

XX СИМПОЗИУМ ПО МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ (HIGHRUS-2023)

УДК 539.194

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ИЗОТОПОЛОГОВ NNO
В ОБЛАСТИ 4200–6500 см^{-1}

© 2024 г. Л. Н. Синица^{а, *}, В. И. Сердюков^{а, **}, Н. М. Емельянов^{а, ***}

^аИнститут оптики атмосферы им. В.Е. РАН, Сибирское отделение, 634055, Томск, Россия

*e-mail: sln@iao.ru

**e-mail: serd49@mail.ru

***e-mail: nikita.emelyanov.92@mail.ru

Поступила в редакцию 10.11.2023 г.

После доработки 10.11.2023 г.

Принята к публикации 21.11.2023 г.

Спектры поглощения семи изотопологов NNO ($^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ и $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$) исследованы в области 4200–6500 см^{-1} с помощью фурье-спектрометра Bruker FS-125M, используя образец, состоящий из NO (80% $^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ и 20% $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$), а также небольшого количества изотопологов N_2O . Погрешность измерения центров линий составила 0.0003 см^{-1} , погрешность измерения интенсивностей линий 5–15%. Спектроскопические постоянные 27 полос определены при фитинге параметров контура линии к набору измеренных данных. Отмечено, что среднеквадратичное отклонение измеренных центров линий от рассчитанных (0.0005 см^{-1} –0.0027 см^{-1}) было близко к экспериментальной погрешности.

Ключевые слова: изотополог закиси азота, фурье-спектроскопия, высокое разрешение, положение линий, спектроскопические константы

DOI: 10.31857/S0044453724060107, EDN: PXLYBR

ВВЕДЕНИЕ

N_2O один из наиболее важных атмосферных газов, играющий значительную роль в парниковом эффекте атмосферы. Наиболее распространенными изотопологами закиси азота являются изотопологи $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ (с содержанием в естественной смеси согласно [1] 9.903×10^{-1}), $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ (3.641×10^{-3}), $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ (3.641×10^{-3}), $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ (1.986×10^{-3}), $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ (3.654×10^{-3}), $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ (0.00145%) и $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ (0.00145%). Современные исследования показывают, что основной изотополог изучен очень хорошо, в то время как редкие изотопологи нуждаются в исследовании, либо в уточнении данных, хотя они могут быть информативны для анализа определенных газовых смесей.

В базе данных HITRAN[1] имеется информация о линиях поглощения пяти изотопологов. Для изотополога $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ в диапазоне 3000–6000 см^{-1} эта информация взята из работ [2,3], а для остальных изотопологов представлены данные таблицы работы [2]. Амио [4] изучил семь полос изотополога $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ в диапазоне 2000–3500 см^{-1} , а также девяти полос $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ в диапазоне

4200–6400 см^{-1} . Совсем недавно шесть полос изотополога $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ были изучены Вангом и др. [5] в немного более широком диапазоне 1200–3500 см^{-1} , в области более высоких волновых чисел наблюдались две полосы $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$. Григс и др. [6] зарегистрировали на дифракционном спектрометре четыре полосы $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ в диапазоне 4200–4600 см^{-1} . Манц и др. [7] зарегистрировали полосу $2\nu_3$ при 4358 см^{-1} , а также пять полос $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ в диапазоне 4200–4900 см^{-1} . Полоса $3\nu_3$ изотополога $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ вблизи 6492 см^{-1} изучалась Лю и др. [8]. Люлин и др. [9] зарегистрировали недавно на фурье-спектрометре 10 полос $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ в области 5800–7500 см^{-1} . В работе [10] на основе всех имеющихся экспериментальных данных затабулирован лист линий изотопологов $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ и $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$.

В данной работе представлены результаты исследования спектра NNO в области 4200–6500 см^{-1} . Спектр образца, состоящего из NO (80% $^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ и 20% $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$) и следовых количеств изотопологов N_2O , регистрировали на фурье-спектрометре Bruker IFS-125M. Было обнаружено, что образец содержал множество изотопологов закиси азота в повышенных концентрациях. В работе [11] мы провели исследование пяти полос изотополога $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$. В данной статье мы проводим анализ

¹ Иркутская обл., пос. Чара, 3–7 июля 2023 года.

Таблица 1. Условия эксперимента

Спектральное разрешение	0.0056 см ⁻¹
Оптическая длина пути	2400 см
Давление	16 мбар
Температура	24 ± 1 °C
Отношение сигнала к шуму	3000
Источник излучения	Галогеновая лампа
Диафрагма	0.7 мм
Длительность измерений	10 дней
Фотоприемник	InGaAs

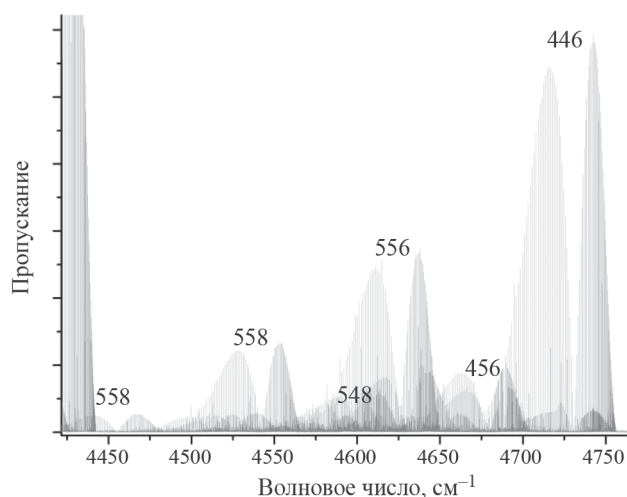


Рис. 1. Состав записанного спектра в области 4400–4800 см⁻¹. Указана полосы 2ν₃ ¹⁴N₂¹⁶O (446), ¹⁵N₂¹⁸O (558), ¹⁵N₂¹⁶O (556), ¹⁴N¹⁵N¹⁶O (456) и ¹⁵N¹⁴N¹⁸O (548).

полос семи остальных изотопологов, зарегистрированных в спектре.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Спектр поглощения закиси азота в диапазоне 4200–6500 см⁻¹ зарегистрирован с помощью фурье-спектрометра Bruker IFS-125M со спектральным разрешением 0.0056 см⁻¹ и многолучевой газовой кюветой с базой 60 см. Общий путь луча в кювете составил 2400 см. Спектрометр был оснащен галогенной лампой, германиевым фотодетектором и светоделителем из CaF₂. Давление пробы измерялось датчиком АИР-20/М2-Н с погрешностью 0.03 гПа. К усредненной интерферограмме применялся метод фазовой коррекции Мерца с фазовым разрешением 1 см⁻¹. Аподизация не применялась. Термостабилизация помещения позволяла осуществлять длительную запись (до 10 суток). Отношение сигнал/шум в записанных спектрах составляло около 3000 для сильных

линий в области измерений. Это обеспечило хорошую точность определения параметров контура линий с интенсивностью выше 10⁻²⁶ см/молекулу при 296 К. Спектр поглощения смеси закиси азота регистрировали при давлении газа 16 мбар. Условия измерений приведены в табл. 1.

Мы использовали образцы NO фирмы ИЗОТОП (80% ¹⁵H¹⁸O и 20% ¹⁴H¹⁶O), содержащий небольшое количество изотопологов N₂O. Химические процессы внутри образца приводят к появлению ряда изотопологов закиси азота. Парциальное давление компонентов смеси определялось путем сравнения экспериментальных интенсивностей линий изотопологов NO и N₂O в зарегистрированном спектре с интенсивностями линий из базы данных HITRAN2020 [1]. Установлено, что парциальное давление всех изотопологов N₂O составляло около 1 мбар. Записанный спектр был очень плотным. В спектре обнаружили полосы поглощения девяти изотопологов N₂O. На рис. 1 показан фрагмент записанного спектра. Большинство обнаруженных полос уже исследовано в литературе.

Доплеровская полуширина на полувысоте (HWHM) составляла 0.0039 см⁻¹ для NNO при температуре измерения, что было меньше разрешения спектрометра 0.0056 см⁻¹. Это ограничивает точность измерений, особенно интенсивности и полуширины линии. На погрешность измерения центра линии разрешение оказывает меньшее влияние. Для измерений мы выбрали изолированные линии, рядом с которыми не было соседних линий в пределах 3 полуширин γ от центра линии. За изолирующей линией дополнительно следили по плавности относительного распределения интенсивности линий в полосе.

Параметры линий (центры линий, интенсивности) определялись с помощью программного пакета Wxspе, который позволяет осуществлять автоматический поиск пиков с использованием алгоритмов распознавания образов [12]. Этот программный пакет также позволяет подгонять параметры контура линии к набору измеренных данных с использованием процедуры регуляризации Тихонова. Параметры линии определялись по профилю Фойгта. Помимо подгонки измеренного профиля линии, программа определяла параметры инструментальной функции.

Частотная шкала фурье-спектрометра калибровалась по положениям 84 линий H₂¹⁶O в области 4000–6000 см⁻¹ с интенсивностями более 3 × 10⁻²⁵ см/молекулу. Положения линий взяты из работы [1]. Отклонение калиброванных центров линий от данных в базе данных HITRAN [1] не превышало 0.0003 см⁻¹, что определяло точность измерений фурье-спектрометра. Дополнительная проверка точности измерений центров линий была проведена с помощью наиболее точных измерений

линий поглощения NNO, выполненных в последнее время. На рис. 2 показаны различия между наблюдаемыми и расчетными значениями положения линий в зависимости от квантового числа m , где $m = -J$ для Р-ветви и $m = J + 1$ для R-ветви полосы 448. Отличие измеренных центров линий 448 от данных работы [3] не превышает 0.0003 см^{-1} , что и определяет погрешность измерений центров линий на данном спектрометре.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Анализ зарегистрированного спектра

В спектре мы обнаружили полосы семи изотопологов: $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ и $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$. Линии были идентифицированы с использованием комбинационных разностей (КР) основных состояний, которые достаточно различны для разных изотопологов. В табл. 2 показаны комбинационные разности $\text{KР}(J) = R(J-2) - P(J)$ изотопологов NNO для двух значений вращательного квантового числа J основного состояния. Изотопологи $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ и $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, а также $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ и $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$, различающиеся массой второго атома азота, имеют более близкие комбинационные разности. При $J = 20$ КД (J) различаются на 0.0016 см^{-1} , тогда как при $J = 30$ эта разница достигает 0.006 см^{-1} и может быть надежно зарегистрирована спектрометром.

С помощью комбинационных разностей основных состояний были определены положения линий 30 колебательно-вращательных полос различных изотопологов. Для расчета комбинационных различий мы использовали спектроскопические константы из [2]. Наблюдаемые положения линий этих полос были использованы для аппроксимации спектроскопических констант верхних колебательных состояний, полученных по известному уравнению

$$E_V(J) = G_V + B_V J(J+1) - D_V [J(J+1)]^2, \quad (1)$$

где G_V — значение колебательного члена, B_V — постоянная вращения, D_V — константа центробежного искажения. Подполосы e-e- и f-f-полосы рассматривались отдельно. Подогнанные значения спектроскопических констант для полос представлены в табл. 3. Среднеквадратические значения разности подгонки (RMS), которые также показаны в таблицах, близки к погрешности наблюдений. Наблюдаемые и рассчитанные положения линий, а также их различия приведены в дополнительном материале. Колебательное отнесение следует рассматривать как предварительное из-за сильного перемешивания собственных функций гармонического осциллятора из-за резонансных колебательных взаимодействий в закиси азота.

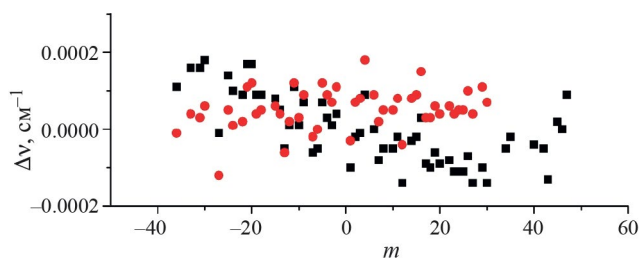


Рис. 2. Отличие измеренных центров линий 448 в данной работе (черные квадраты) и данных работы [3] (красные кружки) от рассчитанных значений.

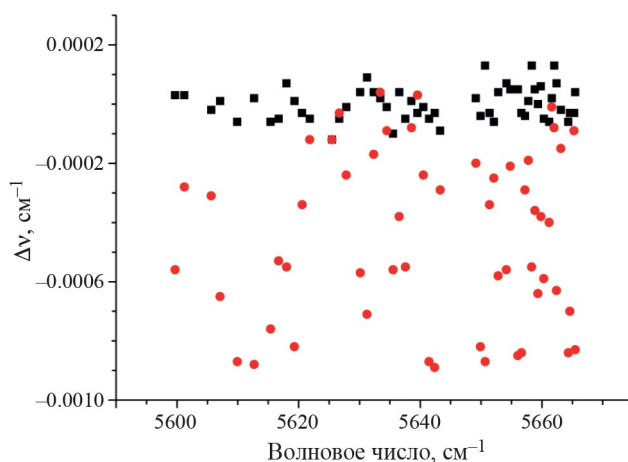


Рис. 3. Отличие измеренных центров линий полосы $\nu_1 + 2\nu_3$ изотополога 446 в данной работе (черные квадраты) и измерений работы [2] (красные кружки) от рассчитанных значений.

$^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$. Все зарегистрированные полосы $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ наблюдались ранее Тосом [2]. Положения центров линий в работе [2] имеют довольно большие неопределенности. Нам удалось улучшить позиции линий поглощения полос $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$. В табл. 3 приведены значения колебательной энергии и вращательных постоянных верхних колебательных уровней. Значения вращательных постоянных, полученные в настоящей работе, близки к данным работы [2], в то время как колебательная энергия G_V верхних состояний отличается на $0.0003...0.0005 \text{ см}^{-1}$. Среднеквадратичное значение отклонений наших измерений, приведенное в 3 колонке табл. 3 на 1–2 порядка меньше данных работы [2] (колонка 7).

На рис. 3 показаны различия между наблюдаемыми и расчетными значениями положения линий полосы $\nu_1 + 2\nu_3$ $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$. Рассчитанные положения линий были получены с использованием спектроскопических констант, представленных в табл. 3.

Таблица 2. Комбинационные разности NNO, см^{-1}

J	$^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$	$^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$	$^{14}\text{N}_2^{16}\text{O}$	$^{14}\text{N}_2^{18}\text{O}$	$^{15}\text{N}_2^{16}\text{O}$	$^{15}\text{N}_2^{18}\text{O}$	$^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$
20	29.781	32.67006	32.67239	30.84564	31.56935	29.77666	31.56915
30	45.036	49.40357	49.40709	46.64563	47.73983	45.02978	47.73953

Таблица 3. Спектроскопические постоянные (в см^{-1}) для полос $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$

Колебательное состояние $V_1V_2^{l_2}V_3$	Линии	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	G_V	B_V	$D_V \times 10^7$	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	Ссылки
00°0			0	0.4190111	1.7609193		[2]
12°1	P31/R28	0.06	4630.1614(2) ^{a)} 4630.16115	0.4147609(1) 0.414761758	2.378(1) 2.405560	0.218222	[2]
20°1	P33/R34	0.036	4730.8253(8) 4730.82505	0.4121180(4) 0.412118560	1.610(4) 1.620142	0.224375	[2]
24°0	P31/R21	0.089	4910.9962(4) 4910.99555	0.4168956(2) 0.416899659	3.482(3) 3.603352	0.431905	[2]
10°2	P40/R36	0.056	5646.7406(1) 5646.74019	0.4103077(6) 0.410308009	1.706(4) 1.711981	0.448	[2]
22°1	P27/R32	0.092	5888.1066(3) 5888.10587	0.4129280(2) 0.412930176	2.329(2) 2.372173	0.513077	[2]
30°1	P31/R34	0.054	5974.8456(2) 5974.84507	0.4106711(9) 0.410671277	1.362(8) 1.364569	0.518974	[2]
42°0	P20/R31	0.12	6295.4483(9) 6295.44763	0.4124065(5) 0.412409340	2.095(4) 2.159055	0.392353	[2]
00°3	P43/R44	0.098	6580.8541(2) 6580.85370	0.4086356(8) 0.408635527	1.745(4) 1.745407	0.447458	[2]
32°0	P32/R35	0.22	5026.3033(2) 5026.30292	0.4143710(1) 0.414404152	2.2811(9) 2.349362		[2]

^{a)} В скобках дана погрешность в единицах последней значащей цифры.

Таблица 4. Спектроскопические постоянные (в см^{-1}) для полос $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$

Колебательное состояние $V_1V_2^{l_2}V_3$	Линии	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	G_V	B_V	$D_V \times 10^7$	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	Ссылки
00°0			0	0.381865(2)	1.4673(9)		[6]
00°2	P57/R51	0.071	4266.9816(1) 4266.9827(8)	0.375806(3) 0.38184(2)	1.458(1) 1.46(6)	1.35	[6]
12°1	P35/R33	0.072	4455.0750(2) 4455.0788(10)	0.378100(1) 0.37803(2)	1.910(9) 1.71(8)	3.51	[7]
20°1	P45/R41	0.085	4541.9581(2) 4541.9597(12)	0.375968(6) 0.38192(3)	1.278(3) 1.65(9)	2.5	[6]
32°0	P40/R37	0.19	4808.7252(5) 4808.7327(13)	0.377763(2) 0.37795(4)	1.816(1) 3.06(16)	−1.34	[7]
00°3	P37/R37	0.11	6358.1417(3)	0.372770(1)	1.461(1)		

Рисунок показывает, что неопределенность в наблюдаемых нами положениях линий в 4 раза лучше, чем опубликованная в [2].

$^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$. Из пяти зарегистрированных полос $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ четыре полосы наблюдались ранее Григгсом и Манцом [6, 7]. Положения центров линий в работах [6, 7] имеют довольно большие неопределенности. В табл. 4 приведены значения колебательной энергии и вращательных постоянных верхних колебательных уровней. Значения вращательных постоянных, полученные в настоящей работе, близки к данным работы [6, 7], в то время как колебательная энергия G_v верхних состояний отличается на $0.0003\ldots 0.0005\text{ см}^{-1}$. Среднеквадратичное значение отклонений наших измерений, приведенное в 3 колонке табл. 4 на 1–2 порядка меньше данных работ [6, 7] (колонка 7).

На рис. 4 показаны различия между наблюдаемыми и расчетными значениями положения линий полосы $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$ изотополога $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$. Рассчитанные положения линий были получены с использованием спектроскопических констант, представленных в табл. 4.

Из рис. 4 следует, что неопределенность в наблюдаемых нами положениях линий на два порядка лучше, чем опубликованная в [7].

$^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$. В табл. 5 приведены значения колебательной энергии и вращательных постоянных колебательного уровня. 00^2 . Значения вращательных постоянных, полученные в настоящей работе, близки к данным работы [3].

$^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$. Все три зарегистрированные полосы $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ наблюдались ранее Тосом [2]. Затабулированные положения центров линий [2] дают синусоидальное отличие от наших данных (рис. 6), что вызвано неправильными значениями вращательных постоянных. В табл. 6 приведены значения колебательной энергии и вращательных постоянных верхних колебательных уровней.

$^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$. Из двух зарегистрированных полос $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ полоса с центром 4373.6060 см^{-1} наблюдались ранее Тосом [2]. Затабулированные положения центров линий [2] дают резкое отличие от наших данных на высоких значениях вращательного квантового числа (рис. 7), что свидетельствует о неправильном значении постоянной центробежного искажения, полученной в работе [2]. В табл. 6 приведены значения колебательной энергии и вращательных постоянных верхних колебательных уровней.

$^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$. Полосы $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ уже наблюдались в работе [11]. В настоящей работе уточнены значения вращательных постоянных.

$^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$. Все четыре зарегистрированные полосы $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ наблюдались ранее Тосом [2]. Полоса $3\nu_3$ была исследована ранее в работе [9],

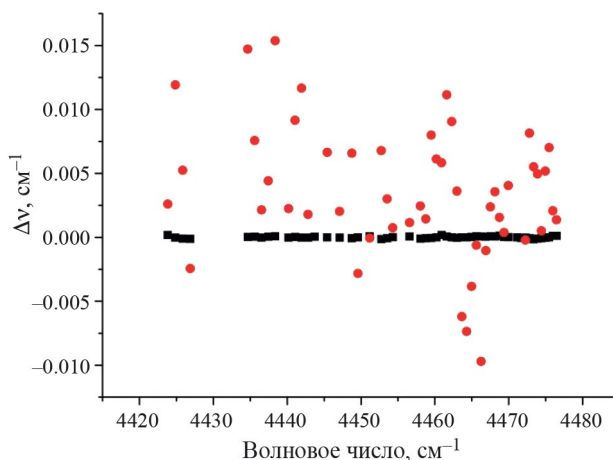


Рис. 4. Отличие измеренных центров линий полосы $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$ изотополога $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ в данной работе (черные квадраты) и измерений работы [7] (красные кружки) от рассчитанных значений.

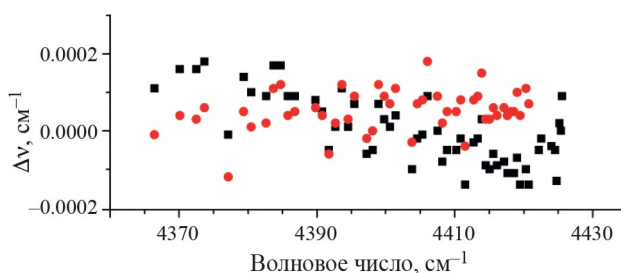


Рис. 5. Отличие измеренных центров линий полосы $2\nu_3$ изотополога $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ в данной работе (черные квадраты) и измерений работы [3] (красные кружки) от рассчитанных значений.

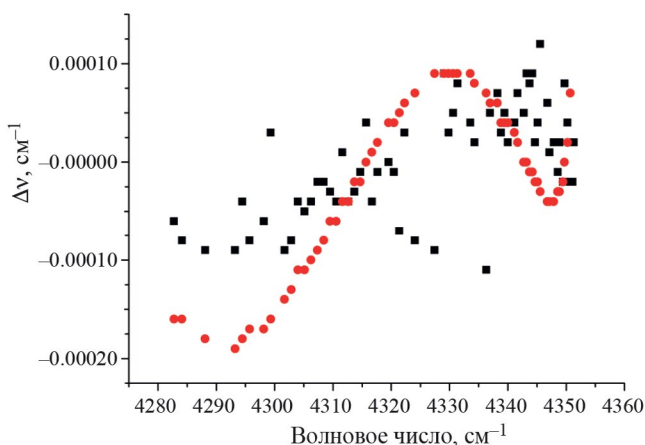


Рис. 6. Отличие измеренных центров линий полосы $2\nu_3$ изотополога $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ в данной работе (черные квадраты) и измерений работы [2] (красные кружки) от рассчитанных значений.

Таблица 5. Спектроскопические постоянные (в см^{-1}) для полос $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$

Колебательное состояние $V_1V_2^{1/2}V_3$	Линии	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	G_V	B_V	$D_V \times 10^7$	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	Ссылки
00°0			0	0.3955784(2)	1.584(3)		[4]
00°2	P36/R46	0.089	4403.0276(2)	0.3891191(6)	1.5776(3)		
			4403.02759	0.389117140	1.580975	−0.112586	[3]

Таблица 6. Спектроскопические постоянные (в см^{-1}) для полос $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$

Колебательное состояние $V_1V_2^{1/2}V_3$	Линии	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	G_V	B_V	$D_V \times 10^7$	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	Ссылки
			0	0.418981810	1.763264		[2]
00°2	P40/R48	0.055	4326.61709(1)	0.4123156(4)	1.7463(2)		
			4326.61717	0.412317083	1.748183	−0.021666	[2]
20°1	P48/R48	0.076	4677.7978(1)	0.4119500(5)	1.7074(2)		
			4677.79785	0.411950301	1.689002	−0.093771	[2]
30°1	P34/R33	0.13	5914.7101(5)	0.4101664(3)	1.6229(2)		
			5914.70926	0.410158758	1.453565		[2]

Таблица 7. Спектроскопические постоянные (в см^{-1}) для полос $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$

Колебательное состояние $V_1V_2^{1/2}V_3$	Линии	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	G_V	B_V	$D_V \times 10^7$	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	Ссылки
00°0			0	0.404857965	1.642938		[2]
00°2	P47/R44	0.08	4373.6060(2)	0.3981326(6)	1.631(3)		
			4373.60609	0.398130258	1.630547	0.0426415	[2]
30°1	P45/R38	0.096	5849.4677(3)	0.396633(9)	1.459(5)		

Таблица 8. Спектроскопические постоянные (в см^{-1}) для полос $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$

Колебательное состояние $V_1V_2^{1/2}V_3$	Линии	RMS $\times 10^3 \text{ см}^{-1}$	G_V	B_V	$D_V \times 10^7$	Ссылки
00°0			0	0.3819194(4)	1.467(1)	[11]
00°2	P47/R45	0.049	4358.2314(1)	0.375636(3)	1.465(1)	
	P45/R43	0.5	4358.2172(1)	0.3756359(4)	1.467(2)	[11]
12°1	P42/R40	0.1	4601.9871(3)	0.376559(1)	1.046(7)	
		2.7	4601.9716(8)	0.3765592(2)	1.015(7)	[11]
32°0	P33/R38	0.21	4853.4279(5)	0.377868(2)	1.2952(2)	
	P50/R50	1.2	4853.4284(3)	0.3778613(6)	1.250(2)	[11]

Таблица 9. Спектроскопические постоянные (в см⁻¹) для полос ¹⁵N¹⁵N¹⁶O

Колебательное состояние <i>V</i> ₁ <i>V</i> ₂ ^{<i>l</i>₂} <i>V</i> ₃	Линии	RMS × 10 ³ см ⁻¹	<i>G_V</i>	<i>B_V</i>	<i>D_V</i> × 10 ⁷	RMS × 10 ³ см ⁻¹	Ссылки
00°0			0	0.4048602(6)	1.6356		[13]
00°2	P57/R49	0.065	4281.3405(1)	0.398367(3)	1.625(1)		
			4281.340720(47)	0.398367192(60)	1.62414(16)	0.21	[13]
12°1	P41/R38	0.2	4511.8803(5))	0.400897(2)	2.320(1)		
			4511.88041(15)	0.40089427(42)	2.2934(21)	0.73	[13]
20°1	P50/R48	0.11	4625.6042(2)	0.398221(6)	1.565(3)		
			4625.604249(50)	0.39822187(12)	1.57392(67)	0.25	[13]
00°3	P41/R45	0.097	6379.8592(3)	0.395112(8)	1.620(5)		
			6379.858640(9)	0.39511266(7)	1.625(1)	0.51	[9]
			6379.858650(85)	0.39511246(11)	1.61983(31)	0.32	[13]

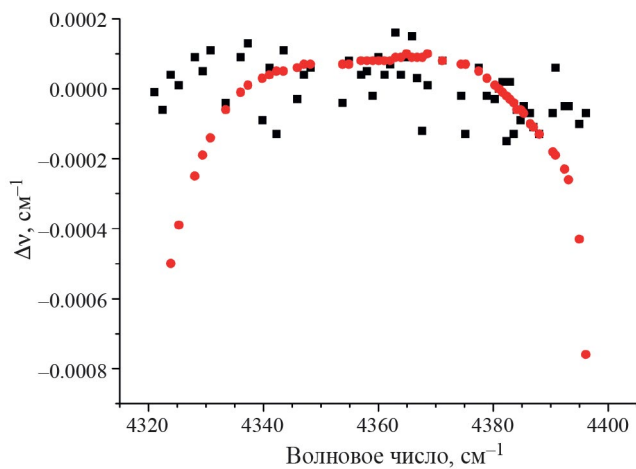


Рис. 7. Отличие измеренных центров линий полосы 2ν₃ изотополога ¹⁵N¹⁴N¹⁶O в данной работе (черные квадраты) и измерений работы [2] (красные кружки) от рассчитанных значений.

экспериментальные данные которой отличаются от наших данных в среднем на -0.0004 см⁻¹ (рис. 6), а также в работе [13], затабулированные данные которой отличаются от наших данных от -0.0008 см⁻¹ до -0.0018 см⁻¹. В табл. 9 приведены значения колебательной энергии и вращательных постоянных верхних колебательных уровней.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе зарегистрирован спектр поглощения образца, состоящего из NO, обогащенного до 80% ¹⁵N¹⁸O и незначительным количеством изотопологов N₂O. Благодаря химическим

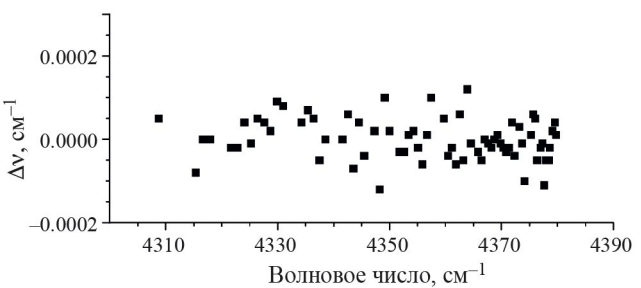


Рис. 8. Отличие измеренных центров линий полосы 2ν₃ изотополога ¹⁵N¹⁴N¹⁸O.

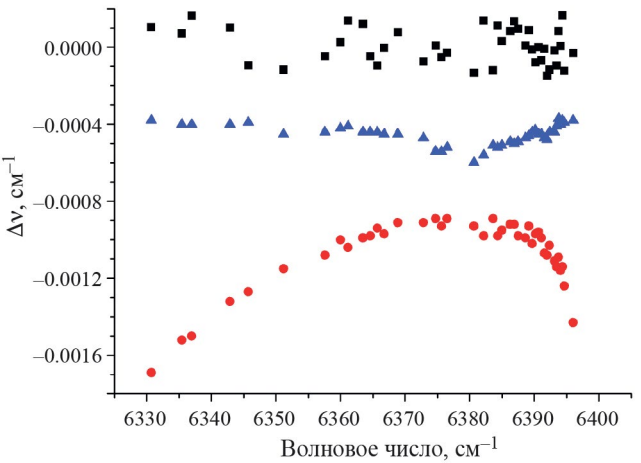


Рис. 9. Отличие измеренных центров линий полосы 3ν₃ изотополога ¹⁵N¹⁵N¹⁶O в данной работе (черные квадраты), измерений работы [13] (красные кружки) и [9] (синие треугольники) от рассчитанных значений.

процессам внутри образца семь изотопологов заки-
си азота вносят вклад в записанный спектр, демон-
стрируя значительные значения их концентраций.

Для двадцати семи изученных полос семи изо-
топологов NNO получены более точные чем ранее
значения положений центров линий и определены
спектроскопические постоянные верхних колеба-
тельных состояний переходов. Две полосы зареги-
стрированы впервые: полоса $3\nu_1 + \nu_3$ изотополога
 $^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ с центром 5849.4677 см^{-1} и полоса $3\nu_3$
изотополога $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ с центром 6358.1417 см^{-1} .

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант
№ 23-23-00184).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J. et al. // J. of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2022. Т. 277. С. 107949. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107949>*
2. *Toth R.A. Linelist of N2O Parameters from 500 to 7500 cm^{-1} // JPL online. 2004.*
3. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Karlovets E.V. et al. // J. of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2016. Т. 176. С. 62. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2016.02.020>*
4. *Amiot C. // J. of Molecular Spectroscopy. 1976. Т. 59. № . 2. С. 191. [https://doi.org/10.1016/0022-2852\(76\)90290-3](https://doi.org/10.1016/0022-2852(76)90290-3)*
5. *Wang C.Y., Liu A.W., Perevalov V.I. et al. // Ibid. 2009. Т. 257. № . 1. С. 94. <https://doi.org/10.1016/j.jms.2009.06.012>*
6. *Griggs Jr J.L., Rao K.N., Jones L.H., Potter R.M. // Ibid. 1967. Т. 22. № . 1–4. С. 383. [https://doi.org/10.1016/0022-2852\(67\)90185-3](https://doi.org/10.1016/0022-2852(67)90185-3)*
7. *Mantz A.W., Rao K.N., Jones L.H., Potter R.M. // Ibid. 1969. Т. 30. № . 1–3. С. 513. [https://doi.org/10.1016/0022-2852\(69\)90283-5](https://doi.org/10.1016/0022-2852(69)90283-5)*
8. *Hu C.L., Perevalov V.I., Cheng C.F. et al. // The J. of Physical Chemistry Letters. 2020. Т. 11. № . 18. С. 7843. <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.0c02136>*
9. *Lyulin O.M., Jacquemart D., Lacome N. et al. // J. of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2010. Т. 111. № . 3. С. 345. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2009.10.010>*
10. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Liu A.W., Hu S.M. // Ibid. 2016. Т. 175. С. 1. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2016.01.038>*
11. *Sinita L.N., Serdyukov V.I., Perevalov V.I. // Molecular Physics. 2022. Т. 120. № . 15–16. С. 2078744. <https://doi.org/10.1080/00268976.2022.2078744>*
12. *Kruglova T.V., Shcherbakov A.P. // Optics and Spectroscopy. 2011. V. 111. P. 353. [doi/10.1134/s0030400x1109013x](https://doi.org/10.1134/s0030400x1109013x).*
13. *Gao B., Wang C.Y., Lu Y. et al. // J. of Molecular Spectroscopy. 2010. Т. 259. № . 1. С. 20. <https://doi.org/10.1016/j.jms.2009.10.006>*