

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 530.145

*Ю.В. КОНОВА¹, И.А. КОНОВ², А.Г. ЗЯТКОВА¹***АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ
МОЛЕКУЛЫ $C_2H_2D_2$ -cis В ДИАПАЗОНЕ 1620–1780 cm^{-1} ***

Спектр молекулы cis-этилен-d2 ($C_2H_2D_2$ -cis) зарегистрирован на фурье-спектрометре Bruker IFS 120 HR в диапазоне длин волн 1100–2000 cm^{-1} с разрешением 0.0025 cm^{-1} . Рассмотрен диапазон 1620–1780 cm^{-1} , в котором расположены слабые полосы $2\nu_7$ (A_1) и $\nu_6+\nu_{10}$ (B_1) с центрами (1685.28900±0.00069 cm^{-1}) и (1698.06400±0.00033) cm^{-1} , которые ранее не анализировались и исследованы в данной работе впервые. В фитинге спектроскопических параметров было использовано 164 значения энергии верхних уровней, принадлежащие состояниям ($\nu_7 = 2, A_1$) и ($\nu_6 = \nu_{10} = 1, B_1$). В результате получены десять параметров диагональных блоков гамильтониана, описывающие колебательно-вращательные структуры полос $2\nu_7$ и $\nu_6+\nu_{10}$, а также пять резонансных параметров c -типа Кориолиса.

Ключевые слова: молекула $C_2H_2D_2$ -cis, этилен, эффективный гамильтониан.

Введение

Этилен (C_2H_4) известен как молекула, представляющая интерес для изучения атмосфер планет Солнечной системы (в частности, он был обнаружен в составе атмосферы Юпитера, Сатурна и Нептуна). Полученные точные данные о молекуле этилена и его изотопологов пополняют и улучшают базу спектроскопических данных HITRAN. На протяжении нескольких лет проводится анализ спектров молекулы $C_2H_2D_2$ -cis. Изучение изотопологов необходимо не только для пополнения баз данных, но и для создания полной спектроскопической картины о материнской молекуле – молекуле C_2H_4 . Для точного определения внутримолекулярной потенциальной функции этилена необходимо иметь большое количество спектроскопической информации о всех изотопологах этой молекулы, так как они обладают более низкой симметрией, что приводит к существенно большему объему получаемых спектроскопических данных.

Данное исследование является продолжением работ [1, 2] (см. также цитированную там литературу), выполняемых в группе молекулярной спектроскопии Томского политехнического университета по исследованию тонкой структуры спектров различных изотопических модификаций этилена. Что касается молекулы $C_2H_2D_2$ -cis, к настоящему времени авторами уже были выполнены исследования колебательно-вращательных спектров этой молекулы в диапазонах 600–1100 cm^{-1} [3–5] и 1200–1450 cm^{-1} [6]. В этих диапазонах расположены фундаментальные полосы: ν_3 , ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , ν_{10} , ν_{12} , а также обертоновая полоса $2\nu_{10}$. На основе данных, полученных из интерпретации различного типа полос, были улучшены параметры основного колебательного состояния, что позволяет проводить точный анализ спектров. Ранее спектры молекулы $C_2H_2D_2$ -cis исследовались также в работах Крауфорда и др. [7], Хегелунда и Николайсена [8], Тана с соавторами [9–11]. Однако исследование инфракрасных спектров молекулы $C_2H_2D_2$ -cis в диапазоне 1620–1780 cm^{-1} , а именно полос $2\nu_7$ и $\nu_6+\nu_{10}$, ранее не выполнялось.

В данной работе приведены результаты впервые выполненного исследования полос $2\nu_7$ и $\nu_6+\nu_{10}$ колебательно-вращательного спектра $C_2H_2D_2$ -cis, зарегистрированного с разрешением 0.0025 cm^{-1} . Обратная задача была решена с учетом влияния резонанса Кориолиса c -типа между состояниями. В результате интерпретации и решения обратной задачи с использованием 261 перехода, относящегося к полосе $2\nu_7$, и 456 переходов, относящихся к полосе $\nu_6+\nu_{10}$, были определены десять параметров диагональных блоков и пять резонансных параметров.

Данные эксперимента

Для теоретического анализа экспериментальных данных использовался инфракрасный спектр, зарегистрированный в диапазоне длин волн 1100–2000 cm^{-1} . Регистрация спектра молеку-

* Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00116 мол_а.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>