

## 乙烯 $\nu_7$ 带的谱线强度和压力加宽

沈珊雄 蔡佩佩 张涵生 郑一善

(华东师范大学物理系)

乙烯是一种重要的工业原料, 近年来, 巨大的乙烯工程在全国范围内相继建立, 因此对乙烯分子的研究显得颇为重要。从光谱角度来看, 必须确定五个参数, 即跃迁频率、低态能级、谱线强度、半宽度和中心频率压力位移, 才算对一条谱线作了测定, 才能精确计算分子辐射和吸收。对乙烯来说, 它的分子结构是非对称转子, 它的振动转动谱带比对称转子复杂得多, 对称转子的简并能级, 在非对称转子情况下都分裂了, 因而跃迁选择定则和跃迁谱线也就相应变得复杂起来。 $C_2H_4$  有 12 个基振频率, 其中  $\nu_7$  带中心频率在  $950\text{ cm}^{-1}$  附近。从理论上讲, 上述五个谱线参数原则上都可计算, 实际上由于缺乏可靠的实验数据而难于进行。本文在实验中利用  $CO_2$  激光测量了  $\nu_7$  带  $2S_{1,27} \leftarrow 2S_{2,27}$  跃迁的谱线强度、半宽度(自加宽和外加宽系数)和压力位移。

实验所用激光器为自制  $CO_2$  激光, 光栅选支。试样池用 NaCl 窗片, 长 21 cm, 经抽真空后充入  $C_2H_4$  20 mm Hg, 再加入空气至一大气压左右。激光用红外分光计监察, 经试样池前后的激光用钽酸锂探测器接收。实验选用  $949.51\text{ cm}^{-1}$  的 P(14) $CO_2$  激光线。在记录均方根电子电压表数据后, 改变试样池内气压, 重复测量。

实测吸收系数可由下式决定:

$$k = \frac{1}{PL} \ln \left( \frac{I_0}{I} \right), \quad (1)$$

其中  $I_0$  和  $I$  分别为经过试样池前后的光强,  $P$  为气体样品气压,  $L$  为试样池长度,  $k$  为  $C_2H_4$  分子吸收系数。由于试样池内气体已被空气加宽, 因而吸收系数  $k$  由洛仑兹线型给出:

$$k = \frac{S}{\pi} \frac{(\alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2)}{\Delta\nu^2 + (\alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2)^2}, \quad (2)$$

其中  $S$  为谱线强度,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  为自加宽和空气加宽系数,  $P_1$ ,  $P_2$  为  $C_2H_4$  和空气压强,  $\Delta\nu$  为  $C_2H_4$  谱线对激光谱线的偏离。根据不同压强条件下测得的  $k$  值, 利用最小二乘法对式(2)进行参数拟合, 得到谱线强度  $S = 7.61\text{ cm}^{-2}\text{ atm}^{-1}$ , 自加宽系数  $\alpha_1 = 0.161\text{ cm}^{-1}\text{ atm}^{-1}$ , 空气加宽系数  $\alpha_2 = 0.0693\text{ cm}^{-1}\text{ atm}^{-1}$ ,  $C_2H_4$  谱线在 1 大气压空气加宽下谱线中心与  $CO_2$  P(14) 线偏离  $0.0136\text{ cm}^{-1}$ 。

1978 年 G. Tejwani 等人曾对  $C_2H_4$  分子用 Anderson-Tsao-Curnutte 理论作过压力加宽线宽计算。由于  $C_2H_4$  分子在基态时无永偶电极矩, 计算时必须考虑四极矩-四极矩相互作用, 因此计算相当繁琐。本文所得实验值与他们的理论计算值符合较好。

本工作受中国科学院(82)科学基金准字 430 号资助。