

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования



**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Направление подготовки/профиль 03.06.01 Физика и астрономия / 01.04.05 Оптика
Школа: Исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов

**Научный доклад об основных результатах подготовленной
научно-квалификационной работы**

Тема научно-квалификационной работы
Исследование фундаментальных свойств многоатомных молекул на примере молекулы диоксида серы

УДК 539.194:546.22-31

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A5-82	Замотаева Валерия Александровна		

Руководителя профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленев Олег Николаевич	Д.ф.-м.н., профессор		

Руководитель отделения

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Директор ИШФВП	Сухих Леонид Григорьевич	Д.ф.-м.н., доцент		

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленев Олег Николаевич	Д.ф.-м.н., профессор		

Томск – 2019 г.

АННОТАЦИЯ

Научно-квалификационная работа посвящена спектроскопическому исследованию молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы диоксида серы и ее изотопологов.

Анализ колебательно-вращательных спектров позволяет определить систему уровней энергии молекулы и найти спектроскопические постоянные, из которых впоследствии могут быть определены структурные параметры и потенциальная функция исследуемой молекулы.

Однако не всегда информация, получаемая из спектров материнских молекул, является достаточной. В этом случае становится важным исследование изотопозамещённых модификаций, свойства которых естественным образом связаны со свойствами «материнской» молекулы, однако, при этом спектры разных модификаций могут иметь значительные отличия. Для решения многих спектроскопических задач большое значение имеет информация об изотопической зависимости между спектроскопическими параметрами. При этом, на сегодняшний момент, эти соотношения известны для ограниченного числа молекул, поэтому развитие теории изотопозамещения представляет большой интерес.

Необходимо отметить, что диоксид серы в различных его формах представляет интерес для многих областей современной науки, таких как химия, астрофизика, лазерные технологии и др. SO_2 выделяется в больших количествах в процессе извержения вулканов [1]. Кроме того, диоксид серы, выбрасываемый в атмосферу, превращается в H_2SO_4 , что в свою очередь оказывает воздействие на химические процессы, связанные с атмосферой и климатом [2,3]. SO_2 является одним из ключевых звеньев атмосферного цикла Земли [4]. Следует обратить внимание на то, что изучение спектров высокого разрешения данной молекулы представляет интерес и для планетологии, так как, например, в облаках атмосферы Венеры содержание диоксида серы в миллион раз выше, чем в атмосфере Земли [5].

Учитывая вышеизложенное, можно утверждать, что исследование спектроскопических свойств диоксида серы и ее изотопологов является актуальной задачей. В настоящей работе проведён анализ спектров высокого разрешения молекул $^{32}\text{SO}_2$, $^{34}\text{SO}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ и $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Было исследовано 17 колебательно-вращательных полос, многие из них были зарегистрированы и проанализированы впервые. В процессе решения обратной задачи были найдены спектроскопические параметры эффективных операторов для всех рассмотренных состояний, определены энергии переходов и положения линий с точностью порядка экспериментальной. Также

для молекулы $^{32}\text{SO}_2$ в области полосы ν_2 рассмотрена задача определения интенсивностей и полуширин спектральных линий, рассчитаны параметры эффективного дипольного момента и коэффициенты уширения линий давлением.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wallace P. J. // *J. Volcanol. Geotherm. Res.* – 2001. – V. 108. – P. 85–106.
2. Self S., Rampino M. R., Barbera J. J. // *J. Volcanol. Geotherm. Res.* – 1981. – V. 11. – P. 41–60.
3. McCormic M. P., Thompson L. W., Trepte C. R. // *Nature.* – 1995. – V. 373. – P. 399–404.
4. Charlson R. J., Anderson T. L., McDuff R. E. *The Sulfur Cycle* / eds. S. S. Butcher, R. J. Charlson, G. H. Orian, G. V. Wilfe. – San Diego: Academic, 1992.
5. Bezdard B., DeBergh C., Fegley B., et al. // *Geophys. Res. Lett.* – 1993. – V. 20. – P. 1587–1590.