

Г.А. Вандышева, Л.Н. Синица

СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ ЗАКИСИ АЗОТА В ОБЛАСТИ 1 МКМ

Спектр поглощения N_2O исследован в области 9100—9500 см^{-1} на высокочувствительном внутрирезонаторном лазерном спектрометре на основе лазера на стекле с неодимом с пороговой чувствительностью 10^{-8} см^{-1} и спектральным разрешением $0,08 \text{ см}^{-1}$. Зарегистрированы две колебательно-вращательные полосы с центрами 9219 и 9295 см^{-1} , обусловленные переходами на Ферми-резонансную полиду 4002. Определены спектроскопические постоянные высоких колебательно-вращательных состояний закиси азота.

Закись азота является одной из малых примесей атмосферы, поэтому исследование ее спектра поглощения необходимо для решения различных атмосферно-оптических задач. Спектры поглощения несимметричной линейной молекулы N_2O подробно изучены в инфракрасной области спектра. В банке спектральных данных [1] приведены центры полос и их интенсивности, вращательные постоянные колебательных состояний, позволяющие с погрешностью менее $0,01 \text{ см}^{-1}$ восстанавливать энергетическую структуру N_2O в области $580—5000 \text{ см}^{-1}$. На Фурье-спектрометре высокого разрешения $5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ проведены исследования закиси азота в области $1800—8000 \text{ см}^{-1}$, где зарегистрированы 51 полоса основного изотопа $^{14}N_2^{16}O$ [2], а также 233 полосы изотопов $^{15}N_2^{16}O$, $^{14}N_2^{18}O$, $^{14}N^{15}N^{16}O$, $^{15}N^{14}N^{16}O$ [3, 4] и проведен анализ вращательной структуры полос.

Для определения силового поля молекулы особенно важно получение спектроскопических постоянных колебательных состояний в области высоких частот, однако исследования закиси азота в фотографической области $8000—12000 \text{ см}^{-1}$ проведены только в 1950 г. на дифракционном спектрографе с разрешением $0,1 \text{ см}^{-1}$ и длиной пути луча в кювете 4500 м [5]. В настоящей работе спектр поглощения N_2O зарегистрирован в области 9100—9500 см^{-1} на высокочувствительном внутрирезонаторном (ВР) лазерном спектрометре.

Таблица 1

Положения центров линий поглощения N_2O , см^{-1}

<i>J</i>	40021 ← 00001		40022 ← 00001	
	<i>P(J)</i>	<i>R(J)</i>	<i>P(J)</i>	<i>R(J)</i>
1	9294,13	9296,52	—	—
2	9293,27	9297,32	—	—
3	9292,80	9298,06	—	—
4	9291,47	9298,75	—	9222,82
5	9290,50	9299,43	9214,62	9223,54
6	9289,54	9300,07	9213,65	9224,23
7	9288,55	9300,73	9212,63	9224,90
8	9287,54	9301,34	9211,63	9225,60
9	9286,51	9301,92	9210,60	9226,14
10	9285,45	9302,48	9209,57	9226,79
11	9284,36	9303,03	9208,52	9227,29
12	9283,21	9303,49	9207,47	9227,87
13	9282,11	9303,98	9206,32	9228,38
14	9280,83	9304,47	9205,19	9228,81
15	9279,71	9304,91	9204,03	9229,29
16	9278,54	9305,31	9202,84	9229,77
17	9277,28	9305,68	9201,68	9230,18
18	9275,98	9306,06	9200,42	9230,57
19	9274,70	9306,37	9199,15	9230,94
20	9273,40	9306,68	9197,80	9231,28
21	9272,06	9306,95	9196,61	9231,64
22	9270,69	9307,20	9195,28	9231,97
23	9269,29	9307,42	9193,92	9232,22
24	9267,89	9307,63	9192,53	9232,46
25	9266,45	9307,83	9191,13	9232,73
26	9264,98		9189,81	9232,95
27	9263,46		9188,38	9233,17
28	9261,98		9186,91	

Подробное описание ВР-спектрометра приведено в работе [6]. Пороговая чувствительность спектрометра к поглощению составляла 10^{-8} см^{-1} , спектральное разрешение — $0,08 \text{ см}^{-1}$.

Закись азота получена при нагревании в вакууме до температуры 200°C азотокислого аммония:



Осушка газа не производилась, и исследуемый газ содержал водяной пар, линии поглощения H_2O использовались в качестве реперных, относительно которых производились измерения положений центров линий N_2O с погрешностью $0,03 \text{ см}^{-1}$. В спектре закиси азота ($P = 200$ торр) зарегистрирована параллельная полоса $4\nu_1 + \nu_3$ с центром $\nu_0 = 9295 \text{ см}^{-1}$, положения центров линий которой измерены с более высокой точностью, чем в работе [5]. Кроме того, зарегистрирована ранее не наблюдавшаяся полоса с центром $\nu_0 = 9219 \text{ см}^{-1}$, так же как и полоса 9295 см^{-1} , обусловленная переходом на Ферми-резонансную полиду (4002). Значения центров линий полос приведены в табл. 1.

Определение вращательных постоянных полос проводилось с помощью метода комбинационных разностей. Найденные комбинационные разности для нижних состояний $\Delta_2 F(J) = R(J-1) - P(J+1)$ хорошо согласуются с комбинационными разностями состояния 000 [1], следовательно, зарегистрированные полосы 9219 см^{-1} и 9295 см^{-1} определяются переходами с основного состояния. Центры измеренных полос хорошо совпадают с рассчитанными J.L. Teffо (частное сообщение) значениями энергии уровней полиды ($9218,7 \text{ см}^{-1}$ и $9296,1 \text{ см}^{-1}$ соответственно).

Спектроскопические постоянные верхних колебательных состояний были определены с помощью комбинационных сумм

$$R(J-1) + P(J) = 2\nu_0 + 2(B'' - B' + D'' - D')J^2 - 2(D' - D'')J^4,$$

где ν_0 — центр полосы; J — вращательное квантовое число; B'', D'', B', D' — вращательные постоянные нижнего и верхнего колебательных состояний соответственно. В табл. 2 приведены спектроскопические постоянные зарегистрированных полос и их доверительные интервалы, полученные методом наименьших квадратов, значения B'', D'' взяты из [1].

Таблица 2

Спектроскопические постоянные N_2O , см^{-1}

Состояние	ν_0	B	$D \cdot 10^7$	Литература
40021	9294,99(2)	0,40637(8)	1,8 (8)	
40021	9295,04	0,4064	1,9	[5]
40022	9219,01(1)	0,40751(7)	2,1 (8)	

Полученная информация позволит уточнить силовое поле молекулы и, следовательно, улучшить точность расчета поглощения закиси азота в области высоких частот.

1. Mc Clatchey R. A. et al. «AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation». Environmental Research Paper 434. AFCRL-TR-73-0096. Air Force Cambridge Research Laboratories, 1973.
2. Amiot G., Guelashvili G. //J. Mol. Spectrosc. 1974. V. 51. P. 475—491.
3. Amiot G. //J. Mol. Spectrosc. 1976. V. 59. P. 191—208.
4. Amiot G. //J. Mol. Spectrosc. 1976. V. 59. P. 380—395.
5. Herzberg G., Herzberg L. //J. Chem. Phys. 1950. V. 18. P. 1551—1561.
6. Синица Л. Н. //Квантовая электроника. 1977. Т. 4. С. 148—150.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,
Томск

Поступило в редакцию
19 января 1989 г.

G. A. Vandyshova, L. N. Sinitsa. **Absorption Spectrum of Nitrous Oxide in the Region Near 1 μm .**

The absorption spectrum of N_2O molecules in the region 9100 to 9500 cm^{-1} was investigated using a highly sensitive intracavity Nd-glass laser spectrometer. The threshold sensitivity of the spectrometer is 10^{-8} cm^{-1} and the resolution of $0,08 \text{ cm}^{-1}$. Two vibration-rotational bands centered at 9219 cm^{-1} and 9295 cm^{-1} were recorded. These bands are due to the transitions to the Fermi-resonance polyad 4002. Spectroscopic constants of high vibration-rotational states of the nitrous oxide molecule were determined.