

Министерство образования и науки 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

**Научно-квалификационная работа**

Тема научно-квалификационной работы
<b>Инфракрасная Фурье-спектроскопия высокого разрешения молекулы <math>\text{CH}_2=\text{CD}_2</math></b>
УДК <u>539.194-047.37:535.338.42</u>

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A4-82	Берёзкин Кирилл Борисович		

Руководителя профиля подготовки

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

Руководитель школы

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Директор ИШФВП	Степанов Игорь Борисович	Д.т.н.		

Научный руководитель

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

## ВВЕДЕНИЕ

Научно-квалификационная работа посвящена изучению фундаментальных свойств молекул типа асимметричного волчка, т.е. обладающих тремя различными моментами инерции относительно главных осей. К молекулам подобного типа может быть отнесена молекула этилена, а также её разнообразные изотопологические модификации. В настоящей работе исследуется дважды дейтерированный асимметричный изотополог этилена  $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ .

Рассмотрение внутренних свойств молекул, таких как внутримолекулярное потенциальное поле, структурные постоянные, электрический и магнитный потенциалы и т.д., возможно лишь с использованием высокоточной информации, получаемой методами спектроскопии. Инфракрасные спектры высокого разрешения, зарегистрированные на современных Фурье-спектрометрах, позволяют эту информацию извлекать, обрабатывать и определять характеристики молекул. Изучение спектров изотопологических модификаций позволяет увеличить доступный объём информации, что приводит к увеличению точности результатов и предсказательной способности методик расчёта.

Этилен является первым членом ряда алкенов, что обеспечивает актуальность его исследования как модельной молекулы для углеводородов, обладающих двойной связью [1]. Кроме того, этилен считается растительным гормоном, отвечающим за старение вегетативных тканей, ведутся исследования по воздействию этилена на биохимию млекопитающих [2]. Также этилен с недавнего времени стал объектом интереса астрофизики и планетологии, будучи обнаруженным в атмосферах планет-гигантов и их спутников [3,4].

В настоящей работе изучаются инфракрасные спектры высокого разрешения молекулы  $\text{CH}_2=\text{CD}_2$  в области расположения так называемых «отпечатков пальцев» («*fingerprints*»), т.е. фундаментальных колебаний функциональных групп ( $600\text{--}2000\text{ см}^{-1}$ ). Исследовано 14 колебательно-вращательных полос, обнаружено порядка 18000 переходов, в том числе, впервые: переходы на запрещённые по симметрии состояния, «горячие» переходы с возбуждённых колебательных состояний, а также слабые комбинационные полосы. Решена обратная задача для определения спектроскопических параметров эффективных операторов для всех рассмотренных состояний, определены положения линий и энергии соответствующих переходов с точностью порядка экспериментальной. Впервые рассмотрена задача определения интенсивностей и полуширин спектральных линий изучаемой молекулы, рассчитаны параметры эффективного дипольного момента и коэффициенты уширения линий давлением.

## 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. Wang, K. L.-C., Li, H., & Ecker, J. R. // *The Plant Cell.* – 2002. – V. 14. – P. 131–151.
3. Lodders K. // *Astrophys. J.* – 2004. – V. 611. – P. 587–597.
4. Kostiuk T, Romani P, Espenak F, Livengood T.A., Goldstein JJ.// *J. Geophys. Res.* – 1993. – V. 98. – P. 18823–18830