

УДК 530.145

**ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛ ТИПА АСИММЕТРИЧНОГО ВОЛЧКА
НА ПРИМЕРЕ C_2H_4** Ван Шипэн

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Ю.С. Аслаповская

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 1579295404@qq.com

STUDY OF SPECTRA OF ASYMMETRIC WAVE-TYPE MOLECULES BY THE EXAMPLE OF C_2H_4 Wang Shipeng

Scientific Supervisor: PhD. Yu.S. Aslapovskaya

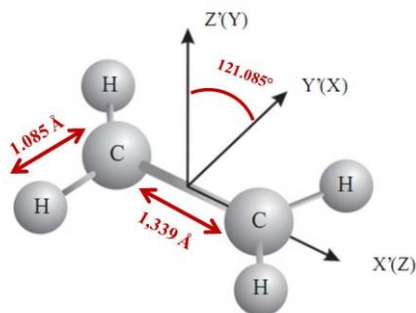
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 1579295404@qq.com

Abstract. In the present study, the $\nu_2 + \nu_{10}$ band were studied, which lies in the range of $2300\text{--}2700\text{ cm}^{-1}$ centered at 2435.63 cm^{-1} . For the analysis, spectra of higher accuracy than those known in the literature were used. This gave us the opportunity to obtain the parameters of the effective Hamiltonian, which describe the initial data with the accuracy of the experiment.

Введение. Известно, что структуру и внутреннюю динамику молекул можно определить с помощью различных методов молекулярной спектроскопии. В последние годы, в связи с усовершенствованием лазерного оборудования появилась возможность получать из эксперимента данные высокой точности. Такие данные позволяют более детально исследовать физические процессы происходящие в молекуле. По этой причине спектроскопическая информация, получаемая из эксперимента, имеет важное значение для широкого круга задач в области астрофизики, биофизики, а главное физической химии (природа химических связей, кинетика химических реакций и т.д.).

Таким образом, перед учеными возникает ряд проблем и вопросов, связанных с анализом экспериментальных спектров молекул, таких как интерпретация, определение фундаментальных характеристик молекул и др.

Рис. 1 Молекула этилена (C_2H_4)

Этилен – это природное соединение, содержащееся в окружающем воздухе и влияющие на химический состав атмосферы и глобальный климат. Этилен действует как гормон в растениях, и его роль в биохимии растений, физиологии, метаболизма млекопитающих и экологии является предметом обширных исследований. Благодаря своей высокой реакционной способности по отношению к гидроксильным (ОН) радикалам, этилен играет значительную роль в химии тропосферы и образовании озона. Этилен был наблюдается в атмосфере солнечных системы и за ее пределами в атмосферах планет гигантов. Молекулы C_2H_4 относится к молекуле типа асимметричного волчка, группа этой молекулы представляет собой D_{2h} , которая обладает восемью неприводимыми представлениями. Этилен является одним из базовых соединений на производстве в химической и нефтехимической промышленности представляя интерес для физико-химических исследований [1].

Заметим, что большое внимание исследователей уделено молекулам с симметричным внутренним волчком, в то время как для молекул с асимметричным строением необходима доработка либо же полная модификация известных методик анализа спектров. В результате чего, целью работы является исследование поведения спектров молекулы Этилена.

Экспериментальная часть. В данной работе были проведены исследования полосы $\nu_2 + \nu_{10}$, которая лежит в диапазоне $2300-2700\text{ см}^{-1}$ с центром в 2435.63 см^{-1} .

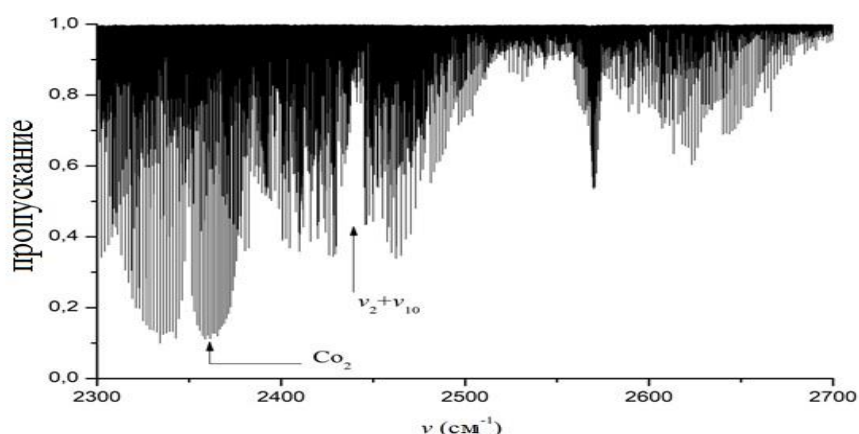


Рис. 2. Зарегистрированный спектр для полосы $\nu_2 + \nu_{10}$

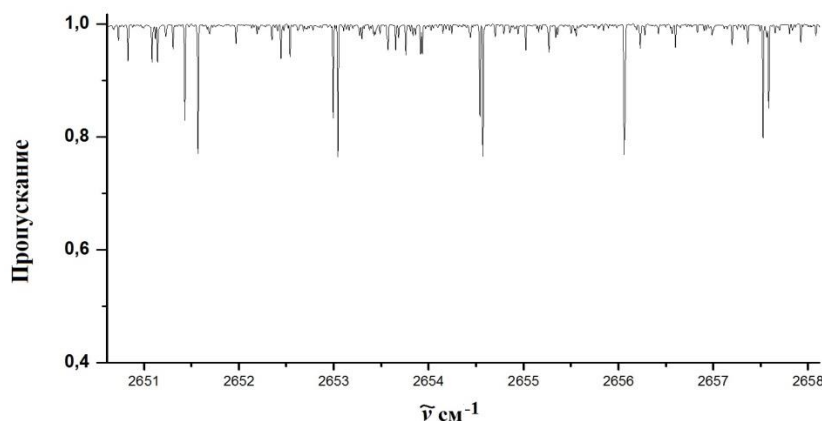


Рис. 3. Часть экспериментального спектра молекулы этилена в районе $2650-2658\text{ см}^{-1}$

Изучаемый спектр был зарегистрирован на Фурье спектрометре BRUKER 125 HR в университете Оулу Финляндия. Давление в ячейке составило 0.83 Тор. Использована ячейка - многоходовая с величиной оптического пути равного 0.8 м. Источник излучения – Глобар. Вся регистрация спектра заняла 29 часов и включала 1720 сканирований. Экспериментально зарегистрированный спектр представлен на рисунке 2. Часть спектра, которая показывает высокую точность эксперимента можно видеть на рис. 3.

Результаты. Для исследования молекулы этилена принадлежащей к типу асимметричных волчков эффективный гамильтониан имеет вид:

$$H^{vib.-rot.} = \sum_{v, \tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| H^{v\tilde{v}} \quad (1)$$

Диагональные блоки гамильтониана (1) объясняют невозмущенную вращательную структуру колебательных состояний $|v\rangle$ и представляются в вид гамильтониана Уотсона [2]:

$$\begin{aligned} H^{v\tilde{v}} = & E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 \\ & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_K^v J^2 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2]_+ - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 \\ & + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 \\ & + [h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J^2 + h_J^v J^4, J_{xy}^2]_+ + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 \\ & + L_{JJK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J_z^8 + [J_K^v J_z^6 + J_{KJ}^v J_z^4 J^2 + J_{JK}^v J_z^2 J^4 + J_J^v J^6, J_{xy}^2]_+ \\ & + P_K^v J_z^{10} + P_{KKJ}^v J_z^8 J^2 + P_{KJ}^v J_z^6 J^4 + P_{JK}^v J_z^4 J^6 + \\ & + S_K^v J_z^{12} + S_{KKJ}^v J_z^{10} J^2 + \dots, \end{aligned} \quad (2)$$

где J_α ($\alpha = x, y, z$) - компоненты углового момента в связанной с молекулой системе координат; $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2; [\dots, \dots]$ - антикоммутативное соотношение; A^v, B^v и C^v - эффективные вращательные константы, связанные с колебательными состояниями $|v\rangle$, коэффициенты центробежного искажения различных порядков и другие параметры. Идентификации спектра проводилась с использованием метода комбинационных разностей, параметры основного состояния, взятые из работы [3].

Заключение. В ходе исследования было определено около 1000 переходов с максимальными значениями квантовых чисел J/K_a равное 30/6 для полосы $v_2 + v_{10}$, соответственно. На этой основе была решена обратная спектроскопическая задача и определены параметры эффективного гамильтониана, которые позволяют воспроизводить исходные экспериментальные данные с точностью, близкой к экстремальной погрешности. Структура спектров молекулы напрямую зависит от ее геометрической конфигурации и особенностей колебательных движений атомов. Спектров этилена в различных видах колебаниях имеют большую разницу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ulenikov O.N. High resolution study of $v_5 + v_{12}$ band of C_2H_4 // Molecular Physics. – 2010. – V. 108., № 5. – P. 637–647.
2. Watson J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules // J. Chem. Phys. – 1967. – V. – 46. – P. 1935–1949.
3. Ulenikov O.N. High resolution spectroscopy study of C_2H_4 : re-analysis of the ground state and v_4, v_7, v_{10} и v_{12} , vibration bands // JQSRT. – 2013. – V. 118. – P. 14–25.