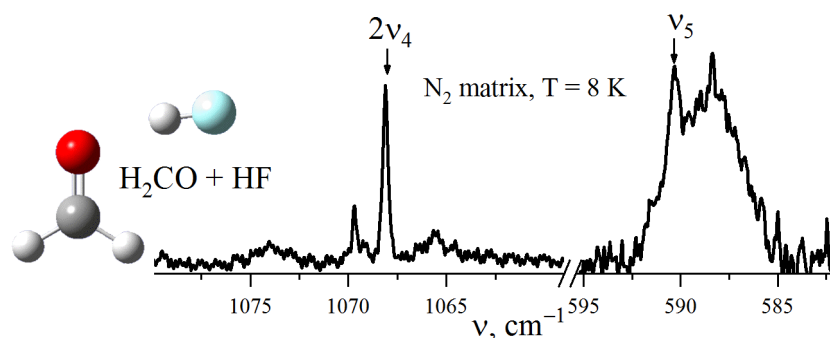


Успешное сочетание квантово-механических расчетов и эксперимента при исследовании спектра комплекса $\text{H}_2\text{CO}\cdots\text{HF}$ в азотной низкотемпературной матрице.

Физический факультет, кафедра молекулярной спектроскопии. Санкт-Петербургский Гос Университет

Спектроскопические исследования позволяют проводить практически прямую проверку предсказаний квантово-механических расчетов свойств молекулярных систем, в частности, частоты и интенсивности спектральных полос поглощения молекул и молекулярных комплексов. Достаточно простые комплексы, при изучении которых можно проследить различные тенденции, часто не могут существовать в обычных условиях. Для регистрации спектров таких комплексов необходимо использовать различные техники, например, метод низкотемпературной матричной изоляции. Суть ее заключается в одновременном осаждении изучаемых молекул, их смесей и молекул матричного газа, как правило, азота или благородного газа, которые прозрачны в ИК области спектра и достаточно слабо взаимодействуют с изучаемыми системами при низких (порядка 10 – 20 К) температурах. Низкая температура и маленькая концентрация (примерно 1 изучаемая молекула или комплекс на 1000 и более молекул матричного газа) позволяют существенно упростить спектры по сравнению, со спектрами, зарегистрированными при комнатной температуре.

В данном исследовании впервые удалось изучить комплекс, образованный молекулами HF (фтористого водорода) и H_2CO (формальдегида), являющийся простейшим комплексом с водородной связью с участием карбонильной группы и который поэтому может считаться модельным для изучения подобных систем. Расчеты, проведенные на высоком квантово-механическом уровне, с учетом ангармонических эффектов при помощи как коммерческих программ (Gaussian 16), так и разработанными участниками коллектива, позволили предсказать структуру комплекса, энергию связи и спектр поглощения, зарегистрированный в азотной матрице, с достаточно высокой точностью. Сравнение спектров, зарегистрированных для чистых газов HF и H_2CO и их смесей, позволило выделить полосы поглощения комплексов. Для определения состава комплексов (димеры, тримеры) спектры измерялись при различных концентрациях мономеров. Расчетные значения частот и интенсивностей спектральных полос оказались в прекрасном согласии с экспериментальными данными, что позволило однозначно идентифицировать детали экспериментальных спектров. В качестве наиболее интересных результатов можно считать предсказание высокой интенсивности обертона либрационной моды $2\nu_4$ мономера HF в комплексе.



Результат опубликован: R.E. Asfin, V.P. Bulychev, M.V. Buturlimova, K.G. Tokhadze. Theoretical and matrix isolation studies of infrared spectra of the $\text{H}_2\text{CO}\cdots\text{HF}$ hydrogen-bonded complex. J. Mol. Struct. 1225 (2021) 129080 doi: 10.1016/j.molstruc.2020.129080