

УДК 543.422

**ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПОГЛОЩЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА  $H_2S$  ( $M=32,33,34$ )  
В РАЙОНЕ ПЕРВОЙ ДЕКАДЫ: ПОЛОЖЕНИЯ ЛИНИЙ, ИНТЕНСИВНОСТИ,  
КОЭФФИЦИЕНТЫ САМОУШИРЕНИЯ**

Е.В. Гаппель, Т.Е. Ерсин

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.С. Бехтерева  
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050  
E-mail: [evg37@tpu.ru](mailto:evg37@tpu.ru)

**THE ABSORPTION CHARACTERISTICS OF HYDROGEN SULFIDE  $H_2S$  ( $M=32, 33, 34$ )  
IN THE REGION OF FIRST DECADE: LINES POSITIONS, INTENSITIES,  
SELF-BROADENING COEFFICIENTS»**

E.V. Gappel, T.E. Ersin

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.S. Bekhtereva  
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050  
E-mail: [evg37@tpu.ru](mailto:evg37@tpu.ru)

**Abstract.** *High-resolution Fourier transform infrared spectrum of  $H_2S$  was recorded and analyzed in the region of the  $\nu = \nu_1 + \nu_2 / 2 + \nu_3 = 3$  polyad. Experimental transitions were assigned to the  $3\nu_1$ ,  $2\nu_1 + \nu_3$ ,  $\nu_1 + 2\nu_3$ ,  $3\nu_3$ ,  $2\nu_1 + 2\nu_2$ ,  $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$ , and bands with the maximum value of quantum number  $J$  equal to 20. The theoretical analysis was fulfilled with the Hamiltonian model which takes into account numerous resonance interactions between all the mentioned vibrational states.*

**Введение.** Молекула  $H_2S$  представляет огромный интерес для спектроскопических исследований, поскольку сероводород является атмосферным газом Земли, а также был обнаружен в атмосферах других планет Солнечной системы и в межзвездном пространстве. Сера является ключевым элементом в химии некоторых планет-гигантов, поскольку предполагается, что газообразные соединения серы вступают в реакцию с  $NH_3$  и конденсируются в виде кристаллов  $NH_4SH$ , которые образуют тропосферные облака этих планет [1, 2]. Например, сероводород обнаружен в атмосферах Урана и Юпитера. Кроме того, молекула сероводорода, возможно, является индикатором биологической жизни [3, 4].

Спектроскопические исследования молекулы  $H_2S$ , как и молекулы воды, проводятся активно уже много десятков лет. К настоящему времени, в литературе имеется много информации о поглощении  $H_2S$  молекулы в микроволновом, инфракрасном и видимом диапазонах. Однако, имеется существенный недостаток в информации о спектральных интенсивностях поглощения, а также коэффициентах самоуширения для  $H_2S$  и ее изотопологах в высоковозбужденных состояниях.

В данной работе выполнен анализ спектра высокого разрешения  $H_2S$  в диапазоне полиады  $V=3$ , называемой первой декадой.

Колебательные состояния с фиксированным значением квантового числа  $V = v_1 + v_2 / 2 + v_3$  образуют так называемые полиады взаимодействующих колебательных состояний. В этом случае состояния в одной и той же полиаде могут сильно возмущать друг друга за счет взаимодействия типа Ферми (Дарлинг-Деннисона) и/или Кориолиса. По этой причине гамильтониан, используемый для анализа экспериментальных данных, должен иметь следующий вид

$$H^n = E^n + \left[ A^n - \frac{1}{2}(B^n + C^n) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^n - C^n) J^2 + \frac{1}{2}(B^n + C^n) J_{xy}^2 - \Delta_K^n J_z^4 - \Delta_{JK}^n J_z^2 J^2 - \Delta_J^n J^4 - \delta_K^n [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^n J^2 J_{xy}^2 + H_K^n J_z^6 + H_{KJ}^n J_z^4 J^2 + H_{JK}^n J_z^2 J^4 + H_J^n J^6 + [J_{xy}^2, h_K^n J_z^4 + h_{JK}^n J^2 J_z^2 + h_J^n J^4] + L_K^n J_z^8 + L_{KKJ}^n J_z^6 J^2 + L_{JK}^n J_z^4 J^4 + L_{JJK}^n J_z^2 J^6 + L_J^n J^6 + [J_{xy}^2, l_K^n J_z^6 + l_{KJ}^n J_z^4 J^2 + l_{JK}^n J_z^2 J^4 + l_J^n J^6] + P_K^n J_z^{10} + [J_{xy}^2, p_K^n J_z^8],$$

**Экспериментальная часть.** Экспериментальные спектры поглощения молекулы были зарегистрированы в Техническом университете Брауншвайга в широком диапазоне  $3400-10400 \text{ cm}^{-1}$  с использованием Фурье-спектрометра Bruker 125HR (прототип ZP2001 IFS120 HR) при комнатной температуре. Для наиболее полного анализа были выбраны экспериментальные параметры LXP: (I) 182м X 5мбар; (II) 163м X 20мбар.

Молекула  $H_2S$  является молекулой типа ассиметричный волчок группа молекулярной симметрии, которой изоморфна группе  $C_{2v}$ . Три колебательные координаты  $q_1, q_2$  и  $q_3$  и имеют симметрии  $A_1, A_1$  и  $B_2$  соответственно и имеют собственные частоты  $2614,44, 1182,53$  и  $2628,37 \text{ cm}^{-1}$  [5]. Соотношение частот  $\omega_1 = \omega_3 = 2\omega_2$  определяет структуру колебательного спектра, характеризуемую полиадным числом  $V = v_1 + v_2 / 2 + v_3$ . В данной работе исследовалась полиада  $V = 3$ , включающая десять состояний.

Два типа колебательно-вращательных полос возможно наблюдать в поглощении:

- параллельные - полосы с четным  $v_3$ , правила отбора

$$\Delta J = 0, \pm 1 ; \Delta K_a = \pm(2n + 1) ; \Delta K_c = \pm(2m + 1)$$

- перпендикулярные - полосы с нечетным  $v_3$

$$\Delta J = 0, \pm 1 ; \Delta K_a = \pm 2n ; \Delta K_c = \pm(2m + 1)$$

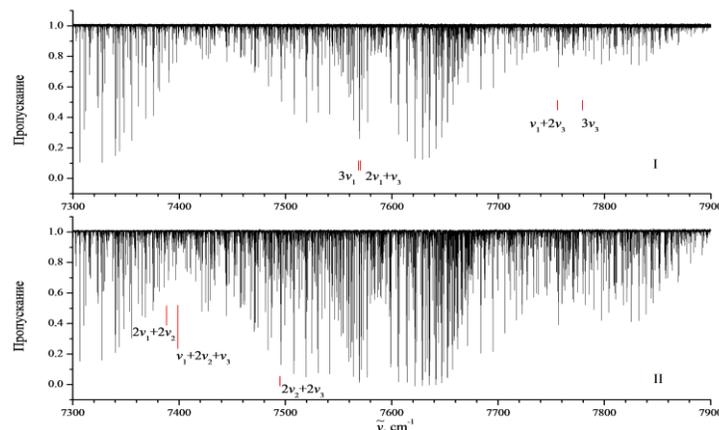


Рис. 1 Спектр молекулы  $H_2S$

Как показано на Рис.1, самая сильная пара полос  $3\nu_1$  и  $2\nu_1 + \nu_3$  полностью перекрываются и расположены примерно на 176 и 203  $\text{см}^{-1}$  ниже, чем ближайшая более слабая пара полос  $3\nu_3$  и  $\nu_1 + 2\nu_3$ . В свою очередь, три деформационные дважды возбужденные полосы рассматриваемой полиады  $(\nu_1 + \nu_2 / 2 + \nu_3) = 3$ , а именно,  $2\nu_1 + 2\nu_2$ ,  $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$ ,  $2\nu_2 + 2\nu_3$  расположены примерно на 156 и 60  $\text{см}^{-1}$  ниже, чем самые сильные полосы  $3\nu_1$  и  $2\nu_1 + \nu_3$ . По этой причине и принимая во внимание значения вращательных параметров A, B и C, можно ожидать, что локальные возмущения колебательно-вращательных структур состояний  $(30^+; 0)$  и  $(30^-; 0)$  другими колебательными состояниями появятся для  $J \geq 5 - 6$ . Конечно, сильные резонансные возмущения внутри пар 'локально-модных' состояний  $(30^+; 0)$  и  $(30^-; 0)$ ,  $(20^+; 0)$  и  $(20^-; 0)$ , наблюдаются, начиная уже с  $J \geq 1$ .

Для анализа переходов был использован метод комбинационных разностей, для чего использовалось основное состояние [6]. В результате этого были найдены энергии переходов колебательно-вращательных состояний  $(3\ 0\ 0)$ ,  $(2\ 0\ 1)$ ,  $(1\ 0\ 2)$ ,  $(0\ 0\ 3)$ , и  $(1\ 2\ 1)$  с максимальными значениями квантовых чисел  $J=20$  и  $Ka=5$ .

**Результаты.** Всего проинтерпретировано и отнесено к исследуемым полосам 3787 перехода. Решена обратная спектроскопическая задача. Определены параметры эффективного гамильтониана, восстанавливающие экспериментальные значения 944 колебательно-вращательных уровней со среднеквадратичным отклонением  $d_{rms}=3.45 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ .

**Заключение.** Полученное решение колебательно-вращательной задачи может быть использовано при решении обратной задачи по определению параметров дипольного момента на основании экспериментальных данных об интенсивностях переходов в исследуемых полосах.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Castets A., Ceccarelli C., Lefloch B., Caux E. and Paganì L. Sulphur-bearing species in the star forming region L1689N // *Astronomy and Astrophysics*. – 2004 – V. 413. – P. 609–622.
2. Visscher C, Lodders K, Fegley J.B. Atmospheric Chemistry in Giant Planets, Brown Dwarfs, and Low-Mass Dwarf Stars II. Sulfur and Phosphorus // *Astronomy and Astrophysics*. – 2006 – V. 648. – P.1181–95.
3. Aladro R., Martin S., Martin-Pintado J., Mauersberger R, Henkel C., A  $\lambda=1.3\text{mm}$  and 2 mm molecular line survey towards M82 // *Astronomy and Astrophysics*. – 2011. – V.535. – A84. – P.1-17.
4. Justtanont K, Khouri T, Maercker M, Alcolea J, Decin L, Olofsson H, The Herschel Exploitation of Local Galaxy Andromeda (HELGA): IV. Dust scaling relations at sub-kpc resolution // *Astronomy and Astrophysics*. – 2012. – V.537. – A144. – P. 1-12.
5. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Leroy C., Gromova O.V. On the determination of the intramolecular potential functions for a polyatomic molecule: H<sub>2</sub>S // *Russian Physics Journal*. 2008 – Vol. 51., No. 1. – P. 18-25.
6. Flaud J-M., Camy-Peyret C., Johns JWC. The far-infrared spectrum of hydrogen sulfide. The (000) rotational constants // *Canadian Journal of Physics*. – 2011. – V.61. – P. 1462–1473.