

УДК 530.145

А.Л. ФОМЧЕНКО<sup>1</sup>, А.В. КУЗНЕЦОВ<sup>1</sup>, Ф. ЧЖАН<sup>1</sup>, О.В. ГРОМОВА<sup>1</sup>, Е. ПАШАЯН-ЛЕРУА<sup>1,2</sup>**ИССЛЕДОВАНИЕ ФУРЬЕ-СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОС  $\nu_9$  И  $\nu_2+\nu_7+\nu_8$  МОЛЕКУЛЫ  $C_2D_4$ \***

Проводится исследование фурье-спектров молекулы  $C_2D_4$  в диапазоне 2250–3040  $cm^{-1}$ , где расположены фундаментальная полоса  $\nu_9$  и комбинационная полоса  $\nu_2+\nu_7+\nu_8$ . Анализ экспериментальных данных позволил определить параметры эффективного гамильтониана состояний ( $\nu_9 = 1$ ) и ( $\nu_2 = \nu_7 = \nu_8 = 1$ ) молекулы  $C_2D_4$ .

**Ключевые слова:** этилен, колебательно-вращательные спектры, параметры гамильтониана молекулы.

**Введение**

В физике и химии существует множество как чисто теоретических, так и прикладных задач, для которых необходима точная информация, извлекаемая из колебательно-вращательных спектров различных изотопозамещенных модификаций молекул. В частности, одной из наиболее важных проблем физической химии является точное определение внутримолекулярной потенциальной функции. Знание корректной потенциальной функции имеет решающее значение при решении уравнения Шредингера для молекулы, которое позволит определить набор значений энергии и собственных волновых функций. В свою очередь, эта информация позволяет решать многочисленные проблемы физической химии, астрофизики, планетологии, атмосферной оптики и т.д. [1–13]. Одним из наиболее эффективных способов точного определения потенциальной функции молекулы является ее вычисление с помощью *ab initio* методов с последующей калибровкой результатов на основе высокоточных экспериментальных колебательно-вращательных данных (см., например, [14–16]). Таким образом, чем большее число экспериментальных данных о колебательно-вращательных полосах было зарегистрировано, проанализировано и затем использовано (особенно для высоковозбужденных состояний), тем более точные результаты можно получить. Стоит также отметить, что в приближении Борна – Оппенгеймера потенциальная функция остаётся неизменной при любой изотопической замене составляющих молекулу атомов, поэтому другой способ улучшить точность потенциальной функции – это использовать данные о различных изотопологах рассматриваемой молекулы.

Настоящая работа является продолжением работ по исследованию инфракрасных спектров высокого разрешения молекулы  $C_2H_4$  и ее различных изотопологов, выполненных в последние годы в Томском политехническом университете [17–19], и направлена на высокоточное определение спектроскопических параметров как можно большего числа колебательно-вращательных состояний различных изотопологов этилена.

Предметом исследования в данной работе является молекула  $C_2D_4$ . Приводится анализ фурье-спектров двух полос: фундаментальной полосы  $\nu_9$  и комбинационной полосы  $\nu_2+\nu_7+\nu_8$ . На основе анализа экспериментальных данных рассматривается задача определения параметров колебательно-вращательного гамильтониана состояний ( $\nu_9 = 1$ ) и ( $\nu_2 = \nu_7 = \nu_8 = 1$ ).

Полоса  $\nu_9$  уже была исследована ранее [20]. В данной работе проведена интерпретация спектра до больших значений квантовых чисел  $J$  и  $K_a$  и на основе полученной экспериментальной информации улучшены значения параметров гамильтониана состояния ( $\nu_9 = 1$ ). Полоса  $\nu_2+\nu_7+\nu_8$  исследуется впервые. Линии в спектре данной полосы обладают малыми интенсивностями, что, в свою очередь, приводит к проблеме интерпретации такого рода полос.

**Детали эксперимента**

Три экспериментальных спектра в диапазоне 2200–3040  $cm^{-1}$  были зарегистрированы на фурье-спектрометре Bruker IFS-120 HR в Техническом университете Брайншвейга (г. Брауншвейг, Германия) в многоходовой ячейке Уайта (длина пути поглощения – 4 м). Экспериментальные условия приведены в табл. 1. Были использованы: Globar в качестве источника излучения, бромид –

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 18-02-00819 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>