**Оценка аналитических возможностей температурно-зависимой инфракрасной спектроскопии**

***Баранова А.О.1, Волков Д.С.1*, Проскурнин М.А. *1***

*Студент, 6 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: nastasiya2001@yandex.runastasiya2001@yandex.ru*

При анализе сложных смесей методом инфракрасной (ИК) спектроскопии возникает проблема перекрывания полос в спектрах поглощения. Единственным способом уменьшить ширину полосы является снижение температуры, поскольку при этом уменьшается число активных колебательных состояний. Однако ширина – не единственная характеристика, на которую оказывает влияние температура регистрации спектра, с изменением температуры меняются также форма полосы и её положение.

С точки зрения интерпретации и практического применения наблюдаемого явления нагрев образца является более удобным способом, чем охлаждение. Несмотря на то, что ширина полосы при нагревании увеличивается, по-прежнему наблюдается смещение полос, что подтверждается температурно-зависимыми данными для гуминовых веществ [1] и почв [2] и позволяет извлечь информацию, которую возможно использовать для интерпретации спектров сложных смесей.

Для широкого использования предлагаемого подхода необходимо более глубокое понимание протекающих при изменении температуры процессов. Выделяют два эффекта, которые можно связать с наблюдаемыми изменениями:

1. Тепловое расширение решётки, приводящее к уменьшению фононных частот с повышением температуры из-за ослабления межатомных взаимодействий [3];
2. Увеличение амплитуды колебаний, приводящее к увеличению фононных частот с повышением температуры из-за увеличения энергии фононов [4];

Сдвиг максимума полосы поглощения от температуры может тремя слагаемыми:

$$ω\_{i}\left(T\right)=ω\_{i}\left(0\right) + ∆ω\_{i}^{vol}\left(T\right) + ∆ω\_{i}^{anh}\left(T\right)$$

Первое слагаемое отвечает положению максимума полосы поглощения кристаллического вещества при 0 К и рассчитывается при помощи программного пакета Quantum Espresso. Второе и третье слагаемое — температурные сдвиги, вызванные тепловым расширением решётки и увеличением амплитуды колебаний соответственно.

На данном этапе работы получены расчётные ИК спектры для кристаллических диоксида углерода, фуллерена С-60, бензола, формиата калия, ацетата калия и α-кварца. Для ИК спектра диоксида углерода рассчитаны температурные сдвиги и получен теоретический спектр при 70К. Правильность расчетов проверяли сравнением с опубликованными данными. Зарегистрирован ряд спектров в средней и дальней ИК области этих соединений при различной температуре, который в дальнейшем будет сопоставлен с расчетными спектрами.

*Работа выполнена в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова АААА-А21-121011590089-1*

**Литература**

1. Volkov, D.S., O.B. Rogova, and M.A. Proskurnin, *Temperature dependences of IR spectra of humic substances of brown coal.* Agronomy, 2021. **11**(9): p. 1822.

2. Proskurnin, M.A., D.S. Volkov, and O.B. Rogova, *Temperature Dependences of IR Spectral Bands of Humic Substances of Silicate-Based Soils.* Agronomy, 2023. **13**(7): p. 1740.

3. Dove, M., *Introduction to Lattice Dynamics* 1993, Cambridge: Cambridge University Press.

4. Mittal, R., M. Gupta, and S. Chaplot, *Phonons and anomalous thermal expansion behaviour in crystalline solids.* Progress in Materials Science, 2018. **92**: p. 360-445.