

ВРАЩАТЕЛЬНЫЙ И ВРАЩАТЕЛЬНО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ МИЛЛИМЕТРОВЫЙ СПЕКТРЫ ГОШ-КОНФОРМЕРА МОЛЕКУЛЫ ИЗОПРОПАНОЛА.

С.А. МУСАЕВ

Институт Фотозлектроники АН Азербайджана,
370141, Баку, ул. Ф. Агаева, 555 квартал

На гибридном радиоспектрометре записан миллиметровый спектр изопропилового спирта, идентифицированы 352 вращательных, вращательно-колебательных перехода его гош-конформера, уточнены вращательные, квартичные центробежные постоянные и параметр туннельного расщепления и впервые определены постоянные внутреннего вращения этой молекулы. Предложена модель Гамильтониана Квайда-Лина хорошо описывающая этот спектр.

Впервые вращательный спектр молекулы изопропилового спирта (транс-конформер) в сантиметровом диапазоне был исследован Имановым, Абдурахмановым и Елчиевым [1], а позже Хиротой [2].

Хиротой [3] начаты работы по исследованию вращательного и колебательно-вращательного спектров гош-конформера молекулы изопропанола. Было идентифицировано 208 переходов. Более подробно гош-конформер молекулы был исследован в работе [4]. В этой работе было идентифицировано 340 переходов. 140 запрещенных переходов гош-формы молекулы изопропилового спирта было идентифицировано в работе [5]. Для более подробного изучения вращательного и вращательно-колебательного спектра и более корректного определения параметров внутреннего вращения гош-конформера молекулы изопропилового спирта необходимо было продолжить идентификации его спектра в миллиметровом диапазоне, куда попадают интенсивные переходы с низкими и высокими J .

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Миллиметровый спектр изопропилового спирта был записан на гибридном спектрометре [6,7] и составлен каталог более 7000 спектральных линий [8]. Точность измерений частот спектральных линий была в пределах 0,05-0,15 МГц и зависела от интенсивности и взаиморасположения спектральных линий. Спектрально чистый образец изопропилового спирта марки ОП-2 ОСЧ 11-5

(99,4% основного продукта) использовался без дальнейшей очистки.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Молекула изопропилового спирта состоит из двух метильных и одной гидроксильной групп, совершающих внутреннее вращение относительно ординарных связей С-С и С-О соответственно. Наличие такой вращательной степени свободы относительно связи С-О приводит к существованию транс- и гош-конформеров. Гош-конформер молекулы не имеет плоскость симметрии и существует в виде двух ротамеров, структуры которых являются зеркальным отражением друг друга, причем одна из них получается из другого при туннелировании водорода гидроксильной группы через цис-барьер (плоскость симметрии метильных групп). Это приводит к сильному усложнению вращательного спектра, и его описание в рамках модели нежесткого асимметричного волчка (Гамильтониан Ватсона) становится невозможным. Поэтому для расчета спектра был использован Гамильтониан Квайда-Лина, учитывающий внутреннее вращение молекул типа асимметричных волчков. Матрица этого гамильтониана имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \langle s|H|s \rangle & \langle \alpha|H|\alpha \rangle \\ \langle \alpha|H|s \rangle & \langle s|H|\alpha \rangle \end{pmatrix} \quad (1)$$

где:

$$\langle s|H|s \rangle = \frac{1}{2} (\tilde{X}_s - \tilde{Y}_s) J^2 + [\tilde{Z}_s - \frac{1}{2} (\tilde{X}_s + \tilde{Y}_s)] J^2 - D_{J_s} J^4 - D_{JK_s} J^2 J_z^2 - D_{R_s} J_z^4 + \frac{1}{2} (\tilde{X}_s - \tilde{Y}_s) J^2 J_{XY}^2 - 2d_{J_s} J^2 J_{XY}^2 - d_{K_s} (J_z^2 J_{XY}^2 + J_{XY}^2 J_z^2) \quad (2)$$

$$\langle \alpha|H|\alpha \rangle = \frac{1}{2} (\tilde{X}_a - \tilde{Y}_a) J^2 + [\tilde{Z}_a - \frac{1}{2} (\tilde{X}_a + \tilde{Y}_a)] J^2 - D_{J_a} J^4 - D_{JK_a} J^2 J_z^2 - D_{R_a} J_z^4 + \frac{1}{2} (\tilde{X}_a - \tilde{Y}_a) J^2 J_{XY}^2 - 2d_{J_a} J^2 J_{XY}^2 - d_{K_a} (J_z^2 J_{XY}^2 + J_{XY}^2 J_z^2) + \Delta \quad (3)$$

$$\langle \alpha|H|s \rangle = iQ_y J_y + iQ_z J_z + \frac{1}{2} R_{XY} (J_x J_y + J_y J_x) + \frac{1}{2} R_{ZX} (J_z J_x + J_x J_z) \quad (4)$$

где: $\tilde{X}_s, \tilde{Y}_s, \tilde{Z}_s, \tilde{X}_a, \tilde{Y}_a, \tilde{Z}_a$ - вращательные постоянные; $D_{J_s}, D_{JK_s}, D_{K_s}, d_{J_s}, d_{K_s}, D_{J_s}, D_{JK_s}, D_{K_s}, d_{J_s}, d_{K_s}$ квартичные центробежные постоянные, и Δ - параметр рас-

щепления внутреннего вращения Q_z, Q_y, R_{XY}, R_{ZX} - постоянные внутреннего вращения; J_x, J_y, J_z - компоненты полного углового момента J в произвольной системе ко-

ординат x, y, z ; $J^2 = J(J+1)$, $J_{xy}^2 = J_x^2 + J_y^2$. Как видно из выражения (1) диагональные элементы этой матрицы являются матрицами редуцированного гамильтониана Ватсона относящимся к симметрическим и антисимметрическим состояниям гош-формы, а недиагональные элементы характеризуют взаимодействие этих двух состояний. Эта матрица имеет порядок $2(2J+1)$ и симметрия ее позволяет, используя преобразование Ванга, разбить ее на две субматрицы с порядком $2J+1$, а матрица гамильтониана Ватсона имеет порядок $2J+1$ и преобразованием Ванга делится на четыре субматрицы с порядками $J/2$ и $(J+1)/2$ в зависимости от четности J . Таким образом, порядок субматрицы Гамильтониана Квайда-Лина в четыре раза выше, чем порядок Гамильтониана Ватсона. Кроме этого, количество постоянных Гамильтониана Ватсона, включающих все квартичные члены центробежного возмущения - 8, а Гамильтониана Квайда-Лина - 21. Эти два обстоятельства играют огромную роль при решении обратной спектроскопической задачи с одинаковыми среднеквадратичными отклонениями частот используемых переходов в транс-форму молекулы изопропилового спирта с использованием Гамильтониана Ватсона, включающего квартичные термы центробежного возмущения и гош-конформера этой молекулы с использованием Гамильтониана Квайда-Лина требуется приблизительно в 8 раз больше экспериментальных частот, идентифицированных переходов. Видимо, из-за ограниченного количества идентифицированных переходов, автор работы [3] вынужден был принять квартичные члены Гамильтониана симметрических и антисимметрических состояний равными друг другу и зафиксировать их равными квартичным постоянным транс-конформера молекулы, а также задать параметры внутреннего вращения Q_b и Q_c . Таким образом, он уменьшил количество искомым параметров обратной спектроскопической задачи с 21 до 9. После чего решение обратной спектроскопической задачи сходилось. Изменяя задаваемые значения Q_b и Q_c из решений нескольких обратных задач выбрал те, которые имели наименьшее среднеквадратичное отклонение. При этом он правильность почти каждого идентифицированного перехода проверил методом двойных резонансов и правилом сумм. Все расчеты в этой работе и в работе [4] проводились в осевом представлении II^f . Для сравнения полученных результатов все расчеты в настоящей работе тоже проводились в этом осевом представлении. В таблице 1 приводятся значения постоянных внутреннего вращения молекулы гош-

изопропанола, полученные в работах [2,3] и в настоящей работе.

Таблица 1

Постоянные внутреннего вращения молекулы гош-изопропанола

Параметр (МГц)	Работа [3]	Работа [4]	Настоящая работа
R_{CA}	89,559(92)	68,24(11)	67,205(24)
R_{AB}	-58,215(12)	-65,91(43)	-65,313(89)
Q_C	-153,00 ^a	25,1(17)	2,14(35)
Q_B	-279,663 ^a	280,49(68)	-286,77(14)

a- значение параметра фиксировано

Как видно из таблицы 1 параметры R_{CA} и R_{AB} не очень сильно отличаются друг от друга тогда, как заданный параметр Q_C отличается от них почти на два порядка. Фиксирование значений подгоняемых параметров при решении обратной задачи, как видно из таблицы 1, не всегда приводит к правильным результатам. Кроме этого следует отметить, что вклад внутреннего вращения в частоты переходов превосходит вклад центробежного возмущения иногда на несколько порядков и становится соизмеримым с вкладом вращательных постоянных.

В работе [4], используя методы двойных РЧ-МВ резонансов, было идентифицировано около 340 переходов, попадающих в сантиметровой диапазон гош-конформера молекулы и определены молекулярные постоянные этой молекулы более корректно, чем в работах [3].

Идентификация переходов в миллиметровой области спектра, куда попадает большое количество достаточно интенсивных спектральных линий, относящихся к переходам гош-конформера молекулы изопропилового спирта, было начато с расчета спектра, используя программы [4] составленным на языке ФОРТРАН с помощью выражений (1) - (4) и статистического метода наименьших квадратов. Идентификация большого количества переходов дала возможность более корректно определить 21 спектроскопическую постоянную гош-конформера молекулы и дополнительно идентифицировать ее субмиллиметровый спектр. В решение обратной спектроскопической задачи было включено 1111 переходов. Из них 208 переходов работы [3], 340 переходов работы [4], 140 запрещенных вращательных переходов работы [5]. Было идентифицировано 352 миллиметровых перехода (таблица 2). Частоты 71 субмиллиметрового перехода молекулы будут публиковаться отдельно. Среднеквадратичное отклонение подгонки было $\sigma = 0,19$ МГц.

В работе [5] приводятся найденные молекулярные постоянные и их корреляционная матрица.

Таблица 2

Частоты (МГц) вращательных переходов молекулы изопропанола (гош-форма)

Переход				Уэкспер.	$\Delta\nu$	Переход				Уэкспер.	$\Delta\nu$										
a	17	16	1	-	a	17	15	2	25892,05	0,07	s	8	1	8	-	s	7	2	6	34613,86	-0,24
a	15	13	3	-	a	15	14	1	26853,5	-0,11	s	8	0	8	-	s	7	1	6	34613,86	-0,25
s	14	10	4	-	s	14	9	5	27122,48	0,45	a	19	18	2	-	s	19	16	3	35153,79	0,06
a	15	11	5	-	s	15	11	4	27468,56	-0,3	a	8	6	3	-	s	8	6	2	35239,63	0,3

		Переход				Укслер	Δv			Переход				Укслер	Δv
A	12 _{10 3}	-	A	12 _{9 4}		27703,98	0,06	a	21 _{15 6}	-	a	21 _{14 7}		35301,81	-0,22
S	22 _{13 9}	-	a	22 _{13 10}		28142,64	-0,2	a	3 _{1 2}	-	a	2 _{2 0}		35365,12	0,38
S	22 _{14 9}	-	a	22 _{12 10}		28157,11	0,14	s	16 _{10 6}	-	s	16 _{9 7}		36127,33	-0,04
a	5 _{2 3}	-	s	5 _{4 2}		28259,84	-0,31	a	13 _{8 5}	-	a	13 _{7 6}		36482,91	-0,12
a	20 _{18 2}	-	a	20 _{19 1}		28408,79	-0,13	a	14 _{14 1}	-	a	14 _{13 2}		36847,6	0
a	22 _{21 1}	-	a	22 _{20 2}		28494,7	0,12	a	15 _{14 2}	-	a	15 _{13 3}		36894,93	0,07
a	11 _{11 0}	-	a	11 _{10 1}		28668,26	0,04	s	15 _{5 11}	-	a	15 _{3 12}		37064,36	0,1
a	11 _{11 1}	-	a	11 _{10 2}		29320,66	0,32	a	22 _{19 3}	-	s	22 _{21 2}		37465,83	-0,26
s	12 _{8 4}	-	s	12 _{7 5}		29828,63	-0,31	s	19 _{18 4}	-	s	19 _{15 5}		37676,06	0,14
a	12 _{9 4}	-	s	12 _{9 3}		29988,23	0,19	a	19 _{15 5}	-	a	19 _{14 6}		37716,28	0,37
s	14 _{12 3}	-	s	14 _{11 4}		30546,39	0,31	s	10 _{0 10}	-	s	9 _{1 6}		37976,67	-0,04
a	13 _{10 4}	-	a	13 _{9 5}		30808,66	0,39	a	10 _{6 5}	-	a	10 _{5 6}		37998,44	-0,06
s	14 _{11 3}	-	s	14 _{12 2}		31456,86	-0,23	s	17 _{6 11}	-	a	17 _{6 12}		38059,71	0,1
s	17 _{7 10}	-	a	17 _{7 11}		31496,48	-0,12	s	17 _{7 11}	-	a	17 _{5 12}		38059,71	0,1
s	17 _{8 10}	-	a	17 _{6 11}		31496,48	-0,13	s	18 _{8 11}	-	a	18 _{6 12}		38589,4	0,16
a	12 _{12 1}	-	a	12 _{11 1}		31576,32	-0,29	s	7 _{5 2}	-	s	7 _{4 4}		38647,87	0,02
a	12 _{12 0}	-	a	12 _{11 1}		31589,83	-0,11	s	16 _{15 2}	-	s	16 _{14 3}		38762,16	0,26
a	14 _{11 4}	-	a	14 _{10 5}		31599,32	0,16	s	6 _{1 5}	-	s	6 _{0 6}		39105,3	0,23
a	17 _{12 5}	-	a	17 _{11 6}		31769,24	0,27	a	14 _{10 5}	-	a	14 _{9 6}		39106,02	-0,45
s	12 _{10 2}	-	s	12 _{9 4}		31897,3	-0,13	a	6 _{2 5}	-	a	6 _{1 6}		39190,98	0,01
a	12 _{12 1}	-	a	12 _{11 2}		31955,36	-0,36	s	20 _{9 11}	-	a	20 _{9 12}		39703,85	0,15
s	6 _{2 4}	-	s	6 _{1 5}		32091,29	0,29	s	20 _{10 11}	-	a	20 _{8 12}		39703,85	0,14
a	10 _{7 4}	-	a	10 _{6 5}		32111,55	-0,22	a	6 _{4 2}	-	a	6 _{3 4}		39947,43	-0,45
a	7 _{0 7}	-	a	6 _{1 5}		32139,67	-0,31	a	5 _{4 2}	-	s	5 _{4 1}		40039,35	-0,12
a	7 _{1 7}	-	a	6 _{2 5}		32139,76	-0,48	a	17 _{12 6}	-	a	17 _{11 7}		40039,35	0,21
s	11 _{8 4}	-	s	11 _{7 5}		32225,86	-0,23	s	13 _{8 5}	-	s	13 _{7 6}		40127,31	-0,24
a	11 _{8 4}	-	a	11 _{7 5}		32749,78	0,47	s	5 _{2 4}	-	s	4 _{3 2}		40227,77	0,48
a	15 _{13 3}	-	a	15 _{12 4}		33291,36	-0,35	s	21 _{10 11}	-	a	21 _{10 12}		40284,33	-0,21
a	10 _{8 2}	-	a	10 _{7 4}		33368,98	0,47	s	21 _{11 11}	-	a	21 _{9 12}		40284,33	-0,21
a	2 _{2 0}	-	a	1 _{1 0}		33474,48	0,23	s	11 _{1 11}	-	s	10 _{2 9}		40397,37	-0,14
s	15 _{12 4}	-	s	15 _{11 5}		33734,88	0,41	s	11 _{0 11}	-	s	10 _{1 9}		40397,37	-0,14
s	4 _{4 1}	-	a	3 _{2 2}		33780,58	-0,16	s	17 _{13 5}	-	s	17 _{12 6}		40469,91	0,42
s	18 _{13 6}	-	s	18 _{12 7}		34121,06	0,25	a	19 _{16 4}	-	a	19 _{15 5}		40497,85	-0,02
a	12 _{9 4}	-	a	12 _{8 5}		34354,02	-0,1	s	11 _{6 5}	-	s	11 _{5 6}		40622,72	-0,12
a	15 _{10 5}	-	a	15 _{9 6}		34598,81	0,18	s	10 _{6 5}	-	s	10 _{5 6}		40696,96	-0,12
s	12 _{8 5}	-	s	12 _{7 6}		40699,94	-0,03	s	20 _{9 12}	-	a	20 _{7 13}		46297,47	-0,11
s	11 _{7 5}	-	s	11 _{6 6}		40728,17	-0,09	s	17 _{17 0}	-	s	17 _{16 2}		46855,01	0,23
s	22 _{11 11}	-	a	22 _{11 12}		40877,72	-0,37	s	21 _{10 12}	-	a	21 _{8 13}		46864,6	-0,2
s	22 _{12 11}	-	a	22 _{10 12}		40877,72	-0,39	s	17 _{17 1}	-	s	17 _{16 2}		46866,28	-0,17
a	11 _{1 11}	-	a	10 _{2 9}		40933,29	-0,11	a	22 _{19 4}	-	a	22 _{18 5}		47252,1	0,16
a	11 _{0 11}	-	a	10 _{1 9}		40933,29	-0,11	a	7 _{7 0}	-	s	7 _{7 1}		47338,09	0,22
s	19 _{14 5}	-	s	19 _{15 5}		41158,22	0,26	a	22 _{17 5}	-	a	22 _{18 5}		47501,39	-0,39
s	19 _{17 3}	-	s	19 _{16 4}		41168,73	0,01	a	22 _{16 7}	-	a	22 _{15 8}		47601,59	-0,27
a	16 _{10 6}	-	a	16 _{9 7}		41181,5	-0,36	a	14 _{12 3}	-	s	14 _{12 2}		47883,36	0,48

			Переход			Укслер			$\Delta\nu$				Переход			Укслер			$\Delta\nu$
s	5	1 ₄	-	s	4	2 ₂	41187,19	-0,22	a	14	1 ₁₄	-	a	13	2 ₁₂	48000,52	0,14		
a	19	14 ₅	-	a	19	15 ₅	41241,52	0,06	a	14	0 ₁₄	-	a	13	1 ₁₂	48000,52	0,14		
s	5	3 ₂	-	s	5	2 ₄	41308,63	0,11	s	20	17 ₃	-	a	20	17 ₄	48374,36	-0,11		
s	17	14 ₃	-	s	17	15 ₃	41435,24	-0,4	s	8	2 ₇	-	s	7	3 ₅	48481,45	-0,06		
s	21	18 ₄	-	s	21	17 ₅	41527,15	-0,03	s	22	16 ₆	-	a	22	16 ₇	48858,32	-0,25		
a	17	13 ₅	-	a	17	12 ₆	41825,73	-0,2	a	12	9 ₃	-	a	12	8 ₅	48894,04	-0,22		
s	23	18 ₅	-	s	23	19 ₅	42266,59	0,12	a	4	2 ₃	-	a	3	1 ₂	49084,06	-0,07		
s	10	5 ₆	-	s	10	4 ₇	42342,19	0,18	a	18	15 ₃	-	s	18	17 ₂	49417,23	0,13		
a	14	8 ₆	-	a	14	7 ₇	42600,4	-0,25	a	8	1 ₇	-	a	7	2 ₅	49436,21	-0,08		
a	14	9 ₆	-	a	14	8 ₇	42726,99	0,02	a	20	16 ₄	-	s	20	18 ₃	49442,76	-0,33		
s	12	1 ₁₂	-	s	11	2 ₁₀	42796,84	-0,14	a	10	2 ₉	-	a	9	3 ₇	49776,07	0,35		
s	12	0 ₁₂	-	s	11	1 ₁₀	42796,84	-0,14	a	10	1 ₉	-	a	9	2 ₇	49776,07	0,16		
s	6	1 ₅	-	s	5	2 ₃	43010,9	0,32	s	15	1 ₁₅	-	s	14	2 ₁₃	49958,83	0,41		
a	17	14 ₃	-	a	17	13 ₄	43118,17	-0,36	s	15	0 ₁₅	-	s	14	1 ₁₃	49958,83	0,41		
s	9	4 ₆	-	s	9	3 ₇	43273,31	-0,16	a	14	13 ₂	-	s	14	11 ₃	50353,57	-0,38		
s	9	3 ₆	-	s	9	2 ₇	43273,31	0,03	s	15	2 ₁₃	-	a	15	2 ₁₄	50481,3	-0,04		
s	14	2 ₁₂	-	a	14	2 ₁₃	43317,67	-0,01	s	15	3 ₁₃	-	a	15	1 ₁₄	50481,3	-0,04		
s	14	3 ₁₂	-	a	14	1 ₁₃	43317,67	-0,01	s	5	0 ₅	-	s	4	1 ₄	51250,76	0,16		
s	22	17 ₆	-	s	22	16 ₇	43343,91	0,06	s	17	5 ₁₃	-	a	17	3 ₁₄	51400,02	0,09		
a	20	17 ₄	-	a	20	16 ₅	43347,62	-0,24	a	21	17 ₄	-	a	21	16 ₅	51844,1	0,35		
a	20	15 ₅	-	a	20	16 ₅	43717,05	-0,24	s	10	2 ₉	-	s	9	3 ₇	52035,41	-0,05		
s	20	18 ₃	-	s	20	17 ₄	43829,98	0,22	s	10	1 ₉	-	s	9	2 ₇	52035,42	-0,05		
s	7	1 ₆	-	s	6	2 ₄	44363,5	0,1	s	21	15 ₇	-	s	21	14 ₈	52140,81	0,13		
s	5	4 ₁	-	a	4	2 ₂	44635,11	-0,19	s	9	2 ₈	-	s	8	3 ₆	52196,96	-0,2		
a	9	3 ₆	-	a	9	2 ₇	44691,81	0,36	s	9	1 ₈	-	s	8	2 ₆	52196,96	-0,24		
a	8	3 ₆	-	a	8	2 ₇	45077,53	-0,27	s	19	6 ₁₃	-	a	19	6 ₁₄	52409,41	0,12		
s	19	16 ₃	-	a	19	16 ₄	45167,22	0,27	s	19	7 ₁₃	-	a	19	5 ₁₄	52409,41	0,12		
s	7	2 ₆	-	s	7	1 ₇	45240,07	0,29	a	15	14 ₂	-	s	15	12 ₃	52565,97	-0,09		
a	7	2 ₆	-	a	6	3 ₄	45631,09	-0,11	s	20	7 ₁₃	-	a	20	7 ₁₄	52945,4	-0,08		
s	19	7 ₁₂	-	a	19	7 ₁₃	45748,24	0,08	s	20	8 ₁₃	-	a	20	6 ₁₄	52945,4	-0,08		
s	19	8 ₁₂	-	a	19	6 ₁₃	45748,24	0,08	a	4	2 ₂	-	a	3	3 ₁	53351,48	0,18		
s	20	8 ₁₂	-	a	20	8 ₁₃	46297,47	-0,11	s	21	8 ₁₃	-	a	21	8 ₁₄	53500,77	-0,35		
S	21	9 ₁₃	-	a	21	7 ₁₄	53500,77	-0,35	a	10	2 ₈	-	a	10	1 ₉	60030,04	0,02		
S	7	4 ₃	-	a	6	4 ₂	53680,36	-0,14	s	19	11 ₈	-	s	19	10 ₉	60073,99	0,12		
S	10	4 ₇	-	s	10	3 ₈	54058,62	0	s	21	7 ₁₄	-	a	21	7 ₁₅	60166,46	-0,27		
S	10	3 ₇	-	s	10	2 ₈	54058,62	0,03	s	21	8 ₁₄	-	a	21	6 ₁₅	60166,46	-0,27		
S	11	5 ₇	-	s	11	4 ₈	54091,08	-0,02	a	9	2 ₈	-	a	9	1 ₉	60196,16	0		
s	11	4 ₇	-	s	11	3 ₈	54091,08	0,08	a	9	1 ₈	-	a	9	0 ₉	60196,16	0		
s	12	6 ₇	-	s	12	5 ₈	54092,78	-0,18	s	10	2 ₉	-	a	9	2 ₈	60242,25	-0,04		
s	12	5 ₇	-	s	12	4 ₈	54092,78	0,21	s	10	1 ₉	-	a	9	1 ₈	60242,25	-0,04		
s	11	2 ₁₀	-	s	10	3 ₈	54632,29	-0,06	a	13	10 ₃	-	s	13	10 ₄	60413,61	0,19		
s	11	1 ₁₀	-	s	10	2 ₈	54632,29	-0,06	a	19	14 ₅	-	s	19	16 ₄	60497,25	0,23		
s	17	1 ₁₇	-	s	16	2 ₁₅	54721,81	-0,39	a	20	17 ₄	-	s	20	15 ₅	60502,13	-0,1		

			Переход			Укслер.			Δv	Переход			Укслер.			Δv					
s	17	0	17	-	s	16	1	15	54721,81	-0,39	s	8	3	8	-	s	7	4	4	60573,22	0,16
S	21	21	1	-	s	21	20	2	56330,63	0,11	S	22	17	5	-	s	22	16	6	60609,36	-0,12
A	21	13	8	-	a	21	12	9	56438,97	0,19	S	15	8	8	-	s	15	7	9	60766,5	0,07
A	6	3	3	-	a	6	2	5	56508,12	-0,36	S	15	7	8	-	s	15	6	9	60766,5	0,46
A	9	3	7	-	a	9	2	8	56510,86	0,21	S	14	7	8	-	s	14	6	9	60848,57	-0,2
A	9	2	7	-	a	9	1	8	56510,86	0,4	S	14	6	8	-	s	14	5	9	60848,57	-0,08
A	21	14	8	-	a	21	13	9	56776,12	0,41	A	6	1	6	-	a	5	0	5	60892,56	0,02
S	5	2	3	-	s	4	3	1	57000,3	-0,47	S	13	6	8	-	s	13	5	9	60905,31	0,08
A	20	12	8	-	a	20	11	9	57091,95	0,19	S	13	5	8	-	s	13	4	9	60905,31	0,11
S	18	5	14	-	a	18	3	15	58591,9	0,4	S	12	5	8	-	s	12	4	9	60939,61	-0,02
S	18	4	14	-	a	18	3	15	58591,9	0,4	S	12	4	8	-	s	12	3	9	60939,62	0
A	12	5	7	-	a	12	4	8	58687,29	-0,02	S	9	2	8	-	s	9	1	9	60945,06	0,23
A	15	8	8	-	a	15	7	9	59020,1	0,15	S	9	1	8	-	s	9	0	9	60945,06	0,23
S	19	5	14	-	a	19	5	15	59095,78	0,31	S	11	4	8	-	s	11	3	9	60955,6	0,09
S	19	6	14	-	a	19	4	15	59095,78	0,31	S	11	3	8	-	s	11	2	9	60955,6	0,09
S	3	2	1	-	s	2	1	2	59181,78	-0,32	S	11	0	11	-	a	10	0	10	61883,66	-0,22
A	14	7	8	-	a	14	6	9	59260,5	-0,42	S	14	2	13	-	s	13	3	11	61894,63	0
A	14	6	8	-	a	14	5	9	59260,5	0,44	S	14	1	13	-	s	13	2	11	61894,63	0
A	13	6	8	-	a	13	5	9	59477,39	-0,07	A	6	4	2	-	s	6	4	3	61966,91	0
A	13	5	8	-	a	13	4	9	59477,39	0,2	A	23	22	2	-	s	23	20	3	62508,6	0,17
S	13	2	12	-	s	12	3	10	59496,61	0,06	A	21	16	6	-	a	21	15	7	62559,47	-0,14
S	13	1	12	-	s	12	2	10	59496,61	0,06 [*]	A	12	9	3	-	s	12	9	4	62718,64	0,3
S	20	6	14	-	a	20	6	15	59620,87	0,01	S	23	22	1	-	a	22	22	0	62735,78	-0,09
S	20	7	14	-	a	20	5	15	59620,87	0,01	A	22	17	6	-	a	22	16	7	64836,5	0,25
A	3	3	1	-	s	3	1	2	59664,52	-0,04	A	10	3	8	-	a	9	4	6	65113,24	0,3
A	12	5	8	-	a	12	4	9	59674,37	-0,35	A	10	2	8	-	a	9	3	6	65114,86	0,38
A	12	4	8	-	a	12	3	9	59674,37	-0,28	S	18	3	15	-	a	18	3	16	65296,82	-0,25
A	11	4	8	-	a	11	3	9	59857,48	0	S	18	4	15	-	a	18	2	16	65296,82	-0,25
A	11	3	8	-	a	11	2	9	59857,48	0,02	A	11	3	9	-	a	10	4	7	65781,25	0,19
A	10	3	8	-	a	10	2	9	60030,04	0,01	A	4	3	1	-	a	3	2	1	65809,94	0,31
A	19	11	9	-	a	19	10	10	65963,73	0,47	S	12	2	10	-	s	11	3	8	71298,27	0,11
S	20	5	15	-	a	20	5	16	66307,99	-0,2	A	6	3	3	-	s	6	3	4	71435,28	0,09
S	20	6	15	-	a	20	4	16	66307,99	-0,2	S	17	1	16	-	a	17	1	17	71537,14	-0,29
A	22	22	1	-	s	22	22	0	66318,68	0,1	S	17	2	16	-	a	17	0	17	71537,14	-0,29
A	22	22	1	-	s	22	22	0	66318,68	0,1	A	17	12	5	-	a	17	11	7	71619,5	0,31
A	6	5	2	-	s	6	3	3	66325,38	-0,25	S	18	2	16	-	a	18	2	17	72001,68	0,05
S	8	6	3	-	a	7	6	2	66483,87	-0,21	S	18	3	18	-	a	18	1	17	72001,68	0,05
A	17	9	9	-	a	17	8	10	66483,87	-0,06	A	23	17	7	-	a	23	16	8	72324,19	0,43
A	17	8	9	-	a	17	7	10	66483,87	0,33	S	8	4	4	-	s	8	3	8	72389,51	0,33
A	9	3	7	-	a	8	4	5	66672,71	-0,06	S	19	3	16	-	a	19	3	17	72488,82	0,23
S	21	6	15	-	a	21	6	18	66845,78	-0,03	S	19	4	16	-	a	19	2	17	72488,82	0,23
S	21	7	15	-	a	21	6	16	66845,78	-0,03	A	23	13	10	-	a	23	12	11	72577,31	0,12
A	4	3	2	-	a	3	2	2	66870,84	0,02	A	23	14	10	-	a	23	13	11	72580,48	-0,01

			Переход		Укслер.		$\Delta\nu$				Переход		Укслер.		$\Delta\nu$		
A	15 ₇	9	-	a	15 ₆	10	66883,78	0,03	A	7 ₄	4	-	a	6 ₈	2	72734,05	0,01
A	15 ₆	9	-	a	15 ₅	10	66883,78	0,07	S	20 ₄	16	-	a	20 ₄	17	72998,03	0,3
A	14 ₆	9	-	a	14 ₅	10	67047,62	-0,14	s	20 ₅	16	-	a	20 ₃	17	72998,03	0,3
A	14 ₅	9	-	a	14 ₄	10	67047,62	-0,13	a	9 ₈	2	-	s	9 ₆	3	73002,14	0,2
S	20 ₁₁	9	-	s	20 ₁₀	10	67179,09	0,21	s	22 ₂₀	3	-	s	22 ₁₉	4	73016,71	-0,38
S	20 ₁₂	9	-	s	20 ₁₁	10	67180,9	-0,2	a	9 ₇	3	-	s	9 ₅	4	73029,73	0,2
A	13 ₅	9	-	a	13 ₄	10	67192,01	0,01	a	20 ₁₁	10	-	a	20 ₁₀	11	73466,66	-0,07
A	13 ₄	9	-	a	13 ₃	10	67192,01	0,02	a	20 ₁₀	10	-	a	20 ₉	11	73466,66	0,13
S	17 ₉	9	-	s	17 ₈	10	67684,29	0,03	s	21 ₅	16	-	a	21 ₅	17	73528,59	0,19
A	7 ₆	2	-	s	7 ₄	3	67754,77	0,01	s	21 ₆	16	-	a	21 ₄	17	73528,59	0,19
A	5 ₃	2	-	a	4 ₄	1	67760,83	0,06	a	19 ₁₀	10	-	a	19 ₉	11	73693,78	-0,17
S	6 ₁	5	-	s	5 ₂	4	67826,12	0,04	a	19 ₉	10	-	a	19 ₈	11	73693,78	-0,1
S	15 ₇	9	-	s	15 ₆	10	67878,65	-0,03	s	13 ₃	11	-	s	12 ₄	9	73777,86	0,05
S	15 ₆	9	-	s	15 ₅	10	67878,65	-0,02	s	13 ₂	11	-	s	12 ₃	9	73777,86	0,05
S	14 ₆	9	-	s	14 ₅	10	67944	0,01	a	17 ₇	10	-	a	17 ₆	11	74067,62	-0,04
S	14 ₅	9	-	s	14 ₄	10	67944	0,01	s	22 ₆	16	-	a	22 ₆	17	74079,56	-0,33
S	13 ₅	9	-	s	13 ₄	10	67991,78	-0,2	s	22 ₇	16	-	a	22 ₅	17	74079,56	-0,33
S	13 ₄	9	-	s	13 ₃	10	67991,78	-0,2	a	10 ₈	3	-	s	10 ₆	4	74162,35	0
S	10 ₂	9	-	s	10 ₁	10	68057,51	0,08	s	21 ₁₂	10	-	s	21 ₁₁	11	74338,29	-0,05
S	10 ₁	9	-	s	10 ₀	10	68057,51	0,08	s	21 ₁₁	10	-	s	21 ₁₀	11	74338,29	0,19
S	20 ₁₇	3	-	s	20 ₁₆	3	68223,32	-0,12	a	15 ₆	10	-	a	15 ₅	11	74352,95	0,03
A	10 ₆	4	-	a	10 ₅	6	68416,04	-0,32	a	15 ₅	10	-	a	15 ₄	11	74352,95	0,03
S	11 ₃	9	-	s	10 ₄	7	68620,13	0,04	a	14 ₅	10	-	a	14 ₄	11	74468,07	-0,4
S	11 ₂	9	-	s	10 ₃	7	68620,13	0,02	a	14 ₄	10	-	a	14 ₃	11	74468,07	-0,4
S	13 ₉	4	-	s	13 ₈	6	68675,53	-0,14	s	20 ₁₁	10	-	s	20 ₁₀	11	74516,09	-0,03
S	6 ₆	1	-	a	5 ₄	2	70744,58	-0,17	s	20 ₁₀	10	-	s	20 ₉	11	74516,09	0,06
A	7 ₄	3	-	s	7 ₄	4	70979,63	-0,1	a	12 ₃	10	-	a	12 ₂	11	74655,38	-0,06
S	12 ₃	10	-	s	11 ₄	8	71298,27	0,11	a	12 ₂	10	-	a	12 ₁	11	74655,38	-0,06
A	4 ₃	1	-	a	3 ₂	2	74863,61	0,2	a	5 ₄	2	-	a	4 ₃	1	75686,17	-0,2
S	17 ₈	10	-	s	17 ₇	11	74894,87	0,06	a	15 ₁₀	5	-	a	15 ₉	7	76446,36	-0,3
S	16 ₇	10	-	s	16 ₆	11	74979	-0,14	s	7 ₁	6	-	s	6 ₂	5	76454,02	-0,2
S	15 ₆	10	-	s	15 ₅	11	75047,01	0,3	s	7 ₂	6	-	s	6 ₁	5	76454,02	-0,39
S	15 ₅	10	-	s	15 ₄	11	75047,01	0,3	a	12 ₈	4	-	s	12 ₈	5	76476,94	-0,11
S	14 ₅	10	-	s	14 ₄	11	75099,76	0,03	a	7 ₃	4	-	a	6 ₄	2	76740,77	0,05
S	14 ₄	10	-	s	14 ₃	11	75099,76	0,03	s	23 ₂₁	3	-	s	23 ₂₀	4	76742,66	0,15
S	13 ₄	10	-	s	13 ₃	11	75139,89	-0,35	a	21 ₂₀	2	-	a	21 ₁₉	3	77291,99	-0,19
S	13 ₃	10	-	s	13 ₂	11	75139,89	-0,35	a	21 ₁₅	6	-	s	21 ₁₅	7	77488,04	-0,33
S	12 ₃	10	-	s	12 ₂	11	75170,03	-0,07	s	6 ₃	3	-	a	5 ₁	4	77597,22	-0,28
S	12 ₂	10	-	s	12 ₁	11	75170,03	-0,07	a	7 ₁	6	-	a	6 ₂	5	77694,59	-0,16
S	11 ₂	10	-	s	11 ₁	11	75190,84	-0,21	a	7 ₂	6	-	a	6 ₁	5	77694,99	0,45
S	11 ₁	10	-	s	11 ₀	11	75190,84	-0,21	s	15 ₁₂	3	-	s	15 ₁₁	4	77705,33	0,47
S	5 ₄	2	-	s	4 ₃	1	75585,81	0,17	s	17 ₁₃	4	-	s	17 ₁₂	5	77775,8	-0,23

где $\Delta\nu = \nu_{\text{Укслер.}} - \nu_{\text{Урвч.}}$

- [1] *A.A. Abduraxmanov, M.H. Elchiev, L.M. Imanov.* Изв. АН Азерб.ССР., сер. ФТ МН, 1969, №4, сс. 30-35.
- [2] *S. Kondo, E. Hirota.* J. Mol. Spectrosc., 1970, v. 34, No1, pp. 97-107.
- [3] *E. Hirota.* J.Chem. Phys., 1979, v. 83, № 11, pp. 1457-1465.
- [4] *O.N. Ulenikov, A.B. Malikova, Ch.O. Qajar, S.A. Musaev, A.A. Adilov and M.I. Mehtiev.* J. Mol. Spectrosc., 1991, 144, pp. 262-269,.
- [5] *C.A. Musaev.* Изв. АН Азербайджана, сер. ФТМН, 2000, т.2000, № 6, сс.155-161.
- [6] *Ч.О. Каджар, С.А. Мусаев, Э.Ч. Саидов.* ПТЭ, 1991, № 4, с. 134-137
- [7] *Ч.О. Каджар, С.А. Мусаев, Э.Ч., Саидов.* ПТЭ, 1992, № 4, с. 129-136.
- [8] *Ч.О.Каджар, С.А.Мусаев, Д.А.Джафаров, И.З.Мовсумов, Н.М.Каграманова.* Препринт 1997, №001, Института Фотоэлектроники АН Азерб., с 31.

S.A. Musayev

İZOPROPİL SPİRTİ MOLEKULASININ QOŞ-KONFORMERİNİN MİLLİMETRLİK FİRLANMA VƏ RƏQSİ-FİRLANMA SPEKTRLƏRİ

Hibrid spektrometrin köməyi ilə izopropil spirti molekulasının millimetrlük fırlanma spektri yazılmış və onun qoş-konformerinin 352 fırlanma və rəqsi-fırlanma keçidləri identifikasiya olunmuşdur. Molekulanın fırlanma, mərkəzəqaçma sabitləri, daxili fırlanmanın tunnel parçalanma parametri və daxili fırlanma sabitləri dəqiqləşdirilmişdir. Spektr təsvir etmək üçün Kvad-Lin Hamiltonianından istifadə olunmuşdur.

S.A. Musayev

THE MILLIMETER-WAVE ROTATIONAL AND VIBRATIONAL-ROTATIONAL SPECTRUM OF GAUCHE-ISOPROPYL ALCOHOL.

On hybrid radiospectrometer millimeter-wave spectrum isopropyl alcohol is written down. Nearly 352 lines were assigned to of gauche form transition. The frequencies of all transitions were least squares fitted to the inertial rotation Hamiltonian, the molecular constants of gauche form of isopropyl alcohol was determined.

Дата поступления: 27.04.01

Редактор: Ч.О. Каджар