

**АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ
ПОЛОСЫ ν_9 МОЛЕКУЛЫ $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$**

А.В. Кузнецов

Научный руководитель: профессор, к. ф.-м. н. О.В. Громова
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: avk93@tpu.ru

ANALYSIS OF HIGH-RESOLUTION SPECTRA OF THE $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ MOLECULE: THE ν_9 BAND

A.V. Kuznetsov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. O.V. Gromova
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: avk93@tpu.ru

***Abstract.** High accurate, $(1-2) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, ro-vibrational spectra of the $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ molecule in the region of 3000 – 3200 cm^{-1} were recorded for the first time with Fourier transform interferometers Bruker IFS 120 HR and analyzed.*

Введение. Изучая спектры молекул, можно получить подробные сведения об их вращательных и колебательных уровнях энергии. Знание этих уровней энергий дает точные значения межатомных расстояний, частот колебаний, структурные постоянные, внутримолекулярное силовое поле и другие величины, которые характеризуют структуру молекул. Анализ колебательно-вращательных спектров высокого разрешения позволяет определить систему уровней энергии молекулы, найти спектроскопические постоянные, из которых впоследствии могут быть определены структурные параметры и потенциальная функция молекулы [1].

Молекула Этилена и ее изтопомеры представляют большой интерес для спектроскопистов в изучении ее колебательно-вращательной структуры. Исследование микроструктуры этилена важно для разнообразных академических и прикладных задач. Его роль в области экологии, физиологии и биохимии является предметом интенсивных исследований, например, этилен действует как гормон в растениях, он может являться прототипом большого числа органических молекул. Также этилен является составляющей структуры атмосферы Земли, что оказывает значительное влияние на глобальный климат и атмосферную химию. Еще одно важное положение занимает молекула этилена в астрофизических исследованиях и планетологии, это связано с тем, что он в значительных количествах присутствует в атмосферах таких планет, как Сатурн, Титан, Юпитер и Нептун [2]. Также молекула этилен может являться прототипом большого числа органических молекул. В связи с вышесказанным, целью данной работы является анализ колебательно-вращательных спектров высокого разрешения молекулы этилена $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ полосы ν_9 .

Общая характеристика молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$. В этом исследовании наше внимание сосредоточено на изотопологе этилена – $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$. Группа симметрии молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ изоморфна группе D_{2h} и имеет 8 неприводимых представлений [3]. Центр полосы составляет 3093,7986 cm^{-1} .

Исследуемая молекула имеет ось симметрии ниже третьего порядка, поэтому она является молекулой типа ассиметричного волчка, то есть три главных равновесных момента инерции молекулы различны. Поэтому, гамильтониан представляется в виде [4]:

$$H^n = E^n + \left[A^n - \frac{1}{2}(B^n + C^n) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^n - C^n) J^2 + \frac{1}{2}(B^n + C^n) J_{xy}^2 - \Delta_K^n J_z^4 - \Delta_{JK}^n J_z^2 J^2 - \Delta_J^n J^4 - \delta_K^n [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^n J^2 J_{xy}^2 + H_K^n J_z^6 + H_{KJ}^n J_z^4 J^2 + H_{JK}^n J_z^2 J^4 + H_J^n J^6 + [J_{xy}^2, h_K^n J_z^4 + h_{JK}^n J^2 J_z^2 + h_J^n J^4] + L_K^n J_z^8 + L_{KKJ}^n J_z^6 J^2 + L_{JK}^n J_z^4 J^4 + L_{JJK}^n J_z^2 J^6 + L_J^n J^6 + [J_{xy}^2, l_K^n J_z^6 + l_{KJ}^n J_z^4 J^2 + l_{JK}^n J_z^2 J^4 + l_J^n J^6] + \dots \quad (1)$$

Равновесная конфигурация молекулы и фундаментальное колебание ν_{11} представлены на рисунке 1 и 2, соответственно.

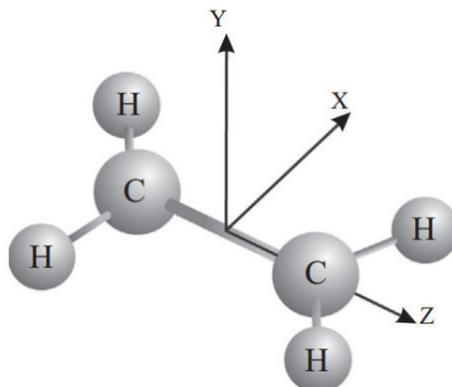


Рис. 1. Равновесная конфигурация молекулы

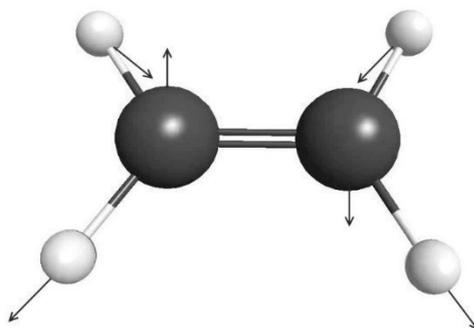


Рис. 2. Фундаментальное колебание ν_9

Экспериментальные данные. Исследованный спектр молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ (рисунок 3) был снят на фурье-спектрометре Bruker IFS 120HR. Для регистрации спектра использовали изотопически чистый образец с химической чистотой более 99% (образец, закупленный в Cambridge Isotope Laboratories). Спектр проводили в белой ячейке из нержавеющей стали с длиной основания 1 м и максимальной длиной пути 50 м. Экспериментальные данные захваченного спектра в диапазоне 3000-3200 cm^{-1} приведены в таблице 1.

Таблица 1

Экспериментальные данные

Разрешение, cm^{-1}	Время измерений, ч	Число сканирований	Давление, П	Температура, К
0,0025	4-16	110-400	17-180	300
Источник	Beam-Splitter	Опт. длина пути, м	Апертура, мм	Калибровочный газ
Globalar	KBr	50	1,5	$^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$

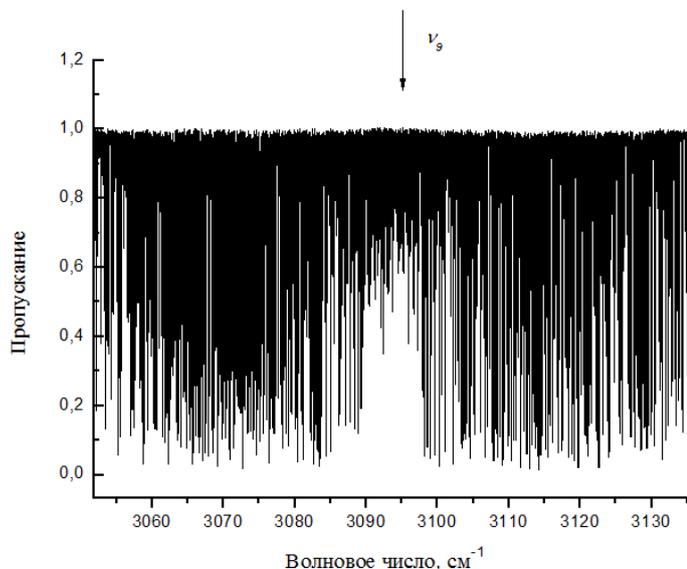


Рис. 3. Спектр молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

Результаты анализа спектра высокого разрешения. Исследуемая полоса ν_9 принадлежит группе симметрии A -типа и имеет следующие правила отбора: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = 0, \pm 2$; $\Delta K_c = 0, \pm 2$. Информация об энергетических уровнях основного колебательного состояния была получена из работы [5]. В результате работы был проинтерпретирован спектр молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ в районе полосы ν_9 . (максимальное значение квантового числа $J = 45$ и максимальное значение квантового числа $K_a = 17$. В ходе работы было проинтерпретировано около 3122 и определено 841 энергий для возбужденного состояния ν_9 . Для анализа экспериментальных данных использовалась модель эффективного оператора в виде (1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Betz L., Ethylene in IRC +10216 // *Astrophys. J.* – 1981. – V. 244. – P. L103-L105.
2. Cernicharo J., Heras A.M., Pardo J.R., Tielens A.G.G.M., Guelin M., Dartois E., Neri R., Walters L.B.F.M., Methylpolyynes and small hydrocarbons in CRL 618 // *Astrophys. J.* – 2001. – V. 546. – P. L127-L130.
3. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S. High resolution ro-vibrational analysis of interacting bands ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} of $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$: *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, Vol. 49A, No.2. – 2016 г.
4. Watson K.G Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules: *J. Chem. Phys.* V. 46. – 1967. – 1949 p.
5. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Aslapovskaya Yu.S., Horneman V.M., High resolution spectroscopic study of C_2H_4 : Re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} vibrational bands // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* – 2013. – V. 118. – P. 14-25.