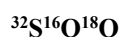


АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОС $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ И $2\nu_3$ МОЛЕКУЛЫ



Ян Иншу

Научные руководители: профессор, д.ф.-м.н. О.Н. Уленков, профессор к.ф.-м.н. О.В. Громова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 978437082@qq.com

ANALYSIS OF HIGH-RESOLUTION SPECTRA OF THE BANDS $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ AND $2\nu_3$ OF THE



Yang Yingshu

Scientific Supervisors: Prof., O.N. Ulenikov, Prof., O.V. Gromova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 978437082@qq.com

Abstract. *The high resolution infrared spectra of the $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ molecule were recorded with a Bruker IFS 120 HR Fourier transform interferometer for the first time in the region of $1800 - 2800 \text{ cm}^{-1}$ where the bands $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$, and $2\nu_3$ are located. The subsequent weighted fit of experimentally assigned transitions was made with the Hamiltonian model which takes into account the resonance interactions between the studied vibrational states.*

Введение. Диоксид серы - одно из важнейших химических соединений, которое используется в научных исследованиях в таких областях как химия, астрофизика, атмосферная оптика, лазерная физика и т.д. SO_2 играет важную роль в эволюции и извержении вулканов [1]. Сернистый ангидрид (SO_2) - бесцветный газ с резким запахом, один из главных загрязнителей атмосферы. Диоксид серы образуется при сжигании ископаемого топлива на предприятиях топливно-энергетического комплекса и в двигателях внутреннего сгорания, а также на предприятиях нефтехимического комплекса. Сернистый газ вреден не только для окружающей среды, но и для человека. В атмосфере он реагирует с водяным паром с образованием вторичного загрязнителя – серной кислоты (H_2SO_4) [2, 3]. В целом SO_2 - одно из самых важных соединений в атмосферном цикле Земли [4]. Чтобы решить проблемы удаленного обнаружения и контроля SO_2 на месте, важно детальное знание структуры спектров поглощения SO_2 в различных областях спектра электромагнитных волн, особенно в инфракрасной области излучения [5]. Исследование спектров высокого разрешения двуокиси серы также важно для планетологии, например, в атмосфере Венеры, где содержание двуокиси серы в миллион раз выше, чем в атмосфере Земли [6, 7].

В течение многих лет проводились спектроскопические исследования данной молекулы в микроволновой, субмиллиметровой и в инфракрасной области [8]. Однако, существует необходимость в дальнейших лабораторных исследованиях спектроскопических характеристик диоксида серы. Поэтому целью данной работы является изучение колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полос $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ и $2\nu_3$ молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, которые не исследовались ранее.

Методы исследования. В спектральной области $1800 - 2800 \text{ см}^{-1}$ на инфракрасном Фурье спектрометре *Bruker IFS 120 HR* в сочетании с ячейкой Уайта были зарегистрированы четыре спектра.

Источником излучения является глобар. Окна поглощающей ячейки были изготовлены с применением KBr, CaF₂-светоделитель и полупроводниковый детектор с антимонидом индия (InSb) были использованы для регистрации спектров.

Допплеровское уширение для ³²S¹⁶O¹⁸O при 298 К составляет от 0,0027 см⁻¹ (при 1800 см⁻¹) до 0,0042 см⁻¹ (при 2800 см⁻¹). Уширение давлением было между 0,00003 и 0,0014 см⁻¹ в используемом диапазоне давлений от 10(I) до 280(II) Па. Время измерения составляло около 2,4 мин на одно сканирование (полное время регистрации от 11 до 43 часов). Спектры были откалиброваны с помощью линий молекулы N₂O при парциальном давлении N₂O около 10 Па.

Исследуемые спектры I и II в области 2100 - 2700 см⁻¹ приведены на рис.1. Полосы трех различных изотопических соединений, ³²S¹⁶O₂, ³²S¹⁸O₂ и ³²S¹⁶O¹⁸O, наблюдаются в обоих спектрах. Однако, как видно из сравнения спектров I и II, наличие ³²S¹⁶O¹⁸O в образце II выше, чем в образце I. Таким образом, полоса 2ν₁ молекулы ³²S¹⁶O¹⁸O (центр полосы 2240 см⁻¹) значительно лучше выражена в спектре II.

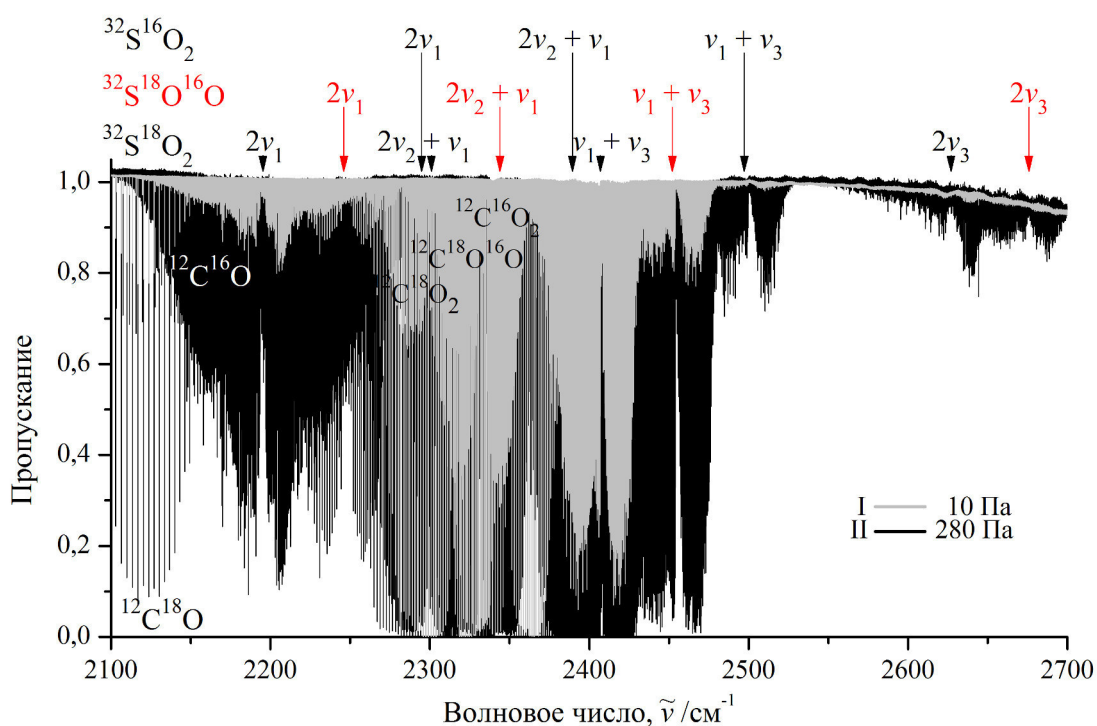


Рис. 1. Спектры I и II молекулы ³²S¹⁶O¹⁸O в области 2100-2700 см⁻¹

Исследуемые полосы принадлежит к *a*-типу и *b*-типу и имеет следующие правила отбора: ΔJ = 0, ± 1 и ΔK_a = 0, ± 1, ± 2, ± 3, ..., ΔK_c = ± 1, ± 3, Вращательные энергии основного состояния были рассчитаны с помощью параметров из работы [9].

Результат. В результате работы был исследован колебательно-вращательный спектр высокого разрешения в районе полос 2ν₁, ν₁ + ν₃ и 2ν₃ молекулы ³²S¹⁶O¹⁸O, которые не исследовались ранее. Около 3500, 3900 и 2850 переходов со значениями квантовых чисел J/K_a, равными 59/20, 68/25 и 43/18

определены для полос $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ и $2\nu_3$, соответственно. В результате решения обратной спектроскопической задачи получен набор из 39 параметров, который воспроизводит исходные данные с экспериментальной точностью.

Таблица 1

Спектроскопические параметры колебательного состояния (200) (101) (002) молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ (в см^{-1})

Параметры	(200)	(101)	(002)	(000)
E	2240.351232(28)	2454.025702(25)	2674.782845(29)	---
A	1.9742528(11)	1.95281269(86)	1.93174999(94)	1.97140279376
B	0.32129068(18)	0.32175733(15)	0.32221930(20)	0.32437916881
C	0.275551346(88)	0.275536284(51)	0.27561746(20)	0.277910933117
$\Delta_K \times 10^4$	0.83648(11)	0.81428(18)	0.79196(14)	0.814875996
$\Delta_{JK} \times 10^5$	-0.3263(11)	-0.3692(18)	-0.3996(14)	-0.361443882
$\Delta_J \times 10^6$	0.19374(17)	0.19754(17)	0.20175(18)	0.1969054

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Wallace PJ. Volcanic SO_2 emissions and the abundance and distribution of exsolved gas in magma bodies. J Volcanol Geotherm Res 2001;108:85-106.
- Self S, Rampino MR, Barbera JJ. The possible effects of large 19th and 20th century volcanic eruptions on Zonal and hemispheric surface temperatures. J Volcanol Geotherm Res 1981;11:41-60.
- McCormic MP, Thompson LW, Trepte CR, Atmospheric effects of the Mount Pinatubo eruption. Nature 1995;373:399-404.
- Charlson RJ, Anderson TL, McDuff RE. The Sulfur Cycle. In: Butcher SS, Charlson RJ, Orian GH, Wilfe GV (eds) Global biogeochemical cycles. Academic, San Diego, 285-299.
- Huang X, Schwenke DW, Lee TJ. Empirical infrared line lists for five SO_2 isotopologues: $^{32/33/34/36}\text{S}^{16}\text{O}_2$ and $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. J Mol Spectrosc 2015;311:19-24.
- Bezard B, DeBergh C, Fegley B, Maillard J-P, Crips D, Owen T, Pollack JB, Grinspoon D. The abundance of sulfur dioxide below the clouds of Venus. Geophys Res Lett 1993;20:1587-1590.
- Marcq E, Betraux J-L, Montmessin F, Belyaev D. Variations of sulfur dioxide at the cloud top of Venus's dynamic atmosphere. Nature Geoscience 2013;6:25-28.
- Ulenikov ON, Onopenko GA, Gromova OV, Bekhtereva ES, Horneman V-M. Re-analysis of the (100), (001), and (020) rotational structure of SO_2 on the basis of high resolution FTIR spectra. J Quant Spectrosc Radiat Transf 2013;130:220-232.
- Ulenikov ON, Bekhtereva ES, Krivchikova YuV, Zamotaeva VA, Buttersack T, Sydow C, Bauerecker S. Study of high resolution spectrum of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$: The ν_1 and ν_3 bands. J Quant Spectrosc Radiat Transf 2016;168:29-39.