

# XX Всесоюзный съезд по спектроскопии

---



*Тезисы  
докладов*

---

Часть 1

Киев,  
сентябрь  
1988

---

## ТОНКОСТРУКТУРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ, ОХЛАЖДЕННЫХ В СВЕРХЗВУКОВОЙ СТРУЕ

И.М.Гулис, А.И.Комяк, К.А.Саечников, В.А.Цвирко

Спектроскопия молекул в сверхзвуковой струе обладает преимуществами низкотемпературной матричной спектроскопии и спектроскопии свободных молекул. Особенно существенно применение указанной методики для молекул, которые при комнатной температуре в растворах имеют широкие бесструктурные электронно-колебательные спектры поглощения и флуоресценции (например, молекулы производных фталимида и антрацена).

Для охлажденных в сверхзвуковой струе молекул 3-аминофталимида (3-АФ) и 9-цианоантрацена (9-СНА) и их ван-дер-ваальсовских комплексов с молекулами инертных газов и растворителей (метанол, вода и др.) показаны особенности структуры спектров возбуждения и флуоресценции. Характерной особенностью спектров является активность низкочастотных колебаний  $212 \text{ см}^{-1}$  для 3-АФ и  $217 \text{ см}^{-1}$ ,  $381 \text{ см}^{-1}$  для 9-СНА, формирующих прогрессии в спектрах. Проведенный анализ интенсивностей линий в рамках адиабатического, гармонического и франк-кондоновского приближений при возбуждении частотами чисто электронного и первого вибронного переходов указывает на хорошее соответствие расчетных и экспериментальных распределений интенсивностей в прогрессиях. За распределение интенсивностей в группах узких ( $\sim 2 \text{ см}^{-1}$ ) линий спектров возбуждения предполагается ответственным резонанс Ферми.

Сопоставляются сдвиги спектров молекул 3-АФ и 9-СНА, полученные при образовании ван-дер-ваальсовских комплексов 1:1 с молекулами растворителя (вода, метанол и др.), со сдвигами при переходе от газовой фазы к раствору. Для молекулы 9-СНА анализируются особенности сдвига спектра при образовании комплексов с  $A_2$  (1:1; 2:1; 3:1; 4:1; 5:1) и при образовании комплексов 9-СНА +  $A_2$  (1:1) + молекулы растворителя. В отдельных случаях обнаружено проявление в электронных спектрах низкочастотных ван-дер-ваальсовских колебаний.