

Исследование вращательного спектра комплекса CH₄-CO в миллиметровом диапазоне длин волн

И.В. Тарабукин, В.А. Панфилов, Л.А. Сурин

Институт спектроскопии РАН, ул. Физическая 5, 142190 Троицк, Москва

Исследован вращательный спектр ван-дер-ваальсового комплекса CH₄-CO с помощью внутривибронного спектрометра на базе оротрона со сверхзвуковой струей в диапазоне 110–145 ГГц. Впервые наблюдались переходы полосы $K = 2-1$, соответствующие основному вращательному состоянию свободного метана $j_{\text{CH}_4} = 0$, и переходы полос $K = 2-1$ и $K = 0-1$, соответствующие возбужденному состоянию метана $j_{\text{CH}_4} = 2$. Квантовое число K является проекцией полного углового момента J на межмолекулярную ось. Новые данные были проанализированы совместно с известными микроволновыми переходами [1–3] для определения молекулярных параметров комплекса CH₄-CO. Было проведено сравнение полученных экспериментальных данных с результатами *ab initio* расчетов поверхности потенциальной энергии CH₄-CO, выполненных с использованием метода связанных кластеров.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-03-09333.

Литература

1. Potapov A. V., Dolgov A. A., Panfilov V. A., Surin L. A. and Schlemmer S. Millimeter-wave study of the CH₄-CO complex: New measurements with OROTRON spectrometer. – J. Mol. Spectr. – 2011. – № 268. – p. 112.
2. Xia C., Walker K. A., Mckellar A. R. W. Infrared and millimeter wave spectra of the CH₄-CO complex in the A internal rotation state. – J. Chem. Phys. – 2001. – № 114. – p. 4824.
3. Liu Y., Jäger W. Microwave investigation of the CO-CH₄ van der Waals complex. – J. Chem. Phys. – 2004. – № 121. – p. 6240.