

ВРАЩАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР ТРАНС-КОНФОРМЕРА МОЛЕКУЛЫ $(CD_3)_2CDOH$ В САНТИМЕТРОВОМ И МИЛЛИМЕТРОВОМ ДИАПАЗОНАХ ДЛИН ВОЛН

Ч.О. КАДЖАР, С.А. МУСАЕВ, Э.Ч. САИДОВ

Институт Фотозлектроники АН Азербайджана

370141, Баку, ул. Ф. Агаева, 555 квартал

Идентифицирован 161 спектральный переход вращательного спектра транс-конформера молекулы $(CD_3)_2CDOH$. Спектр поглощения регистрировался радиоспектрометром со штарковской модуляцией и модуляцией по двойным РЧ-МВ резонансам в диапазоне частот 17500 – 79050 МГц. Для теоретического описания вращательного спектра использован гамильтониан Ватсона А-редукции с включением в обработку всех квартичных параметров центробежного возмущения. Полученные уточненные спектроскопические параметры исследуемой молекулы, корреляционная матрица этих параметров, а также рассчитанные определяемые комбинации спектроскопических параметров для всех трех осевых представлений, подтверждающие корректность процесса идентификации, позволяют с высокой точностью описывать вращательный спектр указанной молекулы.

Регистрация спектра поглощения транс-конформера молекулы $(CD_3)_2CDOH$ в сантиметровом диапазоне длин волн, идентификация вращательных переходов и исследование центробежных возмущений во вращательном спектре этой молекулы впервые были осуществлены в работе [1]. Однако, количество спектроскопических постоянных и точность их определения оказались недостаточными для описания спектральных линий, попадающих в миллиметровый диапазон длин волн и для линий с высокими значениями J . В этой связи естественно продолжение исследований в миллиметровой области спектра, куда к тому же попадает большое количество достаточно интенсивных переходов разных ветвей.

Для идентификации линий поглощения, зарегистрированных в области миллиметровых волн на радиоспектрометре с модуляцией по двойным квантовым резонансам и электрической молекулярной модуляцией (штарковская модуляция) [2, 3], первоначально по известным спектроскопическим постоянным молекулы $(CD_3)_2CDOH$ [1] был рассчитан вращательный спектр, попадающий в указанную область миллиметрового диапазона, а также спектральных линий, попадающих в диапазон частот 0.5-200.0 МГц с целью обнаружения трехуровневых и четырехуровневых квантовых систем для проведения экспериментов двойного радиочастотного-микроволнового резонанса. В процедуру определения спектроскопических постоянных указанной молекулы были вовлечены частоты линий поглощения, подтвержденные экспериментами по регистрации сигналов двойных радиочастотных-микроволновых резонансов.

На первом этапе в процедуру подгонки было вовлечено более 350 линий с вращательным квантовым числом до $J = 32$, что было обусловлено обнаружением сигналов двойных РЧ-МВ резонансов для вращательных переходов вплоть до указанного значения J .

В процессе осуществления процедуры подгонки и регистрации сигналов двойных резонансов обнаружилось некоторые четырехуровневые системы, характерные для спектра молекул типа асимметричных волчков с наибольшей асимметрией, в которых расстояние между уровнями вращательной энергии для одной пары уровней составляет несколько десятков-сотен кГц и одновременно для другой пары уровней эта разность составляет величину ширины линии поглощения, обусловленной различными механизмами уширения, в том числе модуля-

ционного уширения вследствие штарковской модуляции [4, 5]. В частном случае, когда частота штарковской модуляции в используемом радиоспектрометре составляет 100 кГц, и модуляционное уширение составляет величину 300 – 400 кГц и оказывается одного порядка с разностью уровней вращательной энергии для первой пары, наблюдается эффективная накачка населенности верхнего уровня этой пары, за счет чего происходит перераспределение населенностей, что делает невозможным точное измерение частоты центров линий поглощения за счет непосредственного насыщения этих уровней. При этом частота центра линии поглощения начинает зависеть от уровня напряженности штарковского поля, в данном случае играющего роль источника накачки.

В качестве примера можно показать четырехуровневую систему $7_{2,6} - 7_{1,7}$ и $7_{1,6} - 7_{0,7}$ в спектре исследуемой молекулы (рис.), в которой расстояние между уровнями

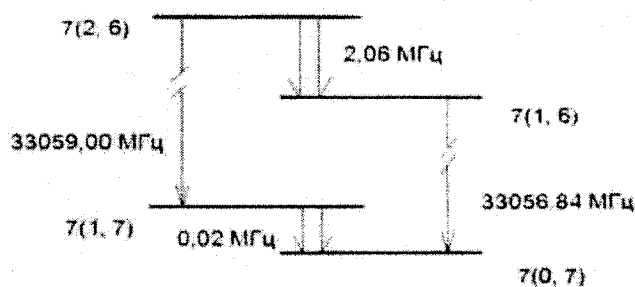


Рис. Схема вращательных уровней четырехуровневой квантовой системы в спектре молекулы $(CD_3)_2CDOH$.

$7_{1,7}$ и $7_{0,7}$ составляет 0.02 МГц, а между уровнями $7_{2,6}$ и $7_{1,6}$ - 2.06 МГц. При накачке перехода $7_{2,6} - 7_{1,6}$ на частоте 2.06 МГц в режиме двойного РЧ-МВ резонанса наблюдаются переходы $7_{2,6} - 7_{1,7}$ и $7_{1,6} - 7_{0,7}$ на частотах 33059.00 МГц и 33056.84 МГц, соответственно. В режиме штарковской модуляции измерение частот этих переходов дает следующие значения - 33060.15 МГц и 33057.73 МГц, соответственно. Разница в значениях частот спектральных линий этих переходов для двух режимов регистрации спектра поглощения составляет величину около 1 МГц. Этот эффект при прочих равных условиях можно, по-видимому, объяснить зависимостью значений центров линий поглощения в таких квантовых системах от величины штарковского модулирующего напряжения, кото-

рая в условиях используемого радиоспектрометра при принятой частоте модуляции 100 кГц играет роль накапливающего излучения по переходу $7_{1,7} - 7_{0,7}$ с частотой 0.02 МГц, то есть мы фактически наблюдаем сигнал двойного РЧ-МВ резонанса в режиме штарковской модуляции. Безусловно и то, что этот эффект требует детального теоретического рассмотрения, так как встречается в спектре этой молекулы достаточно часто и вынуждает исключать из процедуры обработки спектра переходы, в которых наблюдается упомянутый эффект паразитного

двойного резонанса. В дальнейшем, для измерения частот таких переходов предполагается существенно понизить частоту штарковской модуляции и изменить рабочую схему радиоспектрометра, что выходит за рамки настоящей работы.

Для описания наблюдаемого вращательного спектра поглощения исследуемой молекулы был использован гамильтониан Ватсона А-редукции [6] с отсеченными секстичными термами центробежного возмущения:

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} (\tilde{X} - \tilde{Y})J^2 + [\tilde{Z} - \frac{1}{2} (\tilde{X} + \tilde{Y})]J^2 - \Delta_J J^4 - \Delta_{JK} J^2 J_z^2 - \Delta_K J_z^4 + \frac{1}{2} (\tilde{X} - \tilde{Y})J^2 J_{XY}^2 - 2\delta_J J^2 J_{XY}^2 - \delta_K (J_z^2 J_{XY}^2 + J_{XY}^2 J_z^2)$$

где $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{Z}$ - вращательные постоянные; $\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_J, \delta_K$ - кватеричные постоянные центробежного искажения; J_X, J_Y, J_Z - компоненты полного углового момента J в произвольной системе координат x, y, z ; $J^2 = J(J + 1)$, $J_{XY}^2 = J_X^2 + J_Y^2$.

Определение постоянных гамильтониана осуществлялось подгонкой рассчитанных с помощью этого гамильтониана частот линий поглощения к экспериментально наблюдаемым значениям частот методом наименьших квадратов. В результате этой процедуры для всех трех осевых представлений были рассчитаны спектроскопические постоянные исследуемой молекулы, с учетом того, что ошибки в определении кватеричных параметров становились, как минимум на порядок, меньшими значений самих кватеричных параметров. Если учесть, что экспе-

риментальная ошибка измерения, обеспечиваемая системой регистрации и измерения частоты радиоспектрометра, равна 0.1 - 0.15 МГц, то достигнутая величина взвешенного среднеквадратичного отклонения процедуры подгонки 0.095 МГц находится в пределах экспериментальной точности измерения частот центров линий. Такой критерий точности результатов подгонки представляется достаточно корректным в рамках отношения величин ошибок вычислений и измерений.

В таблице 1 приводятся значения спектроскопических параметров, погрешностей их расчета для всех трех осевых представлений при включении в процедуру подгонки линий до $J=25$ включительно. Можно видеть, что разница в значениях вращательных и центробежных постоянных в разных осевых представлениях лежит в пределах ошибок их вычислений.

Таблица 1

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ	ОСЕВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ I'	ОСЕВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ II'	ОСЕВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ III'
A (МГц)	6006,3365 (0,0030)	3915,4290 (0,0029)	7035,7533 (0,0029)
B (МГц)	3915,4272 (0,0029)	7035,7577 (0,0029)	6006,3378 (0,0030)
C (МГц)	7035,7542 (0,0029)	6006,3313 (0,0030)	3915,4268 (0,0029)
Δ_J (кГц)	2,3562 (0,0264)	2,7915 (0,0263)	4,2391 (0,0262)
Δ_{JK} (кГц)	-0,4974 (0,0056)	-1,8037 (0,0077)	-6,1462 (0,0071)
Δ_K (кГц)	2,8156 (0,0058)	2,8160 (0,0058)	2,8155 (0,0058)
δ_J (кГц)	0,7238 (0,0007)	-0,9414 (0,0011)	0,2176 (0,0012)
δ_K (кГц)	1,1929 (0,0028)	-0,3343 (0,0022)	-1,8437 (0,0112)

В таблице 2 приводятся значения спектроскопических параметров и корреляционная матрица этих параметров во втором осевом представлении.

Для окончательного подтверждения корректности результатов расчетов во всех осевых представлениях были рассчитаны так называемые определяемые комбинации

спектроскопических параметров (таблица 3), являющиеся линейными комбинациями этих спектроскопических параметров [6]. Размерность определяемого параметра T_2 составляет Γ^2 . В этой связи, для приведения в соответствие размерностей всех определяемых комбинаций, значение T_2 умножено на коэффициент $1/(A+B+C)$.

Таблица 2

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ II'	КОРРЕЛЯЦИОННАЯ МАТРИЦА СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ II' ОСЕВОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ
A = 3915,4290 МГц	1,00
B = 7035,7577 МГц	0,90 1,00
C = 6006,3313 МГц	0,95 0,87 1,00
Δ_J = 2,7915 кГц	0,91 0,87 0,87 1,00
Δ_{JK} = -1,8037 кГц	0,01 0,09 0,18 -0,04 1,00
Δ_K = 2,8160 кГц	0,00 0,03 -0,08 0,04 -0,93 1,00
δ_J = -0,9414 кГц	0,21 -0,18 0,17 0,07 0,50 -0,64 1,00
δ_K = -0,3343 кГц	-0,10 0,07 -0,06 -0,03 -0,46 0,55 -0,64 1,00

Таблица 3

ОПРЕДЕЛЯЕМЫЕ КОМБИНАЦИИ ПАРАМЕТРОВ	ОСЕВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ I'	ОСЕВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ II'	ОСЕВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ III'
A (МГц)	7035,7589	7035,7589	7035,7589
B (МГц)	6006,3369	6006,3369	6006,3369
C (МГц)	3915,4353	3915,4353	3915,4353
T _{aa} (кГц)	-4,6744	-4,6745	-4,6743
T _{bb} (кГц)	-3,8038	-3,8038	-3,8038
T _{cc} (кГц)	-0,9084	-0,9085	-0,9086
T ₁ (кГц)	-6,5711	-6,5708	-6,5711
T ₂ (кГц)	-1,9742	-1,9743	-1,9743

Значения рассчитанных определяемых комбинаций спектроскопических параметров не зависят от выбора осевого представления, и степень их равенства друг другу во всех трех осевых представлениях является критерием объективной оценки процедуры подгонки спектроскопических параметров в разных осевых представлениях. Вследствие включения в процедуру подгонки большого количества переходов в сантиметровом и миллиметровом диапазонах длин волн, разброс значений определяемых комбинаций спектроскопических параметров

во всех трех осевых представлениях оказался минимальным.

В таблице 4 приводится перечень идентифицированных вращательных переходов со значениями экспериментально измеренных частот центров линий и их разностями с рассчитанными значениями частот этих переходов во втором осевом представлении, а также частоты переходов радиочастотной накачки, которые использовались для подтверждения корректности идентификации исследуемого спектра.

Таблица 4

JU _{ка, кс} - JL _{ка, кс}	ЭКСП./ МГц	ЭКСП. - РАСЧ., МГц II'	ПЕРЕХОД РЧ НАКАЧКИ (МГц)
1	2	3	4
2 0, 2- 1 1, 1	17455,91	-0,07	
2 2, 0- 1 1, 1	28471,66	0,12	
2 1, 2- 1 0, 1	18781,95	-0,04	
3 1, 3- 2 0, 2	26229,81	0,08	3 _{1,3} - 3 _{0,3} 56,15
3 0, 3- 2 1, 2	25876,92	-0,08	3 _{1,3} - 3 _{0,3} 56,15
4 3, 2- 3 2, 1	47453,52	0,04	
4 0, 4- 3 1, 3	33849,37	-0,06	4 _{1,4} - 3 _{0,4} 8,75
4 4, 1- 3 3, 0	53985,61	-0,01	
5 3, 2- 4 2, 2	62681,30	0,00	
5 3, 3- 5 2, 4	17927,53	-0,06	
5 2, 4- 4 1, 3	47080,22	0,09	
5 4, 1- 4 3, 2	67895,97	-0,08	
5 5, 0- 4 4, 1	68761,82	0,12	
5 5, 1- 4 4, 0	68339,70	0,07	
6 3, 3- 5 2, 3	75682,25	-0,14	
6 1, 6- 5 0, 5	49540,48	-0,02	5 _{1,5} - 5 _{0,5} 1,23
6 2, 4- 6 1, 5	22345,11	0,00	
6 4, 3- 6 3, 4	18293,16	-0,06	
6 5, 2- 5 4, 1	77480,00	0,05	
6 3, 4- 5 2, 3	60734,39	0,13	
6 4, 3- 5 3, 2	69218,80	0,15	
6 4, 3- 5 3, 3	77690,68	-0,15	
7 1, 7- 6 0, 6	57369,82	0,03	
7 4, 4- 7 3, 5	22583,25	0,07	
7 6, 2- 7 5, 3	19337,10	-0,13	
7 1, 6- 6 2, 5	62481,46	-0,03	6 _{2,5} - 6 _{1,5} 13,17
7 2, 6- 6 1, 5	62496,75	0,02	6 _{2,5} - 6 _{1,5} 13,17

1	2	3	4	
7 7, 0 - 7 6, 1	22225,26	0,06		
7 3, 5 - 6 2, 4	67887,45	-0,11		
7 2, 5 - 7 1, 6	27662,32	-0,03	7 2,6 - 7 1,6	2,06
8 4, 5 - 8 3, 6	27472,30	0,08		
8 3, 6 - 7 2, 5	75509,51	-0,16	8 3,6 - 8 2,6	13,93
8 2, 7 - 7 1, 6	70316,10	-0,04	7 2,6 - 7 1,6	2,06
8 2, 6 - 7 3, 5	75420,00	-0,08	8 3,6 - 8 2,6	13,93
8 4, 4 - 8 3, 5	20022,55	-0,06		
9 8, 2 - 9 7, 3	25439,50	0,15		
9 3, 6 - 9 2, 7	32511,40	-0,15	9 4,6 - 9 3,6	66,26
9 2, 7 - 9 1, 8	37982,40	0,12	9 3,7 - 9 2,7	2,34
9 5, 5 - 9 4, 6	27212,38	-0,09	9 4,6 - 9 3,6	66,26
9 4, 6 - 9 3, 7	32575,41	-0,08	9 3,7 - 9 2,7	2,34
9 0, 9 - 8 1, 8	73029,53	0,05		
9 1, 8 - 8 2, 7	78142,40	0,10		
9 1, 9 - 8 0, 8	73029,53	0,05		
9 9, 1 - 9 8, 2	29739,60	0,01		
10 6, 5 - 10 5, 6	27073,04	0,16		
10 4, 6 - 10 3, 7	31989,15	-0,14	10 4,7 - 10 3,7	12,72
11 10, 2 - 11 9, 3	32428,16	-0,09		
11 4, 7 - 11 3, 8	37329,81	0,03	11 5,7 - 11 4,7	54,15
11 3, 8 - 11 2, 9	42869,91	0,10	11 4,8 - 11 3,8	2,24
11 6, 6 - 11 5, 7	31838,28	0,03	11 5,7 - 11 4,7	54,15
11 4, 8 - 11 3, 9	42871,97	-0,02	11 4,8 - 11 3,8	2,24
11 1, 10 - 11 0, 11	53508,49	0,03		
11 2, 9 - 11 1, 10	48230,24	0,04		
11 7, 5 - 11 6, 6	27216,40	0,01		
11 3, 9 - 11 2, 10	48230,37	0,12		
11 2, 10 - 11 1, 11	53508,49	0,03		
11 10, 1 - 11 9, 2	32222,95	-0,05		
12 10, 3 - 12 9, 4	31423,45	-0,13		
12 6, 7 - 12 5, 8	36955,39	-0,02		
12 5, 8 - 12 4, 9	42560,60	-0,13		
12 5, 7 - 12 4, 8	36775,05	-0,01		
12 4, 8 - 12 3, 9	42550,34	-0,04		
12 9, 4 - 12 8, 5	27926,23	-0,03		
12 7, 6 - 12 6, 7	31511,10	0,06		
12 4, 9 - 12 3, 10	48010,70	-0,07		
12 3, 10 - 12 2, 11	53347,78	0,13		
12 2, 11 - 12 1, 12	58618,12	0,04		
12 3, 9 - 12 2, 10	48010,43	0,02		
12 2, 10 - 12 1, 11	53347,78	0,13		
12 1, 11 - 12 0, 12	58618,12	0,04		
13 8, 5 - 13 7, 6	18744,95	0,10		
13 5, 8 - 13 4, 9	42123,11	-0,15	13 5,9 - 13 4,9	1,95
13 7, 7 - 13 6, 8	36469,71	-0,02	13 6,8 - 13 5,8	42,36

1	2	3	4
13 _{6, 8} - 13 _{5, 9}	42163,57	-0,15	13 _{5,9} - 13 _{4,9} 1,95
13 _{5, 9} - 13 _{4, 10}	47728,60	-0,01	13 _{6,8} - 13 _{5,8} 42,36
13 _{3, 10} - 13 _{2, 11}	53141,96	-0,02	
13 _{10, 4} - 13 _{9, 5}	30687,13	-0,13	
13 _{4, 10} - 13 _{3, 11}	53141,96	-0,08	
13 _{3, 11} - 13 _{2, 12}	58462,81	0,16	
13 _{10, 3} - 13 _{9, 4}	27091,70	0,05	
14 _{8, 7} - 14 _{7, 8}	35991,63	0,12	14 _{7,8} - 14 _{6,8} 143,84
14 _{7, 8} - 14 _{6, 9}	41675,74	-0,02	14 _{6,9} - 14 _{5,9} 8,56
14 _{6, 9} - 14 _{5, 10}	47371,31	-0,18	
14 _{3, 12} - 14 _{2, 13}	63575,87	0,02	
14 _{4, 11} - 14 _{3, 12}	58267,69	-0,06	
14 _{8, 6} - 14 _{7, 7}	25066,84	-0,09	
14 _{3, 11} - 14 _{2, 12}	58267,69	-0,05	
14 _{2, 12} - 14 _{1, 13}	63575,95	0,10	
14 _{10, 5} - 14 _{9, 6}	30836,29	0,15	
15 _{7, 9} - 15 _{6, 10}	46927,09	-0,16	15 _{6,10} - 15 _{5,10} 1,60
15 _{3, 13} - 15 _{2, 14}	68687,72	0,10	
15 _{4, 11} - 15 _{3, 12}	58026,10	-0,14	
15 _{3, 12} - 15 _{2, 13}	63389,46	0,09	
15 _{2, 13} - 15 _{1, 14}	68687,72	0,10	
15 _{4, 12} - 15 _{3, 13}	63389,46	0,09	
15 _{8, 8} - 15 _{7, 9}	41109,58	0,00	
16 _{7, 10} - 16 _{6, 11}	52161,62	0,01	16 _{7,10} - 16 _{6,10} 6,61
16 _{4, 13} - 16 _{3, 14}	68507,92	0,03	
16 _{3, 13} - 16 _{2, 14}	68507,92	0,03	
16 _{5, 11} - 16 _{4, 12}	57729,92	0,06	
16 _{5, 12} - 16 _{4, 13}	63161,94	0,10	
16 _{4, 12} - 16 _{3, 13}	63161,94	0,11	
17 _{2, 15} - 17 _{1, 16}	78907,84	-0,03	
17 _{7, 10} - 17 _{6, 11}	51653,23	-0,16	17 _{7,11} - 17 _{6,11} 1,27
17 _{6, 11} - 17 _{5, 12}	57368,50	-0,12	17 _{7,11} - 17 _{6,11} 1,27
17 _{8, 10} - 17 _{7, 11}	51675,92	-0,16	17 _{7,11} - 17 _{6,11} 1,27
17 _{4, 13} - 17 _{3, 14}	68291,49	0,01	
17 _{3, 14} - 17 _{2, 15}	73623,97	-0,02	
17 _{5, 13} - 17 _{4, 14}	68291,49	0,01	
17 _{4, 14} - 17 _{3, 15}	73623,97	-0,02	
17 _{9, 8} - 17 _{8, 9}	37657,29	0,03	
17 _{10, 7} - 17 _{9, 8}	27011,88	0,14	
17 _{5, 12} - 17 _{4, 13}	62886,70	0,09	
18 _{3, 15} - 18 _{2, 16}	78738,26	0,14	
18 _{7, 11} - 18 _{6, 12}	56929,71	-0,14	18 _{8,11} - 18 _{7,11} 4,98
18 _{8, 10} - 18 _{7, 11}	51020,80	-0,09	18 _{8,11} - 18 _{7,11} 4,98
18 _{16, 3} - 18 _{15, 4}	53135,59	-0,10	
18 _{6, 13} - 18 _{5, 14}	68032,90	-0,05	
18 _{5, 14} - 18 _{4, 15}	73416,45	-0,15	

1	2	3	4
18 4, 15 - 18 3, 16	78738,26	0,14	
18 5, 13 - 18 4, 14	68032,90	-0,04	
18 4, 14 - 18 3, 15	73416,45	-0,15	
19 9, 11 - 19 8, 12	56412,72	-0,02	19 8,12 - 19 7,12 0,98
19 5, 14 - 19 4, 15	73171,55	0,03	
19 4, 15 - 19 3, 16	78538,09	-0,06	
19 10, 10 - 19 9, 11	50411,90	0,07	
19 6, 14 - 19 5, 15	73171,55	0,03	
19 5, 15 - 19 4, 16	78538,09	-0,06	
19 11, 8 - 19 10, 9	31861,15	0,18	
20 5, 15 - 20 4, 16	78304,11	0,01	
20 10, 11 - 20 9, 12	55793,22	-0,14	20 9,12 - 20 8,12 3,68
20 6, 15 - 20 5, 16	78304,11	0,01	
20 9, 11 - 20 8, 12	55741,13	-0,18	
20 7, 13 - 20 6, 14	67363,60	-0,09	
21 8, 13 - 21 7, 14	66937,40	0,12	21 9,13 - 21 8,13 0,73
21 18, 4 - 21 17, 5	59310,27	0,16	
21 11, 11 - 21 10, 12	55070,75	0,09	
21 10, 12 - 21 9, 13	61138,88	-0,11	
21 9, 13 - 21 8, 14	66937,88	-0,10	
21 11, 10 - 21 10, 11	47553,79	0,02	
21 6, 15 - 21 5, 16	78031,68	0,02	
21 7, 15 - 21 6, 16	78031,68	0,02	
22 7, 15 - 22 6, 16	77715,90	-0,07	
22 9, 13 - 22 8, 14	66436,55	0,15	22 10,13 - 22 9,13 2,68
22 11, 12 - 22 10, 13	60488,16	0,03	22 10,13 - 22 9,13 2,68
22 10, 13 - 22 9, 14	66438,90	-0,06	22 10,13 - 22 9,13 2,68
22 11, 11 - 22 10, 12	53859,35	0,09	22 11,12 - 22 10,12 39,49
22 10, 12 - 22 9, 13	60451,07	-0,04	22 11,12 - 22 10,12 39,49
22 9, 14 - 22 8, 15	72155,13	-0,13	
22 8, 15 - 22 7, 16	77715,90	-0,08	
22 8, 14 - 22 7, 15	72155,13	0,00	
23 11, 12 - 23 10, 13	59626,36	0,08	23 11,13 - 23 10,13 8,99
23 12, 12 - 23 11, 13	59732,24	0,15	23 11,13 - 23 10,13 8,99
23 8, 15 - 23 7, 16	77351,50	-0,05	
23 10, 14 - 23 9, 15	71700,39	-0,04	
23 9, 15 - 23 8, 16	77351,50	-0,07	
24 9, 15 - 24 8, 16	76931,96	-0,12	
24 11, 13 - 24 10, 14	65151,89	0,14	24 11,14 - 24 10,14 1,93
24 10, 14 - 24 9, 15	71172,02	0,18	
25 11, 15 - 25 10, 16	76450,55	-0,01	
25 17, 9 - 25 16, 10	48512,10	0,10	

В результате включения в процесс обработки вращательного спектра транс-конформера молекулы $(CD_3)_2CDOH$ значений частот линий, попадающих в коротковолновую часть сантиметрового и миллиметрового диапазонов длин

волн, были уточнены спектроскопические параметры вращательного гамилтониана Ватсона А-редукции и идентифицирован 161 вращательный переход в спектре исследуемой молекулы.

- [1] С.А. Мусаев. Центробежное возмущение и двойные МВ-МВ и РЧ-МВ резонансы во вращательных и вращательно-колебательных спектрах молекул $(CH_3)_2CHOH$ и $(CD_3)_2CDOH$, Диссертация канд. физ.-мат. наук. М., 1983, с.170.
- [2] Ч.О. Каджар, С.А. Мусаев, Э.Ч. Саидов. Приборы и техника эксперимента, 1991, № 4, с. 171 – 173.
- [3] Ч.О. Каджар, С.А. Мусаев, Э.Ч. Саидов. Приборы и техника эксперимента, 1992, № 5, с. 130 – 135.
- [4] Ч. Таунс, А. Шавлов. Радиоспектроскопия, перевод с англ. Под ред. Н.А. Ирисовой и Б.Д. Осипова, М., ИЛ, 1959, с. 756.
- [5] G.W. Flynn. J. Mol. Spectrosc., 28, 1968, pp. 1-26.
- [6] J.K.G. Watson. J.Mol. Spectrosc, 1968, v.48, № 10, pp. 170-179.

Ç.O. Qacar, S.A. Musaev, E.Ç. Səidov

$(CD_3)_2CDOH$ MOLEKULU TRANS-KONFORMERİNİN SANTİMETR VƏ MİLLİMETR DALĞA DİAPAZONLARINDA FIRLANMA SPEKTRİ

$(CD_3)_2CDOH$ molekulunun trans-konformerinin fırlanma spektrinin 161 spektral keçidi identifikasiya edilib. Bu molekulun udulma spektri şark və ikiqat radiotezlikli-ifrat yüksək tezlikli rezonans modulyasiyalı radiospektrometr vasitəsi ilə 17500-79050 MQh tezliklər diapazonunda yazılıb. Fırlanma spektrinin nəzəri təsiri üçün Vatsonun A-reduksiya fırlanma Hamiltonian (ancaq fırlanma və kvartik mərkəzdən qaçan üzvlər daxil olunub) istifadə edilib. Tədqiq olunan molekulun dəqiqləşdirilmiş spektroskopik üzvləri, onların korrelyasiya matrisi, habelə, identifikasiya prosesinin düzqünlüyünü təsdiq edən hər üç oxlar təsfində hesablanmış spektroskopik parametrlərin müəyyən olunan kombinasiyaları adı çəkilən molekulun fırlanma spektrini yüksək dəqiqliklə təsvir etməyə imkan verir.

Ch.O. Qadjar, S.A. Musaev, E.Ch. Saidov

THE ROTARY SPECTRUM OF A $(CD_3)_2CDOH$ MOLECULE IN TRANS-CONFORMATION IN CENTIMETRIC AND MILLIMETRIC RANGES OF WAVELENGTH

161 spectral transitions of the rotary spectrum of a $(CD_3)_2CDOH$ molecule in trans-conformation has been identified. The absorption spectrum of this molecule was registered by radio spectrometer with stark modulation and modulation by double radio frequency-microwave resonance in a frequency range 17500 - 79050 MHz. For the theoretical description of a rotary spectrum is used A-reduction Watson Hamiltonian with inclusion in processing rotational and all quartic terms of centrifugal distortion. More precisely defined spectroscopic parameters of a researched molecule, correlation matrix of these parameters, and also the calculated determined combinations of spectroscopic parameters for all three axial representations, confirming the correctness of identification process, allow with high reliability to describe a rotary spectrum of the specified molecule.