

УДК 530.145

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ C_2H_3D

П.А. Глушков

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н., Е.С. Бехтерева
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: pag14@tpu.ru

DETRMINATION OF THE PARAMETERS OF THE GROUND STATE OF C_2H_3D MOLECULE

P.A. Glushkov

Научный руководитель: Prof., Dr. E.S. Bekhtereva
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: pag14@tpu.ru

Abstract. Present study dedicated to analysis of C_2H_3D molecule spectra and determination of the parameters of the ground vibrational state of the molecule. In total, positions of more than 10000 transitions were determined. 1037 ground state combination differences were used to improve ground state parameters of the molecule.

Введение. Одной из важных задач молекулярной спектроскопии высокого разрешения являются спектроскопические исследования молекулы этилена C_2H_4 , которые проводятся на протяжении многих лет [1]. Эту молекулу обнаруживали в атмосферах различных планет солнечной системы [2] и различных объектов за ее пределами. Определенная доля этилена попадает в атмосферу Земли в результате деятельности человека. Поэтому четкое определение линий поглощения этилена в спектрах смеси газов является необходимым и требует выполнения высоко-точных исследований спектров этилена. Помимо сбора и обработки экспериментальной информации как таковой, важной целью является получение параметров потенциальной функции молекулы. Для определения параметров и построения функции потенциальной энергии необходима информация не только о материнской молекуле, но и ее изотопологах. Изотополог C_2H_3D представляет интерес ввиду недостатка имеющейся в настоящее время высокоточной информации о положениях линий и их интенсивностях в спектрах поглощения. Максимальные квантовые числа J и K_a при анализе спектров в предыдущих работах [3] составляют 35 и 20 соответственно.

Таким образом, целью данной работы, является анализ фундаментальных полос ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , ν_{10} молекулы C_2H_3D , а именно, на основе данных интерпретации необходимо определить комбинационные разности и улучшить параметры основного колебательного состояния молекулы C_2H_3D .

Экспериментальная часть. Для проведения исследований были зарегистрированы несколько спектров. Первый спектр, обозначенный как «018» записан на Фурье-спектрографе Bruker125HR в техническом университете Бруншвейга, Германия. Разрешение спектра составило $0,0015\text{ см}^{-1}$, при этом количество сканов составило 1000 при длине пути 4 метра. Температура в ячейке при регистрации поддерживалась на уровне $21,9 \pm 0,1\text{ }^\circ\text{C}$, давление 0,04 мбар. В газовой смеси, помимо исследуемой молекулы содержались углекислый газ и вода в количестве не более 0,1% от общего объема вещества. Подобная чистота образца газа (99,9%) превосходит уровень чистоты в известных ранее работах (98%),

что также играет роль в улучшении качества получаемой информации. Данный спектр отлично подходит для изучения таких полос как ν_7 , ν_8 , ν_4 .

Спектр «019» во многом похож на спектр «018», но главным отличием является почти десятикратное увеличение давления. Такое увеличение давления отлично подходит для исследования интенсивностей линий в полосе ν_{10} , но в том числе было использовано для анализа более слабых линий в убывающих ветвях сильных полос, линий с большими значениями квантового числа J.

Результаты. В результате анализа полос ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , ν_{10} были определены положения более 10000 линий. Максимальные квантовые числа J и K_a проинтерпретированных линий составили 42 и 28 соответственно, для полос ν_4 и ν_6 . Для всех полос в данной работе удалось превзойти предыдущие показатели по обоим квантовым числам. Также были улучшены параметры основного колебательного состояния молекулы. Для этого были использованы комбинационные разности в количестве 1037, полученные из анализа экспериментальных спектров. Получены константы основного состояния вплоть до вкладов, содержащих степени операторов углового момента 6 порядка. В таблице 1 представлены параметры основного колебательного состояния, рассчитанные на основе микроволновых данных в работе [4], определенные авторами работы [5] и расчет из экспериментальных данных настоящей работы. Из данных таблицы видно, что количество переходов, вовлеченных в фитинг в данной работе в два раза уступает количеству переходов, используемых в работе [5], однако качество спектров и большие значения квантовых чисел при интерпретации обеспечивают преимущество новых параметров. Более того, рассчитанное среднеквадратичное отклонение при восстановлении параметров основного состояния улучшилось на порядок в сравнении с предыдущей работой.

Таблица 1

Список параметров основного состояния молекулы C_2H_3D . Единицы измерения cm^{-1}

Параметр	Микроволновые данные [4]	Значение из работы [5]	Экспериментальные результаты
A	4,005888(2)	4,0058896(8)	4,00588802(17)
B	0,9163250(9)	0,9163247(2)	0,916325131(41)
C	0,7437726(6)	0,7437730(2)	0,743772350(53)
$\Delta_J \times 10^5$	0,130(2)	0,12941(5)	0,129547(15)
$\Delta_{JK} \times 10^5$	0,60(2)	0,6023(6)	0,60440(12)
$\Delta_K \times 10^4$	0,706(1)	0,7069(3)	0,704840(22)
$\delta_J \times 10^6$	0,28(2)	0,2839(2)	0,284258(88)
$\delta_K \times 10^5$	0,81(1)	0,789(2)	0,8108(11)
$H_J \times 10^{11}$	-	0,21(5)	0,320(13)
$H_{JK} \times 10^{10}$	-	0,58(8)	0,168(24)
$H_{KJ} \times 10^9$	-	-0,53(5)	-0,760(82)
$H_K \times 10^8$	-	0,70(4)	0,5332(60)
$h_J \times 10^6$	-	-	0,293(61)
$h_{JK} \times 10^6$	-	-	0,1180(83)
$h_K \times 10^6$	-	-	0,1354(79)
Количество инфракрасных переходов	-	2026	1037
Среднеквадратичное отклонение	-	0,00047	0,000062

Заключение. В работе выполнен анализ пяти фундаментальных полос поглощения ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , ν_{10} . Благодаря уникальным современным спектрам удалось существенно пополнить информацию о возможном поглощении молекулы C_2H_3D в диапазоне 600-1500 cm^{-1} . На основе экспериментальных переходов с основного колебательного на возбужденные колебательно-вращательные уровни определены с высокой точностью 1037 комбинационных разностей, послуживших входящей информацией для улучшения параметров основного колебательного состояния. Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ № 290-М.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ulenikov O.N. et al. Extended analysis of the lowest bands of $12C_2H_4$: Line strengths, widths, and shifts in the ν_7 , ν_{10} , and ν_4 bands // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. – 2019. – V. 239. – P. 106657
2. Stern S.A. et al. The Pluto system: Initial results from its exploration by New Horizons // *Science*. – 2015. – V. 350. – No. 6258. – P. aad1815
3. Tan T.L., Lebron G.B. The high-resolution FTIR spectrum of the ν_6 band of C_2H_3D // *Journal of Molecular Spectroscopy*. – 2010. – V. 263., №. 2. – P. 160-165.
4. Hirota E. et al. Microwave spectra of deuterated ethylenes: Dipole moment and rz structure // *Journal of Molecular Spectroscopy*. – 1981. – V. 89., No. 1. – P. 223-231.
5. Lebron G.B., Tan T.L. Improved rovibrational constants for the ν_{12} band of C_2H_3D // *Journal of Molecular Spectroscopy*. – 2011. – V. 265., №. 1. – P. 55-57.