

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
<b>Исследование энергетической структуры и интенсивностей линий молекул типа асимметричного волчка на примере этилена и диоксида серы</b>

УДК 539.194:547.313:546.22-31

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A5-82	Зятькова Анастасия Георгиевна		

Руководителя профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленков 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	Бехтерева Елена Сергеевна	Д.ф.-м.н., доцент		

## ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию количественных характеристик изотопологов диоксида серы и этилена. Выбор данных молекул в качестве объектов исследования не случаен. Они играют важную роль при исследованиях атмосферной оптики, астрофизики, планетологии.

В частности, молекула этилена представляет собой простой алкен, что делает ее хорошим прототипом для изучения углеводородов, имеющих двойную связь [1]. Этилен попадает в земную атмосферу, выступая в роли тропосферного загрязнителя [2], в процессе лесных пожаров, естественного цикла растений, выбросов выхлопных газов, выделяемых автомобилями, и т.п.

Информацию о спектральных характеристиках двуокиси серы и её различных изотопологов востребована во многих чисто научных и прикладных задачах. Данная молекула и ее изотопологи в изобилии присутствуют во Вселенной. Эта молекула и её различные изотопологи были идентифицированы в межзвездном пространстве, в планетарных туманностях, в Солнечной системе, в частности, в атмосфере Венеры [3] - [4]. В земной атмосфере диоксид серы является естественной составляющей, происходящей из вулканической эмиссии, а также является антропогенным загрязнителем. Кроме того, изучение этого компонента важно для решения задач распространения монохроматического излучения в атмосфере, лазерного зондирования, передачи информации, дистанционного обнаружения и мониторинга  $\text{SO}_2$  [5] - [6].

Перечисленные выше моменты позволяют говорить о **важности** и **актуальности** анализа реальных спектров данных молекул и извлечения из них количественной информации.

В рамках проведенного анализа, принимая во внимание существование сильных резонансных взаимодействий, получен набор спектроскопических параметров колебательных полос, расположенных в диапазоне  $1350\text{-}1950\text{ см}^{-1}$  молекулы транс- $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ , который воспроизводит исходный спектр с точностью, сравнимой с экспериментальной ( $3 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$ ).

Рассмотрен отдельный класс молекул XYZ типа ( $C_s$  симметрии). Применяя методы теории групп и операторной теории возмущений, получены соотношения, позволяющие с точностью на уровне 8% воспроизводить наиболее важные параметры эффективного дипольного момента для фундаментальных полос.

Отдельное внимание уделяется проблеме экспериментального определения интенсивностей линий, а именно, корректного задания парциального давления компонентов газовой смеси. В рамках настоящей работы для молекул диоксида серы и ее

изотопологов предлагается метод, позволяющий с погрешностью на уровне 1-2% задавать значения парциальных давлений молекул изотопологов диоксида серы. Рассчитанное значение парциального давления позволило успешно осуществить анализ интенсивностей фундаментальной полосы  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$ . Среднеквадратичное отклонение экспериментально определенных (с помощью профиля Армана-Тран) и воспроизведенных на основе параметров эффективного дипольного момента, полученных в результате решения обратной спектроскопической задачи, интенсивностей линий составляет 4,5%.

В дополнение проведен анализ спектра молекулы  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ . Из анализа «горячих» переходов полос  $\nu_1+\nu_2+\nu_3-\nu_2$ ,  $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$  впервые определена энергетическая структура колебательных состояний (021) и (111) молекулы  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ . Получен набор спектроскопических параметров, которые воспроизводят исходные 363 колебательно-вращательные энергии с высокой точностью ( $3 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ ).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ulenikov O.N., Tolchenov R.N., Koivusaari M., Alanko S., Anttila R. // J. Mol. Spectrosc. –1994. –V. 167. –P. 109–130
2. Abeles F.B., Heggstad H.E. // J. Air Pollut Control Assoc. – 1973. – V. 23. – P. 517–521
3. Snyder L. E, Hollis J.M., Ulich B.L., Lovas F.J., Johnson D. R., Buhl D. // Astrophys J - 1975.- V.198.-P.81–4.
4. Bezard B., De Bergh C., Fegley B., Maillard J-P., Crips D., Owen T. // Geophys Res Lett.- 1993.-V.20.-P.1587–90.
5. Wallace PJ.//Geotherm Res. – 2001.-V.108.-P.85–106.
6. Marcq E., Betraux J-L., Montmessin F., Belyaev D.//Nat Geosci. -2013-V.6.-P.25–28.