

# 碘甲烷 $V_5$ 带的红外高分辨率激光光谱

沈之焯 赵 耀 黄润兰 沈惠华 刘蕙芳

(中国科学院大连化学物理研究所)

朱清时

(中国科学院青海盐湖研究所)

碘甲烷是具  $C_{3v}$  对称性的对称陀螺分子, 其红外光谱已进行过大量的研究。然而它的  $\nu_5$  基频位于  $1437\text{cm}^{-1}$  附近, 与  $\text{H}_2\text{O}$  分子的一个强吸收带重叠, 光谱研究比较困难。这个谱带的高分辨光谱和有关常数尚未见报导。本报告对它的 FTIR 和半导体激光光谱研究的一些结果。

碘甲烷样品未经纯化。吸收池和仪器中的水气未能完全去除, 但在 FTIR 和半导体激光光谱这些高分辨率光谱中水气已不难区别开来。FTIR 光谱是在 Nicolet-7199 FTIR 光谱仪上作出的, 分辨率  $0.06\text{cm}^{-1}$ , 对测得的碘甲烷峰进行归属后, 把所有  $r, 2Q$  峰值代入:

$$\nu = \nu_0 + [A^5(1 - 2\zeta^5) - B^5] \pm 2[A^5(1 - \zeta^5) - B^5]K - [(A^5 - A^0) - (B^5 - B^0)]K^2 \quad (1)$$

进行最小二乘方拟合, 得出了相应的系数值。

使用 LS-3 激光光谱仪和一台在这个区域工作的半导体激光器,  $PQ(J)$  子带被进一步展开呈现出一组规则的  $J$ -线序。受多普勒线宽限制, 这个激光光谱的分辨率是  $0.005\text{cm}^{-1}$ 。归属后把测量值代入:

$$\nu = \nu_0 + (B^5 - B^0)J(J+1) - (D_J^5 - D_J^0)J^2(J+1)^2 \quad (2)$$

进行最小二乘方拟合, 得出了相应的系数值。使用已知的基态常数值,  $B^0 = 0.250216$ ,  $A^0 = 5.1734$  和  $D_J^0 = 2.104 \times 10^{-7}\text{cm}^{-1}$ , 推出  $\nu_5$  态的常数值是:  $B^5 = 0.24998$ ,  $A^5 = 5.187564$ ,  $D_J^5 = 2.104 \times 10^{-7}\text{cm}^{-1}$ ,  $\zeta^5 = -0.186$ 。

使用作者自己编的计算机程序, 用上述常数值得到了碘甲烷  $V_5$  带的模拟光谱, 与实验光谱符合得较好。

光谱的拟合和模拟是在 DEC 公司产 MINC 计算机上进行的。本工作正在进一步重复, 以便得出更精确的常数值。