

УДК 530.145

DOI: 10.17223/00213411/63/3/10

А.Г. ЗЯТКОВА, А.Б. ГИНИЯТОВА, Ю.В. КОНОВА

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ ПОЛОСЫ ν_9 ТРАНС-КОНФОРМЕРА ЭТИЛЕНА *

Впервые определены значения интенсивностей 740 колебательно-вращательных линий поглощения фундаментальной полосы ν_9 в инфракрасном спектре молекулы транс- $C_2H_2D_2$. Для описания контура линии использовался профиль Армана – Тран. С применением метода комбинационных разностей и теории изотопозамещения определено более 2700 спектральных переходов. Рассматриваются особенности уширения спектральных линий, влияние параметров профиля Армана – Тран на точность воспроизведения контура линии.

Ключевые слова: профиль Армана – Тран, интенсивность колебательно-вращательной линии, дейтерированный изотополог этилена.

Введение

С точки зрения спектроскопии, этилен представляет собой наиболее простой алкен, имеющий вид молекулы плоского асимметричного волчка. Этилен, попадая в земную атмосферу, выступает в роли тропосферного загрязнителя [1] в процессе лесных пожаров, естественного цикла растений, выбросов выхлопных газов от автомобилей и т.п. Фотохимические реакции этилена с молекулярным кислородом, гидроксильным радикалом и озоном приводят к образованию формальдегида, закиси азота и муравьиной кислоты [2], т.е. веществ, крайне опасных для здоровья человека. Молекула этилена была также обнаружена как побочный продукт фотохимии метана в атмосферах планет Юпитера [3], Сатурна [4] и Нептуна, а также спутника Сатурна – Титана [5–7].

Объектом исследования настоящей работы является молекула транс- d_2 -этилен. Актуальность исследования дейтерированной модификации обусловлена необходимостью точного определения отношения D/H, что позволяет реализовать тестовые модели расчета химической и физической эволюции галактик и получить информацию об условиях и процессах в различных частях Вселенной [8]. В работе [9] описаны исследования состава темных туманностей. Результаты показали, что отношение количества дейтерированных молекул XD к гидрогенизированным аналогам ХН составляет более чем $2 \cdot 10^{-5}$. Поэтому изучение дейтерированных модификаций при исследованиях компонентного состава темных туманностей является важным [8].

Для решения задач астрофизики и атмосферной оптики большое значение имеют данные об интенсивностях полос и отдельных линий в ИК-спектре. К примеру, в работе [3] говорится, что при исследовании состава и химических, термических и динамических процессов, происходящих в атмосферах планет, и, следовательно, для изучения их эволюции необходимо обладать высокоточной информацией о молекулярном содержании и концентрации как можно большего числа молекул и их менее распространенных модификаций. Хорошо известно [10], что концентрация, давление и температура среды, а также парциальное давление компонентов газовой смеси связаны друг с другом и могут быть определены из интенсивностей спектральных линий молекул.

Как показал анализ литературы для молекулы этилена и ее изотопологов, исследований интенсивностей значительно меньше [10–12], чем для положений линий [13–20].

В связи с недостатком информации об интенсивностях колебательно-вращательных линий в спектрах молекулы этилена и ее изотопологов цель работы – определение положений и экспериментальных значений коэффициентов поглощений линий полосы ν_9 транс-конформера этилена.

1. Предмет исследования и детали эксперимента

Предмет исследования настоящей работы – полоса ν_9 , локализованная в диапазоне 2800–3300 cm^{-1} в спектре одного из дейтерированных изотопологов этилена (молекула транс- $C_2H_2D_2$). Ранее энергетическая задача для данной полосы решалась в работе [18]. В ней спектр был зарегистрирован с помощью решеточного спектрометра Beckman IR-9 с разрешением 0.3–0.5 cm^{-1} .

* Исследование выполнено за счет грантов РФФИ (проекты № 18-02-00819 А и 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>