

- [8] Лялин Г. Н., Сирота В. Г., Филимонов В. Н. — Биофизика, 1973, т. 18, с. 618.
 [9] Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.
 [10] Heelis P. F. — Chem. Soc. Rev., 1982, v. II, N I, p. 15.
 [11] Song P.-S., Moore T. A., Kurtin W. E. — Z. Naturforsch., 1972, Bd. 27b, S. 1011.
 [12] Eweg J. K., Müller F. — Photochem. Photobiol., 1979, v. 30, p. 463.
 [13] Kakutani T., Kano K., Ando S., Senda M. — Bull. Chem. Soc. Jap., 1981, v. 54, N 3, p. 884.

Поступило в Редакцию 31 мая 1984 г.

УДК 535.33/34-12 : 546.212

Оптика и спектр., т. 59, в. 3, 1985

МИКРОВОЛНОВЫЙ СПЕКТР МОЛЕКУЛЫ H_2^{16}O В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ

Буренин А. В., Шапин С. М.

Информация о микроволновом спектре молекулы воды имеет важное значение для многочисленных приложений в области астрофизики, физики атмосферы, анализа веществ особой чистоты и т. д. Получение всей необходимой информации только экспериментальным путем связано со значительными трудностями и при этом отождествление относительно слабых линий все равно требует адекватного теоретического расчета, поэтому в настоящей работе сделан расчет частот, погрешностей их предсказания, интенсивностей и сил линий электродипольных переходов для основного состояния молекулы H_2^{16}O в области частот 1—1200 ГГц (область длин волн от 30 см до 0.25 мм). Для расчета использованы все известные высокоточные микроволновые [1-3] и инфракрасные [4, 5] измерения частот вращательных переходов H_2^{16}O в основном состоянии (всего примерно 450 переходов, из которых только 23 микроволновых). Расчет проводился на основе представления эффективного вращательного оператора Гамильтона в редуцированной Паде форме [6]. Использованное нами определение силы линии соответствует [7]. Волновые функции для расчета сил линий брались с учетом центробежных эффектов, но возможная слабая зависимость дипольного момента молекулы от вращательного состояния не учитывалась. Приведенные интенсивности переходов соответствуют максимумам линий поглощения в предположении лорентцевской столкновительной формы линии. Параметр уширения для полуширины спектральной линии на уровне половинной интенсивности предполагался для всех линий одинаковым и был взят равным 20 МГц/Тор. Вращательная статистическая сумма рассчитывалась в предположении жесткого асимметрического волчка. Колебательная статистическая сумма и изотопическая распространенность были взяты равными 1. При определении интенсивностей переходов учитывалось влияние ядерных статистических весов.

Частоты, силы линий и интенсивности переходов (см. таблицу) рассчитаны при следующих условиях: абсолютная температура $T=300$ К; дипольный момент $\mu = \mu_D = 1.84$ Деб; граница расчета по квантовому числу углового момента $J \leq 15$; граница расчета по интенсивности $\gamma > 10^{-15}$ см⁻¹.

Переход		Частота (погрешность), * МГц	Интенсивность, см ⁻¹	Сила линии
нижнее состояние	верхнее состояние			
5 (2.3)	6 (1.6)	22 235.079849 (50)	6.9E-6	5.84E-2
15 (3.12)	14 (6.9)	138 214 (699)	3.1E-9	2.06E-1
2 (2.0)	3 (1.3)	183 310.0906 (15)	1.2E-3	1.03E-1
15 (3.13)	14 (4.10)	247 303 (625)	6.6E-9	1.54E-1
14 (3.11)	13 (6.8)	260 031 (246)	1.5E-8	1.63E-1
9 (3.6)	10 (2.9)	321 225.65 (24)	4.5E-5	1.00E-1
4 (2.2)	5 (1.5)	325 152.919 (27)	1.5E-3	9.24E-2
3 (2.1)	4 (1.4)	380 197.370 (25)	1.3E-2	1.25E-1
11 (2.10)	10 (3.7)	390 134.510 (60)	5.2E-6	7.62E-2
6 (6.0)	7 (5.3)	437 346.23 (14)	8.5E-5	9.87E-2
5 (5.0)	6 (4.3)	439 150.869 (53)	1.2E-3	1.09E-1
6 (6.1)	7 (5.2)	443 018.25 (17)	2.6E-4	9.88E-2
3 (3.0)	4 (2.3)	448 001.078 (22)	1.4E-2	1.35E-1
5 (5.1)	6 (4.2)	470 888.96 (16)	4.7E-4	1.09E-1
4 (4.0)	5 (3.3)	474 689.041 (74)	1.8E-3	1.23E-1
7 (1.7)	6 (2.4)	488 491.17 (38)	3.6E-4	3.74E-2
7 (7.0)	8 (6.3)	503 568.474 (74)	6.0E-5	9.31E-2
7 (7.1)	8 (6.2)	504 482.771 (74)	2.0E-5	9.31E-2
13 (4.9)	14 (3.12)	530 218 (223)	5.2E-7	1.71E-1
1 (0.1)	1 (1.0)	556 936.045 (88)	8.5E-1	1.50
13 (3.10)	12 (6.7)	572 154 (123)	7.1E-7	1.15E-1
15 (4.11)	14 (7.8)	591 452 (1366)	1.7E-8	1.36E-1
4 (4.1)	5 (3.2)	620 700.75 (18)	9.6E-3	1.27E-1
8 (8.0)	9 (7.3)	645 766.118 (80)	4.9E-6	9.13E-2
8 (8.1)	9 (7.2)	645 905.504 (80)	1.5E-5	9.13E-2
2 (0.2)	2 (1.1)	752 033.40 (41)	5.7E-1	2.07
12 (2.10)	11 (5.7)	766 801 (66)	3.4E-6	1.04E-1
11 (2.9)	10 (5.6)	841 033 (42)	3.6E-5	8.35E-2
13 (2.11)	12 (5.8)	854 120 (110)	3.6E-6	1.17E-1
9 (9.0)	10 (8.3)	863 799 (11)	3.3E-6	9.36E-2
9 (9.1)	10 (8.2)	863 820 (11)	1.1E-6	9.36E-2
8 (3.5)	9 (2.8)	906 202.2 (48)	5.2E-4	1.43E-1
3 (3.1)	4 (2.2)	916 171.68 (15)	2.4E-2	1.67E-1
4 (3.1)	5 (2.4)	970 315.03 (15)	2.7E-2	2.71E-1
1 (1.1)	2 (0.2)	987 926.64 (14)	4.2E-1	7.58E-1
14 (2.12)	13 (5.9)	1068 888 (178)	4.8E-7	1.27E-1
3 (0.3)	3 (1.2)	1097 365.24 (89)	2.8	2.18
12 (3.9)	11 (6.6)	1101 205 (85)	2.3E-6	6.81E-2
10 (2.8)	9 (5.5)	1109 586 (37)	4.8E-5	5.73E-2
0 (0.0)	1 (1.1)	1113 343.21 (35)	8.4E-1	1.00
8 (1.8)	7 (2.5)	1146 623.9 (19)	2.0E-3	2.61E-2
2 (2.1)	3 (1.2)	1153 126.87 (29)	4.3E-1	3.04E-1
12 (2.11)	11 (3.8)	1153 343 (18)	3.5E-5	6.38E-2
10 (10.0)	11 (9.3)	1154 987 (74)	2.2E-7	1.01E-1
10 (10.1)	11 (9.2)	1154 990 (74)	6.5E-7	1.01E-1
5 (4.1)	6 (3.4)	1158 338.1 (38)	4.3E-2	2.96E-1
3 (1.2)	3 (2.1)	1162 912.4 (21)	3.0	2.54
7 (6.1)	8 (5.4)	1168 414 (28)	2.1E-3	2.62E-1
6 (5.1)	7 (4.4)	1172 571 (13)	3.7E-3	2.79E-1
7 (6.2)	8 (5.3)	1190 885 (28)	7.4E-4	2.63E-1

Примечание. * В скобках указана погрешность предсказания частоты, соответствующая среднеквадратичному отклонению, в единицах последней значащей цифры.

Литература

- [1] De Lucia F. C., Helminger P., Kirchhoff W. H. — J. Phys. Chem. Data, 1979, v. 3 (4), p. 211—219.
- [2] Burenin A. V., Fevral'skikh T. M., Karyakin E. N., Polyansky O. L., Shapin S. M. — J. Mol. Spectr., 1983, v. 100, p. 182—192.
- [3] Helminger P., Messer G. K., De Lucia F. C. — Appl. Phys. Lett., 1983, v. 42, p. 309—310.
- [4] Patridge R. H. — J. Mol. Spectr., 1981, v. 87, p. 429—437.
- [5] Kauppinen J., Kärkkäinen T., Kyrö B. — J. Mol. Spectr., 1978, v. 71, p. 15—45.
- [6] Burenin A. V., Tyuterev V. G. — J. Mol. Spectr., 1984, v. 108, p. 153—154.
- [7] Schwendeman R. H., Laurie V. W. Tables of line strengths for rotational transitions of asymmetric rotor molecules. Pergamon Press, 1957.

Поступило в Редакцию 16 августа 1984 г.