

## МИКРОВОЛНОВЫЙ СПЕКТР МОЛЕКУЛЫ ТРЕТИЧНОГО БУТИЛОВОГО СПИРТА (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH

**Ч.О. КАДЖАР, С.Б. КАЗЫМОВА, А.С. ГАСАНОВА, Ф.Г. МАМЕДОВ**

*Институт Физики Национальной Академии Наук Азербайджана,*

*Баку, AZ-1143, проспект Г. Джавида, 131,*

[kazymova-s@mail.ru](mailto:kazymova-s@mail.ru)

Впервые проведено исследование микроволнового вращательного спектра молекулы третичного бутилового спирта (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH в диапазоне частот 15.9-31.72 ГГц. Теоретическая обработка спектра осуществлялась вращательным гамильтонианом Ватсона А-редукции, включающим всех квартичных и пятерых секстичных постоянных центробежного возмущения. Идентифицировано 24 вращательных переходов. Определены вращательные и центробежные постоянные молекулы.

**Ключевые слова:** микроволновый вращательный спектр, центробежные постоянные, гамильтониан Ватсона.

**PACS:** 82.80.Ch, 95.85.Bh, 98.58.±w

### ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе впервые проведено исследование микроволнового спектра молекулы третичного бутилового спирта (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH. Исследование вращательного спектра молекулы третичного бутилового спирта (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH проводилось в диапазоне частот 15.90 - 31.72 ГГц. Определенные вращательные и центробежные постоянные исследуемой молекулы должны значительно облегчить дальнейшее исследование вращательных спектров этой молекулы и поисков определенных спектральных линий в атмосфере и межзвездном пространстве.

Молекула третичного бутилового спирта (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH является молекулой типа асимметричного волчка (почти сжатый волчок с  $\chi = 0.975$ ). Она содержит трех метильных, и одну гидроксильную группы с осью "а" перпендикулярной плоскости

симметрии, в которой находятся дипольные моменты молекулы  $\mu_b$  и  $\mu_c$ . Эта молекула похожа на метиловый спирт и получается с заменой атомов водорода группой CH<sub>3</sub> в нем (метиловом спирте).

### РАСЧЕТ

Прежде чем, начать теоретическую обработку и идентификацию спектра рассчитаны вращательные постоянные и компоненты дипольного момента исследуемой молекулы, которые представлены в таблице 1.

Идентификация вращательных переходов исследуемой молекулы проводилась в диапазоне 15900-31720 МГц. Теоретическая обработка спектра осуществлялась вращательным гамильтонианом Уотсона А- редукции, включающим квартичные и секстичные центробежные термы [1]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2}(\tilde{X} - \tilde{Y})J^2 + \left[ \tilde{Z} - \frac{1}{2}(\tilde{X} + \tilde{Y}) \right] J^2 + \frac{1}{2}(\tilde{X} - \tilde{Y})J^2 J_{XY}^2 - \Delta_J J^4 - \Delta_{JK} J^2 J_z^2 \\ & - \Delta_K J_z^4 - 2\delta_J J^2 J_{XY}^2 - \delta_K (J_z^2 J_{XY}^2 + J_{XY}^2 J_z^2) + H_J J^6 + H_{JK} J^4 J_z^2 + H_{KJ} J^2 J_z^4 \\ & + H_K J_z^6 + 2h_J J^4 J_{XY}^2 + h_{JK} J^2 (J_z^2 J_{XY}^2 + J_{XY}^2 J_z^2) + h_K (J_z^4 J_{XY}^2 + J_{XY}^2 J_z^4) \end{aligned}$$

где:  $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{Z}$  - вращательные постоянные;  $\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_J, \delta_K$  - квартичные,  $H_J, H_{JK}, H_{KJ}, H_K, h_J, h_{JK}, h_K$  - секстичные постоянные центробежного искажения;  $J_x, J_y, J_z$  - компоненты полного углового момента  $J$  в произвольной системе координат  $X, Y, Z$ :

$$J^2 = J(J+1), J_{XY}^2 = J_x^2 + J_y^2.$$

Рассчитанные значения частот заново идентифицированных переходов подгонялись, последовательно, начиная с низких  $J$ , к их экспериментально измеренным значениям методом наименьших квадратов. Все расчеты проводились во втором осевом представлении. В результате удалось

идентифицировать 24 вращательных переходов. Определены центробежные постоянные и значительно уточнены вращательные постоянные исследуемой молекулы.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На гибридном радиоспектрометре зарегистрировано более 955 спектральных линий третичнобутилового спирта в диапазоне частот 15900-31720 МГц [2]. Было идентифицировано 24  $\mu_b$  и  $\mu_c$ - переходов попадающих в исследуемый микроволновый диапазон длин волн. В таблице 2 приводятся значения вращательных и центробежных постоянных, погрешностей их расчета, а также

**МИКРОВОЛНОВЫЙ СПЕКТР МОЛЕКУЛЫ ТРЕТИЧНОГО БУТИЛОВОГО СПИРТА (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH**

корреляционная матрица этих параметров исследуемой молекулы.

Таблица 1.

Значения вращательных постоянных, главных моментов инерции, дипольных моментов и параметра асимметрии молекулы третичного бутилового спирта (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH

Параметры	Значения
A	4753.9471
B	4750.0598
C	4446.0886
μ <sub>a</sub>	0
μ <sub>b</sub>	1.195
μ <sub>c</sub>	1.185
μ <sub>об</sub>	1.683
χ	0.97475
I <sub>a</sub>	106.3392
I <sub>b</sub>	106.4262
I <sub>c</sub>	113.7024

Определенные, в предлагаемой работе, вращательные и центробежные постоянные молекулы могут лечь в основу расчетов вращательных спектров молекулы в более широком диапазоне частот и с более высокими J.

Третичный бутиловый спирт используют как: промежуточный продукт в производстве изобутилена высокой степени чистоты из газов нефтепереработки; алкилирующий агент; сырье для производства трет-бутилгидропероксида и искусственного мускуса; растворитель; антисептик. Следовательно, исследование вращательного спектра этой молекулы представляет собой весьма актуальную задачу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики - Грант № EIF-BGM-3-BRFTF-2<sup>7</sup>/2017-15/03/1

Таблица 2.

Значения вращательных и центробежных постоянных молекулы – (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>OH, погрешности расчета и корреляционная матрица этих параметров

Параметры	Значения	Корреляционная матрица									
A (МГц)	4754.792 (47)	1.									
B (МГц)	4750.423(57)	0.	1.								
C (МГц)	4446.832(40)	0.	0.	1.							
Δ <sub>J</sub> (кГц)	71.672 (2520)	8	2	0							
Δ <sub>JK</sub> (кГц)	-22.768 (1578)	0.	0.	0.	1.						
Δ <sub>K</sub> (кГц)	17.971 (2078)	9	7	8	0						
δ <sub>J</sub> (кГц)	-1.404 (175)	-	0.	0.	0.	1.					
δ <sub>K</sub> (кГц)	7.507 (628)	0.1	1	1	0	0					
		-	-	0.	-	-	1.				
		0.0	0.1	0	0.0	0.7	0				
		-	0.	0.	0.	0.	0.	1.			
		0.1	0	2	0.0	6	1	0			
		-	-	0.	-	-	0.	0.	1		
		0.0	0.1	0	0.0	0.7	9	1	.0		

[1] J.K.G. Watson. Vibrational Spectra and Structure, vol.5 (1977)1-89

[2] Ç.O. Qacar., S.A. Musayev, S.B. Kazımova, A.A. Abdullayev, M.E. Əliyev (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH molekulunun

mikrodalğalı santimetrik təcürbi udulma spektrinin kataloqu. Priprint № 001. Bakı: Elm nəşriyyatı. 2004, 14 s.