

блока выдачи прикреплена полочка. Шторка открывается (поднимается) только после оплаты продукта.

Внутри шкафа размещена изотермическая камера, в которой находятся три секции с цепными элеваторами, снабженные подхватывающими каретками для перемещения кассеты с продуктом. Секции установлены на специальных рельсах, на которые они опираются роликами.

Каждая секция имеет индивидуальный привод, состоящий из электродвигателя и червячного редуктора, соединенных муфтой. Передача движения от привода к цепным элеваторам производится с помощью втулочно-роликовой цепи, натяжение которой осуществляется звездочками.

### **Изучение фундаментальных свойств веществ методами спектроскопии высокого разрешения**

Федин С.В.

Fedins.pochta@gmail.com

*Научный руководитель: НИР доктор физ.-мат. наук, проф. О.Н. Уленков*

Широко известно, что информацию о многих свойствах вещества на молекулярном и атомарном уровнях можно получить, проведя анализ спектра его взаимодействия с излучением. Это, в свою очередь, позволяет создавать модели его поведения в тех или иных условиях, выявлять его физические, химические свойства без непосредственного взаимодействия с ним.

В связи с развитием и внедрением в технику эксперимента лазерных и Фурье-спектрометров увеличился поток высокоточной спектроскопической информации, что позволяет детальнее изучать физические процессы, происходящие в молекуле. Это приводит к появлению ряда проблем и вопросов, связанных с анализом спектров. Разрешением этих проблем, а также систематизацией изученных спектров и составлением их каталогов, организацией на их основе банков спектроскопической информации и занимается данная отрасль науки.

В долгосрочной перспективе, область применимости результатов данной научной работы очень широка: решение задач астрофизики, физики полупроводников, изучение природы химических связей элементов, создание новых и улучшение существующих материалов с заданными свойствами, создание уникальных приборов и методик измерения в других областях науки, а также решение ряда других, как научных, так и технических проблем.

Естественно, что для работы в этом направлении главными требованиями являются владение математическим аппаратом и наличие значительных теоретических знаний в области квантовой механики как в широком (волновое уравнение Шредингера), так и в более узком смысле (симметрия и её применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул).

Таким образом, научным руководителем на начальном этапе были поставлены цели: получение базовых знаний и развитие соответствующего мышления у студентов.

Для достижения поставленных целей был обозначен список литературы, включающий в себя учебники, научные пособия и статьи по данной тематике, изучив

которые студенты смогли бы приступить к непосредственному анализу спектра, предоставленного сторонними источниками на базе лаборатории Томского Государственного Университета, используя предоставленное программное обеспечение.

### 1. Спектроскопический анализ на примере $3\nu_1$ линии диоксида серы.

На первом этапе решается, какую область спектра необходимо исследовать.

Диоксид серы является важным химическим соединением во многих областях таких как химия, астрофизика, атмосферная оптика, лазерная техника. Спектроскопические исследования молекулы двуокиси серы проводились в течение многих лет в микроволновой, субмиллиметровой и инфракрасной областях. Здесь мы приведем анализ с очень высоким разрешением спектральной области  $3340\text{--}3520\text{ см}^{-1}$ .

#### Детали эксперимента

Затем, необходимо получить спектрометрические данные. Поскольку в Томске нет оборудования для того, чтобы снять спектры требуемого разрешения, данные берутся из специальных каталогов, выложенных в сеть Интернет.

Экспериментальные измерения были проведены в ИК-лаборатории Оулу (Финляндия) с использованием Фурье-спектрометра Bruker IFS-120HR. Образец  $\text{SO}_2$ , полученный от Sigma-Aldrich Inc. с чистотой 99,9%, был использован при давлении 630 Па. Длина пути поглощения 154 м. Для ограничения региона волновых чисел между 3000 и 4000  $\text{см}^{-1}$  используются оптические полосовые фильтры. Общее время регистрации составило 85 ч.

#### Анализ и результаты

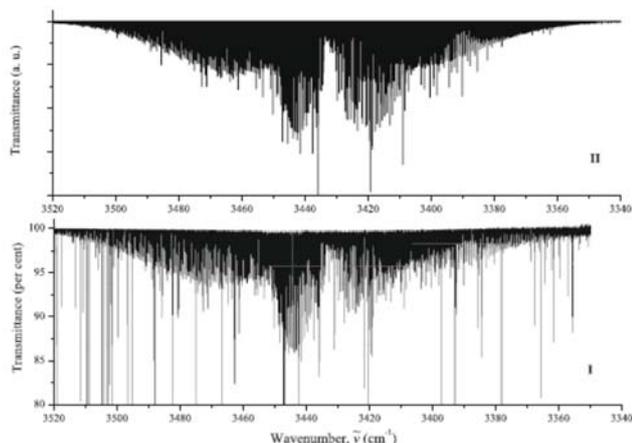


Рисунок 3 - Обзор  $3\nu_1$  линии спектра молекулы  $\text{SO}_2$ .

Следующим шагом строится гамильтониан.

Молекула  $\text{SO}_2$  является асимметричной сверху, т.е. вытянутой симметрично к верхнему пределу. Молекула является относительно тяжелой, и, несмотря на небольшую величину разности между вращательными постоянными, центробежный параметр искажения невелик. Ферми или взаимодействие Кориолиса так же должны быть приняты во внимание при анализе с высоким разрешением спектра диоксида серы.

Поэтому, используем в анализе модель колебательно-вращательного Гамильтона, которая учитывает оба типа этих взаимодействий:

$$H^{vib.-rot} = \sum_{v,\bar{v}} |v\rangle \langle \bar{v}| H^{v\bar{v}},$$

Спектр импортируется в специальное программное обеспечение, которое анализирует его и выводит выявленные данные, применив определенные, заложенные в него шаблоны (т.н. расческу). Так же, вводятся значения параметров, найденные в каталогах или полученные расчетным путем, необходимые для решения. В итоге, на выводе имеем таблицу, сокращенный вид которой изображен на Рис. 4

$J$	$K_a$	$K_c$	$E$	$\Delta$	$\delta$	$J$	$K_a$	$K_c$	$E$	$\Delta$	$\delta$	$J$	$K_a$	$K_c$	$E$	$\Delta$	$\delta$
1			2	3	4	1			2	3	4	1			2	3	4
1	1	1	3434.60712	17	-28	11	1	11	3473.67250	15	-14	15	9	7	3646.23618	9	7
2	0	2	3434.17186	16	-25	11	2	10	3480.51733	27	2	15	10	6	3678.54704	3	-9
2	1	1	3435.96397	13	-22	11	3	9	3489.29655	8	-11	15	11	5	3714.18903	7	-7
2	2	0	3441.03765		-22	11	4	8	3501.27139	4	-1	15	12	4	3753.14054	6	2
3	1	3	3437.62478	26	21	11	5	7	3516.66809	9	9	15	13	3	3795.37833	9	-11
3	2	2	3442.92220	20	-17	11	6	6	3535.47974	5	10	15	14	2	3840.87847	15	-4
3	3	1	3451.48839	37	-18	11	7	5	3557.69014	11	13	15	15	1	3889.61481	10	-17
4	0	4	3438.55645	11	3	11	8	4	3583.28355	18	9	16	0	16	3515.22593	3	15
4	1	3	3440.53532	5	-9	11	9	3	3612.24345	19	-3	16	1	15	3521.84926	4	-16
4	2	2	3445.45181	29	-8	11	10	2	3644.55243	21	26	16	2	14	3526.60669	10	-0
4	3	1	3454.01485	10	-18	11	11	1	3680.19024	21	16	3	13	13	3533.83037	9	-4
4	4	0	3466.01135	14	-3	12	0	12	3480.33896	8	3	16	4	12	3545.45772	28	-6
5	1	5	3443.04988	20	1	12	1	11	3484.66828	3	-6	16	5	11	3560.78321	29	13

Рисунок 4 - Пример файла вывода

После чего, проводится дальнейший анализ полученных данных и строятся выводы, который затем в свою очередь становятся частью спектроскопических каталогов.

Поскольку в большинстве своем анализ имеет строго определенный алгоритм выполнения и каждый последующий его этап жестко связан с предыдущим, вероятность ошибки в конечном итоге сводится к минимуму, что позволяет выполнять подобную работу студентам, прошедшим требуемую подготовку [6].

#### Список литература:

1. Давыдов А.С. Квантовая механика // А.С. Давыдов – Москва «Наука», 1973. С. 8 – 124;
2. Соколов А.А. Квантовая механика // А.А. Соколов, И.М. Тернов, В.Ч. Жуковский – Москва «Наука», 1979. С. 8 – 143;
3. Спектроскопические методы исследования органических веществ [электронный ресурс] // ХиМиК сайт о химии. URL: <http://www.xumuk.ru/organika/395.html>
4. Исследование спектров высокого разрешения молекул типа симметричного волчка на примере арсина и фосфина [электронный ресурс] // Научная библиотека диссертаций и авторефератов disserCat. URL: <http://www.dissercat.com/content/issledovanie-spektrov-vysokogo-razresheniya-molekul-tipa-simmetrichnogo-volchka-na-primerer-#ixzz3OM29BRM7>
5. Истоки спектроскопии [электронный ресурс] // Большая онлайн библиотека e-Reading. URL: [http://www.e-reading.link/chapter.php/1023415/21/Bertolotti\\_-\\_Istoriya\\_lazera.html](http://www.e-reading.link/chapter.php/1023415/21/Bertolotti_-_Istoriya_lazera.html)
6. O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva (2009) High resolution study of the 3v1 band of SO2. Journal of Molecular Spectroscopy, pp. 111-121.