

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

Научный доклад об основных результатах подготовленной
научно-квалификационной работы

Тема научного доклада
Исследование спектров высокого разрешения больших молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и ее изотопической модификации $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$

УДК 539.194-047.37:535.338.42

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A4-82	Аслаповская Юлия Сергеевна		

Руководителя профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
профессор	Уленекhov Олег Николаевич	д.ф.-м.н., профессор		

Руководитель школы

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
директор	Степанов Игорь Борисович	д.т.н.		

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
профессор	Уленекhov Олег Николаевич	д.ф.-м.н., профессор		

Спектроскопия высокого разрешения является одним из основных источников данных о таких ценных характеристиках молекул, которые открывают возможность исследовать сложные эффекты внутримолекулярной природы. Молекула этилена это важный объект исследования в различных как чисто академических, так и прикладных задачах физики и химии, атмосферной оптики, планетологии, экологии, и многих других проблемах. Исследования в этом направлении проводятся в разных научных центрах России и мира [1-4]. К сожалению, такие исследования ограничиваются лишь одним или двумя связными резонирующими состояниями. В связи с этим, можно сказать, что исследование молекулы этилена, а так же ее различных изотопологов является весьма важной задачей.

Исследования молекулы этилена и этилен- ^{13}C в рамках аспирантской подготовки проводились в диапазоне от 600-3200 cm^{-1} . Для анализа были использованы спектры записанные специалистами из Технического Университета г. Брауншвейга в Германии, университета Оулу в Финляндии и Технического университета г. Наньяна в Сингапуре. Спектры были сняты на спектрометре Bruker (120,125HR) – типа Фурье, при температуре 298 К и разных давлениях.

Анализ спектров производился на основе метода комбинационных разностей. В исследуемом диапазоне локализовано 20 возбужденных состояний относящихся к молекулам этилена и этилен- ^{13}C , включающие в себя все фундаментальные, некоторые комбинационные и обертоновые полосы. В ходе анализа было определено около 30000 переходов с максимальными квантовыми числами $J^{\text{max}} / K_a^{\text{max}} = 40 / 13$ соответственно. На основе полученных экспериментальных данных была решена обратная спектроскопическая задача с учетом сильных резонансных взаимодействий между колебательными состояниями. В результате были определены наборы параметров которые воспроизводят начальные (экспериментальные) значения энергий с среднеквадратичной погрешностью $3,2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, что соответствует экспериментальной точности.

На основе выполненного энергетического анализа спектров для диапазона 2800-3200 cm^{-1} молекулы этилена, был выполнен анализ интенсивностей спектральных линий поглощения для этого диапазона. Так же был определен набор параметров

эффективного дипольного момента. Итоговый набор параметров описывает исходные экспериментальные данные с отклонением 6 %.

Цитируемая литература

- [1] Legrand J. Saturation spectroscopy of C₂H₄ using a CO₂ laser sideband Spectrometer / J. Legrand, M. Azizi, F. Herlemont, A. Fayt // J. Mol. Spectrosc. – 1995. – Vol. 171, is.1. – P. 13–21.
- [2] Cauuet I. Extension to 3rd-order coriolis terms of the analysis of ν_{10} , ν_7 and ν_4 levels of ethylene on the basis of Fourier-transform and diode-laser spectra / I. Cauuet, J. Walrand, G. Blanquet, Ghislain A. Valentin, L. Henry, et all // J. Mol. Spectrosc. – 1990. – Vol. 139. – P. 191–214.
- [3] Lerberghe D. V. High resolution study of the $\nu_7 + \nu_8$ band of ethylene (C₂H₄) at 1889 cm⁻¹ / D. V. Lerberghe and A. Fayt // J. Mol. Phys. – 1976. – Vol. 31. – P. 1875–1886.
- [4] Blanquet G. Diode-laser measurements and calculations of N₂-broadening coefficients in the ν_7 band of ethylene / G. Blanquet, J.-P. Bouanich, J. Walrand, M. Lepere // J. Mol. Spectrosc. – 2005. – Vol. 229. – P. 198–206.