица 2

Статистическая информация по проинтерпретированным полосам молекулы  $C_2H_3D$ 

	( $\nu_{10}=1$ )	( $\nu_7=1$ )	( $\nu_8=1$ )	( $\nu_4=1$ )	( $\nu_6=1$ )
$J^{\max} / K_a^{\max}, [2]^{(a)}$	28/14	35/14	35/14	35/14	30/13
$J^{\max} / K_a^{\max}, t \omega^{(b)}$	35/18	42/18	45/21	45/22	36/17
$N_{tr}$	757	2510	2432	2509	761
$N_{par} = 51$	$N_{lev} = 2989$	$d_{rms} = 1,5 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$			

**Заклучение.** В результате анализа спектра было проинтерпретировано примерно 6000 линий. При решении обратной спектроскопической задачи получено 13 спектроскопических параметров с погрешностью, не превышающей экспериментальную ( $1,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ ).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lebron G.B., Tan T.L. Improved rovibrational constants for the  $\nu_{12}$  band of  $C_2H_3D$  // J Mol. Spectrosc. – 2011. – № 265. – С. 55-7.
2. P. Herbin, Ch. Blanquet Vibrational-rotation analysis of  $C_2H_3D$  from 725 to 1170  $\text{cm}^{-1}$  // J Mol. Spectrosc. – 1988. – № 127. – С. 390-398.
3. J.M.L. Martin, T.J.Lee, P.R.Taylor The anharmonic force field of ethylene,  $C_2H_4$ , by means of accurate ab initio calculations // J.Chem, Phys. – 1995. – № 103. – С. 2589-2602.
4. К.Б. Берёзкин, А.Л. Фомченко, К. Леруа, В.-М. Хорнеман, Е.С. Бехтерева Исследование фурье-спектра высокого разрешения полосы  $\nu_3+\nu_4$  молекулы  $^{13}CH_3D$  // Известия высших учебных заведений. Физика. 2016. – Т. 59, № 9. — С. 3-9.
5. И.А. Конов, Ю.В. Чертавских, А. Л. Фомченко, Ю. С. Аслаповская, С. А. Жданович, К. Зидо Анализ фурье-спектра высокого разрешения полосы  $\nu_6$  молекулы  $cis-C_2H_2D_2$  // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015 Т. 58, № 11 – С. 95-99.
6. Бабилов Ю.Л., Барб А., Головки В.Ф., Михайленко С.Н., Тютюрев Вл.Г Интернет-коллекции по молекулярной спектроскопии.