Комбинационное рассеяние света (рамановское рассеяние)

1.1.1 Введение

Рассеянием света называется явление, заключающееся в том, что взаимодействие среды со световым пучком приводит к появлению электромагнитного излучения того же или иного спектрального состава в направлениях, отличающихся от первоначального. Это определение подходит и для фотолюминесценции, но фотолюминесценцию обычно связывают с поглощением падающего светового кванта и последующим излучением другого светового кванта, соответствующего оптическому переходу между реальными электронными уровнями системы. Рассеяние же имеет место и в том случае, когда световой квант попадает в область оптической прозрачности среды и не может перевести систему на более высоколежащий реальный уровень. Спектрально рассеяние “привязано” к возбуждающей линии, тогда как люминесценция, как уже говорилось, определяется собственными уровнями энергии системы.

Рассеяние электромагнитной волны без изменения ее частоты изучалось Р. Релеем, и называется релеевским. Подчеркнем, что рассеяние, о котором мы будем говорить далее, не является рассеянием в мутной среде, имеющей макроскопические неоднородности (такие неоднородности появляются, например, в газе, жидкости и твердом теле при критических температурах, в этой ситуации наблюдается интенсивное рассеяние – так называемая критическая опалесценция). Релей считал, что самого факта существования молекулярной структуры газа уже достаточно, чтобы объяснить рассеяние света. Позже было показано, что необходимым условием релеевского рассеяния является наличие в среде статистических флуктуаций плотности в объемах, не очень малых по сравнению с длиной волны света.

Дальнейшие исследования показали, что спектр рассеянного света содержит кроме спектральных линий, характеризующих падающий на среду свет, дополнительные линии, симметрично расположенные с низкочастотной и высокочастотной сторон около спектральных линий первичного света (*рис.1*) [стоксовская (S) и антистоксовская (AS) компоненты рассеяния]. Системы этих дополнительных линий различны для различных веществ, и таким образом разности частот первичной световой волны и дополнительных линий характеризуют частоты собственных резонансов среды. Это явление, обнаруженное в 1928 г В. Раманом и К. Кришнаном в Индии и Л.И.Мандельштамом и Г.С.Ландсбергом в Советском Союзе, называется рамановским, или комбинационным рассеянием света (КРС). КРС наблюдается в различных средах – газах, жидкостях, кристаллах. Причиной изменения частоты рассеяния является комбинированный процесс, в результате которого под действием падающего светового кванта появляется другой световой квант и одновременно в среде происходит поглощение или освобождение определенной порции энергии. Вообще говоря, эта энергия может быть связана с различными процессами – периодическим движением атомов в молекуле или кристалле около положения равновесия, переходами электронов с одного уровня на другой, так называемыми спиновыми волнами в

магнитоупорядоченных средах, плазменными колебаниями в твердых телах и т. д. Однако обычно под КРС понимается появление дополнительных комбинационных линий, соответствующих изменениям во вращательном и колебательном движении атомов в молекуле или в кристаллической решетке (далее мы ограничимся рассмотрением колебательного движения).

1.1.2 . Классическое рассмотрение КРС

Если на среду падает электромагнитная волна с частотой ν_0 и электрическим вектором $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \cos 2\pi\nu_0 t$,
то под действием этой волны в системе индуцируется дипольный момент

$$\boldsymbol{p} = \alpha\boldsymbol{E} = \alpha\boldsymbol{E}_0 \cos 2\pi\nu_0 t , \qquad (1)$$

где α - тензор поляризуемости системы. Важным является тот факт, что поляризуемость молекулы (кристалла) периодически меняется во времени с частотами собственных колебаний молекулы (кристалла), поскольку поляризуемость в определенный момент времени зависит от соответствующего этому моменту расположения атомов друг относительно друга. Таким образом, поляризуемость является функцией координат атомов молекулы (кристалла), которые периодически меняются с частотами собственных колебаний системы Ω_k:

$$\alpha(q_k) = \alpha_0 + \Sigma_k (d\alpha/dq_k)_0 q^0_k \cos \Omega_k t + 1/2\Sigma_{km} (d^2\alpha/dq_k dq_m)_0 q^0_k q^0_m \cos \Omega_k t \cos\Omega_m t + \ldots , \qquad (2)$$

где $q_k = q^0_k \cos\Omega_k t$ – смещения атомов от положения равновесия.
Если подставить разложение (2) поляризуемости α по собственным колебаниям системы в выражение (1), то легко убедиться в специфических частотных характеристиках индуцированного дипольного момента системы. Этот индуцированный дипольный момент следует рассматривать как источник вторичного электромагнитного излучения, формирующего спектр рассеяния. Первый член (2) дает изменение p во времени с частотой ν_0 (релеевское рассеяние), второй – с частотами $(\nu_0+\Omega_k)$ и $(\nu_0-\Omega_k)$, третий – с частотами типа $(\nu_0+\Omega_k+\Omega_m)$, $(\nu_0-\Omega_k+\Omega_m)$ и т.д. . Второму и третьему членам разложения (2) соответствуют спектры комбинационного рассеяния первого и второго порядков. Интенсивность спектров второго порядка очень мала, и в дальнейшем мы будем рассматривать только КРС первого порядка.

1.1.3 . Квантовомеханическое рассмотрение

Механизм появления линий с частотами $(\nu+\Omega_к)$ и $(\nu_0-\Omega_к)$ схематически представлен на рис. 2 (для простоты будем считать, что в среде существует одна колебательная частота Ω_0). Мы рассматриваем случай нерезонансного рассеяния, когда частота возбуждающего света ν_0 попадает в область

прозрачности среды. По этой причине уровень i, соответствующий промежуточному состоянию системы, является виртуальным – его введение отражает факт взаимодействия света со средой, иначе не было бы рассеяния. Отметим, что энергетическое положение уровня i определяется энергией квантов светового пучка, возбуждающего рассеяние. Уровни l и r являются начальным и конечным колебательными состояниями нижнего электронного состояния среды – это уровни энергии квантового осциллятора, которые для n-ного уровня определяется выражением

$$E_n = h\Omega_0(n + 1/ 2) . \qquad (3)$$

В зависимости от того, какой из уровней – l или r выше, компонента рассеяния является стоксовской или антистоксовской. Виртуальный уровень i не является стационарным состоянием системы, и соответствующая ему волновая функция Ψ_i зависит от времени. Функция Ψ_i может быть построена как линейная комбинация волновых функций реальных стационарных состояний системы с коэффициентами, зависящими от времени. Вклад конкретного реального уровня в эту линейную комбинацию зависит от энергетического расстояния между виртуальным уровнем и этим реальным уровнем (если уровень i совпадает с реальным энергетическим уровнем системы, то происходит поглощение света). Уровни l и r всегда являются реальными состояниями нижнего электронного состояния, и поэтому им соответствуют стационарные волновые функции $\Psi_{0\,l}$ и $\Psi_{0\,r}$.

Мы не будем приводить довольно громоздкие квантовомеханические выражения, которые описывают эффективность КРС. Укажем только, что они конструируются как произведения двух матричных элементов, описывающих оптические переходы из начального состояния l в промежуточное виртуальное i и из виртуальноего состояния i – в конечное состояние r.

1.1.4 . Правила отбора для типов колебаний молекулы (кристалла).

Из формулы (2) видно, что вклад колебания q_k в величину модуляции поляризуемости этим колебанием зависит от значения производной $(d\alpha/dq_k)_0$ в положении равновесия молекулы. Она определяет в конечном счете интенсивность пары компонент КРС с частотами $(\nu_0+\Omega_k)$ и $(\nu_0-\Omega_k)$. Колебания, которым соответствуют относительные движения атомов, не меняющие поляризуемость системы, неактивны в КРС. Таким образом, критерием активности колебания q_k в спектрах КРС является условие $(d\alpha/dq_k)_0 \neq 0$. При помощи теоретико-группового анализа можно показать, что для молекул и кристаллов, группа симметрии которых включает центр инверсии, существует правило, согласно которому одни и те же типы колебаний не могут одновременно быть активными и в КРС, и в поглощении света. Здесь под поглощением света понимается поглощение светового кванта с энергией $h\nu_0 = h\Omega_0$ и рождение колебательного кванта с той же энергией [см. выражение (3)].

Рассмотрим конкретный пример – молекулу ацетилена С–Н = С–Н . Если молекула состоит из числа S атомов, то она имеет 3s степеней свободы. Из них (3s–6) определяют позиции атомов в молекуле друг относительно друга, а

остальные 6 степеней свободы описывают положение и ориентацию молекулы в пространстве. Поскольку молекула ацетилена линейна, то эти цифры равны соответственно (3s–5) и 5. Итак, у молекулы ацетилена имеется 7 типов колебаний, из которых два, соответствующие движениям атомов перпендикулярно оси молекулы, являются дважды вырожденными. Ниже схематически показаны типы колебаний молекулы ацетилена и соответствующие им частоты.

H C C H $\omega_1 = 1960$ см$^{-1}$

H C C H $\omega_2 = 2277$ см$^{-1}$

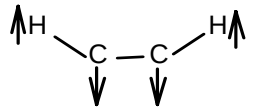
H C C H $\omega_3 = 3320$ см$^{-1}$

H C C H $\omega_4 = 1328$ см$^{-1}$ (дважды вырожденное)

↓ ↑ ↓ ↑

H C C H $\omega_5 = 729$ см$^{-1}$ (дважды вырожденное)

↑ ↓ ↓ ↑



Из этих колебаний первое и третье меняют поляризуемость молекулы и являются активными в комбинационном рассеянии. Остальные колебания меняют дипольный момент системы, т.е. могут возбуждаться электромагнитной волной и, таким образом, активны в поглощении.

1.1.5 Соотношение интенсивностей S- и AS- компонент рассеяния

В теории рассеяния было показано, что интенсивность рассеяния растет пропорционально 4-ой степени частоты света. Это дает соотношение интенсивностей между антистоксовой *AS*- и стоксовой *S*- компонентами, пропорциональное величине $[(\nu_0 - \Omega_k)/(\nu_0 + \Omega_k)]^4$ (обычно $\nu_0 >> \Omega_k$). Далее мы рассмотрим температурную зависимость соотношения интенсивностей компонент I_{AS} и I_S. Молекула дает вклад в *AS*- компоненту рассеяния в том случае, когда она находится в возбужденном состоянии. Число молекул, находящихся в состоянии с энергией *E*,

$$N_E = N_0 \exp(-E/k_bT),$$

где N_0 – общее число молекул в системе, k_b – постоянная Больцмана, T – температура. Если основному состоянию соответствует энергия E_0, а возбужденному E_1, то

$$I_{AS}/I_S = [(\nu_0-\Omega_k)/(\nu_0-\Omega_k)]^4 \exp[-(E_1-E_0)/k_bT].$$

В соответствии с соотношением (3) для начального и конечного колебательных состояний с $\Delta n = 1$ получим

$$I_{AS}/I_S = [(\nu_0-\Omega_k)/(\nu_0+\Omega_k)]^4 \exp(-h\Omega_k/k_bT).$$

Температурная асимптотика интенсивности компонент КРС является следующей. При высокой температуре показатель экспоненты близок к нулю, и интенсивности *AS*- и *S*- компонент становятся близкими. При низкой температуре отношение интенсивностей компонент стремится к нулю: абсолютная интенсивность *AS*-компоненты, для которой начальным является возбужденное состояние молекулы, при понижении температуры стремится к нулю, а интенсивность *S*-компоненты – к некоторому конечному значению.

1.1.6 Комбинационное рассеяние света как метод изучения вещества

Из вышеизложенного ясно, что с помощью спектров КРС можно измерять частоты собственных колебаний молекул и кристаллов. Это открывает широкие возможности для идентификации веществ и исследования происходящих в них превращений под влиянием внешних воздействий. Приведем несколько примеров. Одно и то же вещество может иметь несколько модификаций, скажем, углерод бывает в форме графита, алмаза, аморфной фазы. Химический или спектральный анализы не дают возможности отличить эти фазы, но спектры КРС для них будут различаться, поскольку для комбинационного рассеяния важен не только химический состав вещества, но и его структура. С помощью КРС можно изучать процессы плавления кристаллов и кристаллизации жидкостей, исследовать химические реакции в растворах, фиксировать появление на поверхности твердых тел тонких пленок и характеризовать их структуру, и т. д. Изменение температуры, давления и других внешних факторов приводят к изменению симметрии решетки некоторых кристаллов (структурные фазовые превращения). Перестройка кристаллической решетки, естественно, приводит к изменению ее колебательного спектра, и КРС является тонким инструментом для анализа этих превращений.

1.1.7 Экспериментальные детали

В настоящей работе предлагается зарегистрировать спектр комбинационного рассеяния жидкости (однокомпонентной или смеси двух жидкостей) и по измеренным частотам колебаний идентифицировать исследуемые вещества, пользуясь таблицей, в которой приведены колебательные частоты ряда молекул. Источником света могут быть либо лазер, либо линейчатый спектр излучения ртутной лампы, из которого выделяются несколько линий синей области. Каждая ртутная линия в этом случае дает свой спектр КРС, и, естественно, что эти спектры идентичны. Спектральным прибором является двойной дифракционный монохроматор ДФС-12, световой поток из которого поступает на фотоэлектрический умножитель, преобразуется в электрический сигнал, усиливается и регистрируется самопишущим потенциометром (*рис3*). Длины волн (энергии фотонов) для ртутных линий хорошо известны, и они могут служить реперами для определения дисперсии спектрального прибора (у спектрометров с дифракционными решетками дисперсия очень слабо зависит от длины волны) и энергетических расстояний между возбуждающими линиями и их комбинационными сателлитами.

Более подробно с деталями экспериментальной установки, методиками проведения эксперимента и расшифровки спектра, а также с требованиями, предъявляемыми к отчету, можно ознакомиться непосредственно в лаборатории.

ОПИСАНИЕ СПЕКТРОМЕТРА ДФС-12

Оптическая схема прибора построена по принципу двойного монохроматора

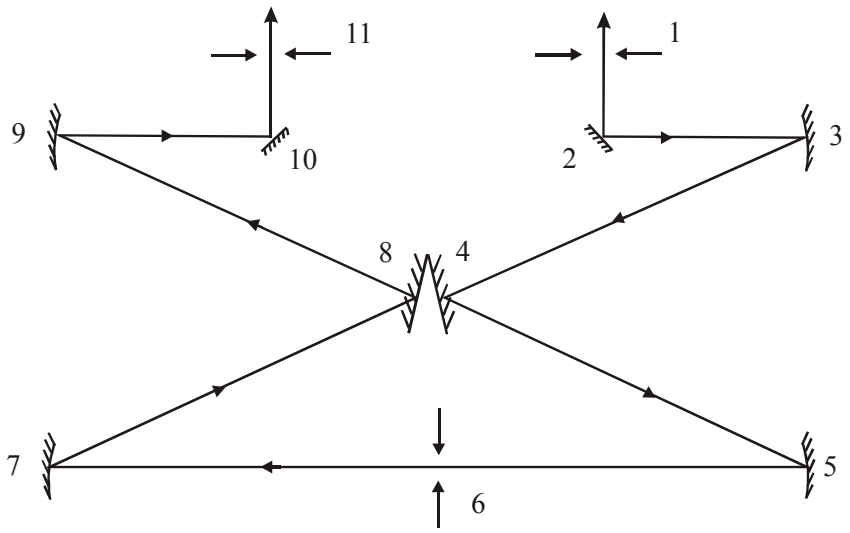


Рис. 1

Выходная щель (1) расположена в фокальной плоскости зеркального параболического объектива (3), свет на который направляется от щели плоским поворотным зеркалом (2). Объектив (3) направляет параллельный пучок на дифракционную решетку (4), диспергированный свет собирается объективом (5), в фокальной плоскости которого помещается промежуточная щель (6). Монохроматический свет, пройдя промежуточную щель, которая является одновременно входной щелью второго монохроматора, направляется зеркальным объективом (7) на дифракционную решетку (8) и после вторичной дифракции направляется объективом (9) и поворотным зеркалом (10) на выходную щель (11).

Схема двойной монохроматизации позволяет значительно увеличить дисперсию прибора и, кроме того, значительно уменьшает величину рассеянного света внутри прибора.

В данном приборе использование дифракционной решетки 600 штр./мм обеспечивает линейную дисперсию на выходной щели в синей области спектра 5Å/мм при фокусном расстоянии объективов 822 мм.

Сканирование по спектру осуществляется синхронным поворотом обоих решеток, либо вручную соответствующим барабаном, либо электрическим двигателем.

В качестве приемника излучения используется фотоэлектрический умножитель ФЭУ-17. ФЭУ питается от высоковольтного стабилизатора через делитель напряжения. Напряжение питания подбирается экспериментально для

каждого ФЭУ с учетом наиболее выгодного отношения сигнала и шума и может меняться в пределах 700-1100 В.

Для улучшения отношения сигнал/шум в работе используется система регистрации, работающая по принципу «счет фотонов».

При усилении фотоэлектронов, ФЭУ вырабатывает на аноде импульс отрицательной полярности, амплитуда которого колеблется в небольших пределах. Импульсы меньшей и большей амплитуды являются шумом, вызванным автоэлектронной и вторичной эмиссией из эмиттеров, тепловыми шумами сопротивлений и т.д.

Усилители, работающие по «постоянному току», усиливают импульсы любой амплитуды.

Электронно-счетная система регистрации ПР 14-М позволяет усиливать импульсы, амплитуда которых находится в определенных пределах. Импульсы большей и меньшей амплитуды в устройстве не усиливаются. Тем самым повышается отношение сигнал/шум.

ОСВЕТИТЕЛЬ

Для возбуждения спектров комбинационного рассеяния жидких и твердых образцов используется осветитель ИСК-1 со спиральной ртутной лампой низкого давления.

Свет ртутной лампы, проходя через исследуемый образец, рассеивается им и с помощью осветительной системы освещает щель прибора.

Для более полного использования рассеянного образцом света в случае применения кювет средних и малых размеров в осветителе предусмотрена проекционная система с разделителем изображения, позволяющая осветить всю высоту щели прибора и полностью заполнить светом его диспергирующую систему

При использовании кювет (1) диаметром 18 мм, линза (2) проектирует изображение задней стенки кюветы на конденсор (3), который в свою очередь проектирует на входную щель спектрометра изображение передней стенки кюветы (с увеличением 2^x), поворотное зеркало (4) и насадка на щель с линзой

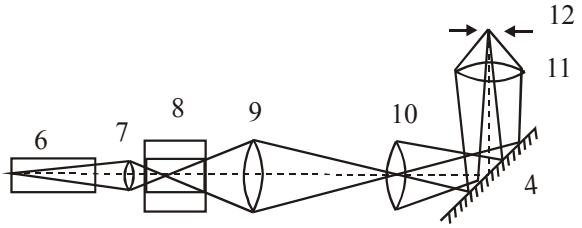


Рис. 3

(5) проектирует изображение конденсора (3) в плоскость дифракционной решетки спектрометра (с увеличением $7{,}8^x$).

При работе с кюветами (6) диаметром 9–13 мм непосредственно за кюветой помещается система, состоящая из линзы (7), призмы разделителя (8) и линзы (9). Призма-разделитель делит световой пучок, идущий от кюветы на три полоски, которые располагаются последовательно одна над другой.

Конденсор (10) проектирует эти полоски на щель спектрометра, при этом общее увеличение системы приблизительно $0.9\text{-}1.1^{X}$. Линзы (7), (9) проектируют заднюю стенку кюветы на конденсор (10), а линза (11) проектирует изображение конденсора в плоскость дифракционной решетки спектрометра, при этом увеличение на решетке $12.5\text{-}19^{X}$ (рис.3).

Питание ртутной лампы осуществляется агрегатом питания ЭПС-94.

Внимание!!! Включать агрегат питания можно только лаборанту.

ПОРЯДОК РАБОТЫ И ПРАКТИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ.

В настоящей работе нужно снять спектр комбинационного рассеяния жидкости (чистое вещество или двухкомпонентная смесь) и по найденным частотам определить вещество или компоненты смеси.

Так как линии комбинационного рассеяния имеют сравнительно малую интенсивность, необходимо полностью использовать светосилу спектрометра. Проверка правильности настройки осветительной системы производится визуально, с помощью микроскопа, расположенного за выходной щелью монохроматора.

РАСШИФРОВКА СПЕКТРОГРАММЫ

Расшифровка спектра комбинационного рассеяния производится путем измерения на спектрограмме или регистрограмме координат известных ртутных линий и линий комбинационного рассеяния. С помощью подходящей интерполяционной формулы можно по длинам волн (волновым числам) известных линий и по расположению линии, подлежащей расшифровке, относительно них определить длину волны (волновое число) последней. Когда в любой области спектра имеется много известных линий, так что изучаемая линия оказывается расположенной внутри узкого промежутка, между двумя известными линиями, можно пользоваться простой формулой линейной интерполяции, если же расстояния между ними велики, применяются более сложные интерполяционные формулы.

Для определения длин волн можно также пользоваться градуировочным графиком. Это особенно удобно, если для получения спектра используется прибор с дифракционной решеткой, т.к. в этом случае градуировочный график, построенный в длинах волн, хорошо апроксимируется прямой. (Это справедливо в том случае, если мы работаем с первым порядком спектра, т.е. когда углы дифракции не велики.) Этот метод и следует использовать в данной работе. Получив хорошую регистрограмму, нужно определить по ней координаты линий ртутного спектра l и координаты линий комбинационного рассеяния $l_{кр}$.

Некоторые линии в спектре ртути имеют слишком большую интенсивность, для определения их координат нужно поступать следующим образом: Пусть x_1 и x_2 координаты симметричных стоксовой и антистоксовой линий комбинационного рассеяния, тогда координата возбуждающей линии равна: $(x_1+x_2)/2$

Затем в разумном масштабе строится график $l=f(\lambda)$, по которому определяются длины волн линий комбинационного рассеяния $\lambda_{кр}$.

По таблице перевода $\lambda \rightarrow \nu$ ($\nu \neq 1/\lambda$ т.к. λ определяется в воздухе, а ν нужно знать для вакуума, находят соответствующие волновые числа $\nu_{кр}$.

В настоящей работе возбуждающие линии служат следующие линии ртути: 4339.235Å, 4343.634Å, 4347.496Å, 4358.35Å (см. табл. 1)

Принадлежность линий комбинационного рассеяния той или иной возбуждающей линии ртути проще всего можно определить, зная, что разность волновых чисел сателлитов и возбуждающих линий должны совпадать между собой для всех возбуждающих линий. Кроме того, следует учесть, что интенсивность комбинационной линии пропорциональна интенсивности возбуждающей линии, таким образом, зная соотношение интенсивностей ртутных линий, можно контролировать правильность расшифровки наблюдением над соотношением интенсивностей линий комбинационного рассеяния. Зная соотношение интенсивностей, мы можем примерно определить от какой линии можно еще ожидать повторений комбинационных линий (см. табл. 2)

Разности волновых чисел сателлита и возбуждающей линии, совпадающие между собой, обведены черными рамками. Разности, не обведенные черными рамками, комбинационными частотами не являются и их учитывать не следует.

В последней колонке помещены найденные комбинационные разности волновых чисел, а внизу таблицы эти же разности, но с характеризующими их интенсивностями (см. графу I). Индексы b, s, дв соответственно обозначают: b – широкая, s – резкая, дв – двойная.

Определив комбинационные частоты, т.е. волновые числа исследуемого вещества, необходимо сравнить их с частотами спектров комбинационного рассеяния различных веществ и определить исследуемое вещество или смесь веществ.

ТРЕБОВАНИЯ, ПРЕДЪЯВЛЯЕМЫЕ К ОТЧЕТУ:

Отчет должен содержать:

1. Оптическую схему установки с указанием хода лучей, как в осветительной системе, так и в спектрометре. При вычерчивании надо брать не менее трех лучей.
2. Условия получения регистрограммы (ширину щели, скорости сканирования).
3. График, по которому определялись длины волн линий комбинационного рассеяния (т.е. градуировочный график, на котором нанесены линии комбинационного рассеяния, начерченный в разумном масштабе).
4. Таблицу длин волн всех линий комбинационного рассеяния и соответствующие им волновые числа (найденные по таблицам перевода $\lambda \rightarrow$).
5. Среднее значение частот нормальных колебаний, с указанием погрешностей.
6. Длины волн возбуждающих линий, от которых были получены сателлиты.
7. Значения относительных интенсивностей комбинационных линий по десятибалльной шкале.

8. наименование и формулу исследуемого вещества.

Литература:

1. Кольрауш К.»Спектры комбинационного рассеяния», М ЦЛ, 1952 г.
2. Чулановский В.М. «Введение в молекулярный спектральный анализ», М-Л ГИТТЛ, 1951 г.
3. «Практикум по спектроскопии под редакцией профессора Л.В.Левшина, издат. МГУ, 1976 г.

Таблица 1

ДЛИНЫ ВОЛН И ВОЛНОВЫЕ ЧИСЛА НЕКОТОРЫХ ЛИНИЙ РТУТНОГО СПЕКТРА.

Длина волны λÅ (в воздухе)	Волновые числа ν $см^{-1}$	Разность Δν $см^{-1}$ от линии 4358 Å	Интен-сивность	Обозна-чение	Цвет
3650,146	27388,4	-	500	g*	Ультрафиолетовая область
3654,833	27353,2	-	200	p*	
3663,276	27290,2	-	400	o*	
3704,18	26988,9	-	20	-	
3801,568	26296,9	-	2	-	
3906,410	25591,7	-	15	m	
3983,977	25093,4	-	(400)	e	
4046,561	24705,4	-	300	r*	Фиолетовый
4077,811	24516,1	-	150	i*	
4108,066	24335,5	-	5	h*	
4339,235	23039,1	-	20	g*	синий
4343,634	23015,7	-	5	-	
4347,496	22995,3	-	50	f*	
4358,35	22938,0	0	500	e*	
4916,036	20335,9	2602,1	50	d	Зелено-голубой
4951,9	20188,7	2749,3	(2)	-	
4960,32	20154,4	2783,6	(5)	-	
4961,89	20148,0	2790,0			
5460,740	18307,5	4630,5	2000	c*	зеленый
5769,59	17327,46	5610,5	1000	b*	желтый
5790,654	17264,4	5673,6	500	a*	

Таблица 2

ПРИМЕР НА РСШИФРОВКУ СПЕТРОГРАММЫ

№№ пп	I	ν, см$^{-1}$	Разность частот				
			k– ν	g– ν	f– ν	e– ν	
1	2	3	4	5	6	7	8
1	10	20085				2853	e-2853
2	3	20142			2853	2796	g-2853
3	1,2	20187		2853	2808	2751	f-2852
4	1,b	20241		2798	2754	2697	e-2697
5	2	20273		2766	2722	2665	e-2665
6	Hg,d	20336					
7	9	21492		1547	1503	1446	e-1446
8	1,b	21546		1493	1449	1392	g-1449
9	4	21590		1449	1405	1348	f-1449
10	8	21671		1368	1324	1267	e-1267
11	1	21726		1313	1269	1212	g-1269
12	0	21765		1274	1230	1173	f-1274
13	4	21781		1258	1214	1157	e-1157
14	0,b	21849	2856	1190	1146	1089	k-2856
15	8	21909	2796	1130	1086	1029	e-1029
16	1	21964	2741	1075	1031	974	f-1031
17	0,b	22011	2694	1028	984	927	g-1028
18	10	22136	2569	903	859	802	e-802
19	2	22192		847	803	746	f-803
20	1	22236		803	759	702	g-803
21	3	22512		527	483	426	e-426
22	Hg,e	22938	Линия 4358,35 Å				

Δν: 426(3), 803(10), 1029(8), 1157(4), 1270(8), 1348(4), 1448(9), 2665(2), 2697(1), 2853 (10).