

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: ИШФВП

Научный доклад об основных результатах подготовленной
научно-квалификационной работы

Тема научного доклада
Спектроскопия высокого разрешения и исследование резонансных взаимодействий в молекуле цис- $C_2H_2D_2$

УДК 535.338.4:547.313.2

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
А6-82	Конова Ю. В.		01.06.2020

Руководитель профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленекон О. Н.	д.ф.-м.н., профессор		01.06.2020

Руководитель отделения

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Директор ИШФВП	Сухих Л. Г.	д.ф.-м.н.		01.06.2020

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Громова О. В.	к.ф.-м.н., PhD		01.06.2020

АННОТАЦИЯ

Колебательно-вращательная спектроскопия молекул является одной из старейших областей химической физики, которая позволяет получить высокоточную информацию о свойствах молекулы и её квантовых состояниях.

Для молекул, находящихся в газовой фазе, вращательные переходы, сопровождающие возбуждение колебательных мод, обычно наблюдаются в спектроскопических экспериментах с использованием приборов высокого разрешения, таких, как Фурье-спектрометры (FTS). Анализируя наблюдаемые колебательно-вращательные спектры, можно получить соответствующую физическую информацию о молекулах из положений, полуширин и интенсивностей линий [1]. Из положений линий можно определить характер энергетических уровней молекул. Кроме того, более систематическая физическая информация, такая как силовые постоянные, длины связей и моменты инерции, может быть рассчитана из систематических закономерностей в положениях линий.

Теоретическая спектроскопия получила новый импульс с развитием компьютерной техники, и сегодня она все еще остается областью исследований, имеющих большое значение для многих научных областей, включая физику атмосферы и астрофизику. Постоянное совершенствование вычислительной мощности и методологии делает теоретические подходы все более и более точными, и полезными.

Объектом исследования в выпускной работе является молекула цис- $C_2H_2D_2$. Это дважды дейтерированный изотополог этилена. Интенсивное исследование спектров молекул этилена и его изотопологов приходится на 1990-2010 годы, в этот период осуществлялась космическая миссия «Кассини – Гюйгенс», по результатам которой были опубликованы химические составы планет гигантов и их спутников. В составе атмосфер таких планет как Юпитер, Сатурн и Нептун была обнаружена молекула C_2H_4 и некоторые её изотопологи [2]. Также концентрация данной молекулы в воздухе, её источники и поглотители представляют интерес для науки об атмосфере Земли [3]. Помимо этого, молекула этилена является прототипом для многих органических молекул и позволяет анализировать взаимосвязанные спектры, лучше понимать динамику и построение внутримолекулярной потенциальной функции такого рода молекул [4]. На данный момент в литературе имеются ограниченные сведения о молекуле цис- $C_2H_2D_2$. Единственная работа в которой выполнялись *ab initio* расчеты с применением к молекуле цис- $C_2H_2D_2$ – это работа [5]. Исследования спектров высокого разрешения ограничиваются фундаментальными и сильно интенсивными комбинационными полосами. Поэтому целью работы является изучение вращательной структуры молекулы цис- $C_2H_2D_2$ в ИК диапазоне

580 – 3300 cm^{-1} , с последующим решением обратной спектроскопической задачи для взаимодействующих колебательных состояний. Результатом решения задачи являются наборы параметров эффективного гамильтониана, описывающих вращательную структуру невозмущённых колебательных состояний, а также параметры резонансных взаимодействий.

В диапазоне 580 – 3300 cm^{-1} исследовались 26 колебательных полос, из них у 16 была определена вращательная структура, т.е. были идентифицированы энергетические переходы, относящиеся к данным полосам. Следует отметить, что вращательная структура 9 колебательных полос была определена впервые. Это либо «запрещенные» по симметрии, либо имеющие очень слабую интенсивность полосы. Разработка нового метода интерпретации спектров полос, обладающих слабой интенсивностью, а также усовершенствование методики решения обратной спектроскопической задачи для сильновзаимодействующих полос, позволило определить около 23.5 тысяч энергетических переходов, принадлежащих полосам в спектре диапазоном 580 – 3300 cm^{-1} . Для каждого исследуемого колебательного состояния был определен набор спектроскопических параметров. Также результатом работы является усовершенствование спектроскопических параметров эффективного гамильтониана, описывающего вращательную структуру основного колебательного состояния. Набор параметров основного колебательного состояния содержит в себе 3 вращательные постоянные и 12 параметров центробежного искажения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг // М.: ИЛ. – 1965. - 648 с.
2. Cernicharo J. Methylpolyynes and small hydrocarbons in CRL 618 / J. Cernicharo, A. M. Heras, J. R. Pardo et al. // *Astrophys. J.* - 2001. - Vol. 546. - P. L127-130.
3. Abele F.B. Ethylene: an urban air pollutant / F. B. Abele, H. E. Heggetad // *J. Air Pollut. Control. Assoc.* - 1973. - Vol. 23. - P. 517-521.
4. Partridge H. The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive ab initio calculations and experimental data / H. Partridge, D. Schwenke // *J. Chem. Phys.* - 1997. - Vol. 106. - P. 4618-4639.
5. Viglaska-Aflalo D. A global view of isotopic effects on ro-vibrational spectra of six-atomic molecules: a case study of eleven ethylene species / D. Viglaska-Aflalo, M. Rey, A. Nikitin, T. Delahae // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2020. – Vol. 22. – P. 3204-3216.