

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» / «Оптика»  
Школа Исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов

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

Тема научного доклада
Теоретическое исследование спектров молекул типа XY <sub>4</sub> на основе неприводимых тензорных операторов

УДК 539.194:514.743:517.98

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A8-82	Кузнецов А. В.	<i>Кузнецов</i>	25.05.22

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Громова О. В.	к.ф.-м.н., PhD	<i>Громова</i>	25.05.22

Руководитель профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленков О. Н.	д.ф.-м.н., профессор	<i>Уленков</i>	25.05.22

Руководитель отделения

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Директор ИШФВП	Гоголев А. С.	к.ф.-м.н., профессор	<i>Гоголев</i>	06.06.22

Томск – 2022 г.

## АННОТАЦИЯ

Колебательно-вращательная спектроскопия молекул типа сферического волчка, в частности молекул  $\text{SiH}_4$  и  $\text{GeH}_4$ , а также их изотопологов, представляет интерес в различных областях науки и техники, особенно в астрофизике и планетологии. Одно из важнейших открытий при исследовании атмосфер планет-гигантов – это обнаружение газов германа и силана в атмосферах Сатурна, Титана, Юпитера [1-3]. Несмотря на многолетние исследования колебательно-вращательных спектров молекул германа, силана и их дейтерированных модификаций, многие спектральные диапазоны до сих пор являются неизученными. Однако полноценное исследование атмосфер планет-гигантов возможно лишь при наличии спектроскопической информации о всех возможных спектральных диапазонах. Как следствие, исследование колебательно-вращательных спектров этих молекул и извлечение из них высокоточной спектроскопической информации, а именно, о характеристиках спектральных линий (положения линий, интенсивности, коэффициенты уширения и сдвиги давлением) из экспериментальных данных в настоящее время является актуальной задачей. Поэтому целью настоящей работы является исследование спектров молекул типа  $\text{XY}_4$  на основе неприводимых тензорных операторов.

Научно-квалификационная работа включает в себя следующие разделы:

*Во введении* обоснована необходимость научного исследования, поставлена цель и сформулированы научные положения, выносимые на защиту. Также приведен обзор литературных данных по теме исследования для молекул  $\text{GeH}_4$  и  $\text{SiD}_4$ , обозначена новизна полученных результатов и их практическая и теоретическая значимость.

*Первая глава* посвящена краткому определению фундаментальных принципов колебательно-вращательной молекулярной спектроскопии. В частности, вводятся такие понятия, как гамильтониан многоатомной молекулы в нормальных координатах, эффективный гамильтониан системы взаимодействующих колебательных состояний, операторная теория возмущения и эффективный дипольный момент.

*Вторая глава* посвящена введению в основы неприводимого тензорного формализма для задач молекулярной спектроскопии. При описании молекул типа сферического волчка (молекул типа  $\text{XY}_4$ ) возникают значительные трудности как вычислительного характера, так и связанные с пониманием физической картины их поведения. Для преодоления этих трудностей наиболее эффективными оказались идеи теории симметрии, в частности, ал-

парат неприводимых тензорных операторов. В данной главе рассматриваются простейшие приложения формализма неприводимых тензорных операторов к задачам молекулярной спектроскопии.

*Третья глава* диссертации посвящена исследованию тонкой колебательно-вращательной структуры спектров пяти изотопологов молекулы германа  ${}^M\text{GeH}_4$  ( $M = 70, 72, 73, 74, 76$ ). В результате был исследован широкий спектральный диапазон диады, пентады и октады. В совокупности проинтерпретировано более 20000 переходов, что соответствует порядка 8500 колебательно-вращательных энергий для 28 колебательных состояний. На основе аппроксимации формы экспериментальных линий контуром Армана-Тран были определены величины интенсивностей более 2000 линий четырех колебательных полос. Найдены спектроскопические параметры эффективного гамильтониана для 28 колебательных состояний и параметры эффективного дипольного момента для 4 упомянутых выше полос поглощения. Из анализа полуширин колебательно-вращательных линий определены коэффициенты уширения линий давлением.

*Четвертая глава* посвящена исследованию тонкой колебательно-вращательно структуры спектров трех изотопологов молекулы силана  ${}^M\text{GeH}_4$  ( $M = 28, 29, 30$ ). В результате были исследованы диапазоны диады и пентады, включающие 10 колебательных полос. В совокупности проинтерпретировано более 14000 переходов, что соответствует порядка 5000 колебательно-вращательных энергий для 10 колебательных состояний. В результате исследования были определены наборы спектроскопических параметров, а именно параметры центробежного искажения, резонансных взаимодействий и тетраэдрических расщеплений, описывающих 10 колебательных состояний с точностью, сопоставимой с ошибками эксперимента.

*В заключении* сформулированы выводы по работе.

### Список литературы

1. Fink U., Larson H. P., Treffers R.R. Germane in the atmosphere of Jupiter. *Icarus*. V. 34, 1978. - 344–354 pp.
2. Lodders K. Jupiter formed with more tar than ice. *Astrophys. J.* V. 611, 2004. - 587–597 pp.
3. Lodders K. Atmospheric chemistry of the gas giant planets. *Geochem. Soc.*, 2010.