

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ВРАЩАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР НИЗКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$

С. Б. Казымова*, А. С. Гасанова

УДК 535.33

Институт физики НАН Азербайджана,
АЗ-1143, Баку, просп. Г. Джавида, 131, Азербайджан; e-mail: kazymova-s@mail.ru

(Поступила 8 октября 2018)

В рамках методики аддитивного моделирования спектров низкого разрешения молекул по микроволновым спектрам высокого разрешения проведены расчеты частот спектров низкого разрешения молекулы дейтерозамещенного изопропилового спирта $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$ в диапазоне 0—1200 ГГц. Установлен наиболее вероятный диапазон частот максимумов спектров поглощения.

Ключевые слова: микроволновый спектр, дистанционное зондирование, спектр низкого разрешения.

The low-resolution frequency spectra of the molecule of deuterium-substituted isopropyl alcohol $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$ in the range of 0—1200 GHz were calculated using additive modeling of low-resolution molecular spectra by high-resolution microwave ones. The most probable frequency range of the absorption spectra maxima was determined.

Keywords: microwave spectrum, remote sensing, low resolution spectrum.

Прогнозирование наличия вредных с экологической точки зрения включений в различных слоях земной атмосферы и идентификация молекулярного состава газообразных объектов космического пространства являются приоритетным и весьма перспективным направлением дистанционного зондирования. Изучение особенностей формирования микроволновых спектров газов в природных условиях актуально для решения задач экологического мониторинга атмосферы с точки зрения решения других практических и фундаментальных задач физики атмосферы, например, качественного и количественного анализа содержания ряда органических соединений, широко используемых в различных отраслях промышленного производства, для экологического мониторинга степени загрязнений земной атмосферы, околоземного и дальнего космического пространства, для контроля сохранности вещества в процессе осуществления логистических операций (транспортировки, хранения), включая его промышленное производство, а также поиск способов оптимизации эксплуатационных свойств.

В настоящей работе с целью поиска рекомендаций по дистанционному зондированию атмосферы, загрязненной аэрозолями, в состав которых входит молекула дейтерированного изопропилового спирта $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$, проведены расчеты частот спектров низкого разрешения (НР) этой молекулы в диапазоне 0—1200 ГГц.

Вращательный спектр молекулы $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$ впервые был исследован в сантиметровом диапазоне в работах [1, 2], подробнее и в более широком диапазоне частот — в работах [34].

Для теоретического моделирования спектров НР исследуемой молекулы использована так называемая аддитивная модель расчетов, успешно апробированная ранее [5, 6]. В качестве оптимально приемлемых ограничений общего числа вращательных переходов высокого разрешения, подлежащих

ROTATIONAL LOW RESOLUTION SPECTRUM OF THE MOLECULE $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$

S. B. Kazimova*, A. S. Gasanova (Institute of Physics, National Academy of Sciences of Azerbaijan, 131 H. Javid Prosp., Baku, AZ-1143, Azerbaijan; e-mail: kazymova-s@mail.ru)

соответствующей обработке, выступают ограничения, накладываемые на вращательные квантовые числа ($J \leq 60$), а также относительные интенсивности (учитывались лишь вращательные переходы, интенсивность которых $\geq 10^{-6} \text{ см}^{-1}$). Коэффициент поглощения определяется выражением:

$$\alpha(\vartheta) = \frac{S}{2\pi} \frac{\Delta\vartheta_p}{(\vartheta - \vartheta_0)^2 + (\Delta\vartheta_p / 2)^2},$$

где $\Delta\vartheta_p$ — полная ширина линии на половине максимального значения коэффициента поглощения [6].

Теоретическая модель спектра НР молекулы (CD₃)₂CDOH, рассчитанного в диапазоне 0—1200 ГГц при атмосферном давлении с лоренцевым уширением вращательных линий, приведена в [7] и указывает на наличие максимума поглощения при 480—500 ГГц (рис. 1).

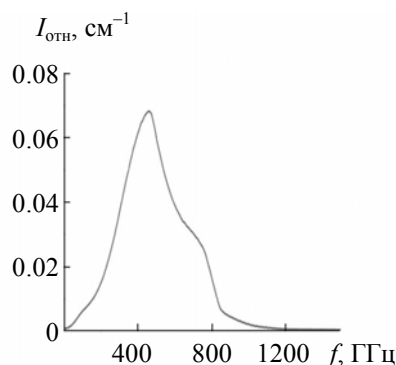


Рис. 1. Спектр НР молекулы дейтерозамещенного изопропилового спирта в диапазоне частот 0—1200 ГГц

Для решения большинства задач экологического мониторинга земной тропосферы необходимо моделирование микроволновых спектров НР не только у поверхности Земли, но и на больших высотах (над уровнем моря) с учетом соответствующих изменений давления, температуры и полуширины спектральных линий при разном атмосферном давлении [6]. Кроме того, для разработки технических средств детектирования загрязнений атмосферы необходимо знать участок спектра электромагнитного излучения, в котором происходит максимальное поглощение, и зависимость интенсивности спектральных линий этого диапазона от давления. Оптимальное решение указанной проблемы — регистрация спектров НР исследуемой молекулы при разных давлениях. С этой целью использованы результаты для уширения спектральной линии на высотах 5 км (–0.84 ГГц) и 9 км (–0.47 ГГц) из таблицы в работе [6].

На рис. 2 и 3 представлены теоретические модели спектров НР молекулы (CD₃)₂CDOH, рассчитанные в диапазонах 0—1200 и 350—550 ГГц на высотах 5 и 9 км. Как видно, с увеличением высоты над уровнем моря огибающая спектров НР размывается. Следует отметить, что с ростом высоты (т. е. с уменьшением давления) соответствующие пики спектрограмм позволяют с большей точностью судить о частотах максимумов.

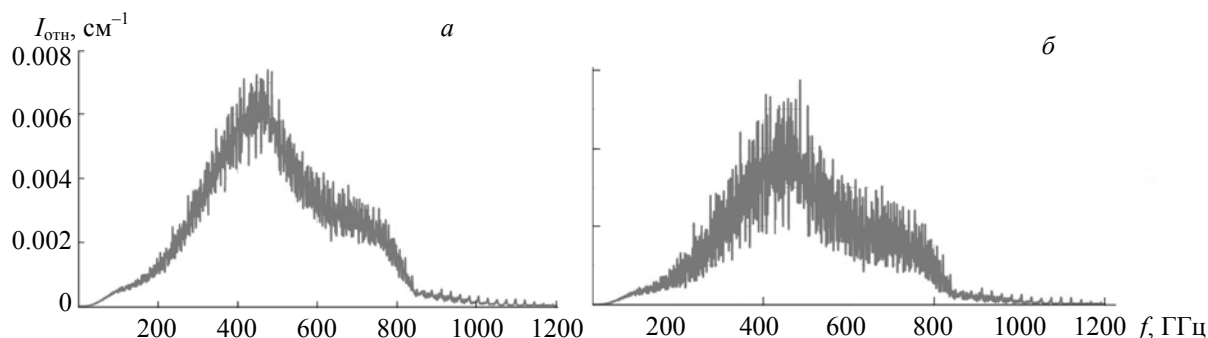


Рис. 2. Спектры НР молекулы дейтерозамещенного изопропилового спирта в диапазоне частот 0—1200 ГГц на высотах 5 (а) и 9 км (б)

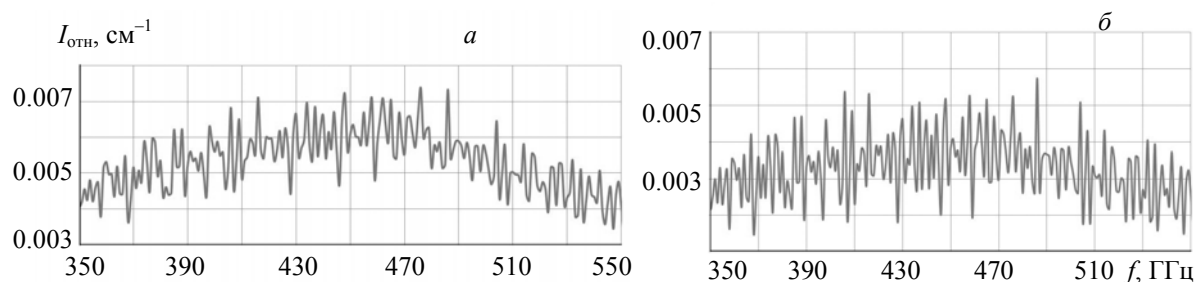


Рис. 3. Спектры ИР молекулы дейтерозамещенного изопропилового спирта в диапазоне частот 350—550 ГГц на высотах 5 (а) и 9 км (б)

Таким образом, полученные результаты могут быть использованы для решения ряда вопросов при изучении молекул в условиях высокого давления, а также спектральных линий молекул вблизи абсолютного вакуума (при астрономических исследованиях космического пространства) при осуществлении экологического мониторинга и контроля производственных процессов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда развития науки при Президенте Азербайджанской Республики (грант № EIF-BGM-3-BRFTF-2⁺/2017 15/03/1).

- [1] Ч. О. Каджар, С. А. Мусаев, Э. Ю. Салаев. Журн. прикл. спектр., **39**, № 1 (1983) 69—74
- [2] Ч. О. Каджар, С. А. Мусаев, Э. Ю. Салаев. Опт. и спектр., **55**, № 4 (1983) 648—652
- [3] Ч. О. Каджар, С. А. Мусаев, Э. Ч. Саидов. Fizika, **7**, N 2 (2001) 25—31
- [4] S. B. Kazimova, M. E. Əliyev. $(CD_3)_2CDOH$ Molekulunun *Trans*-Konformerinin Mikrodalğa Spektri, Bakı (2013)
- [5] Ч. О. Каджар, Г. И. Исмаилзаде, М. Р. Мензелейев, И. З. Мовсумов, С. Б. Казымова. Журн. прикл. спектр., **83**, № 3 (2016) 385—389 [Ch. O. Kadjar, G. I. Ismailzadeh, M. R. Menzeleyev, I. Z. Movsumov, S. B. Kazimova. J. Appl. Spectr., **83** (2016) 379—382]
- [6] Ч. О. Каджар, С. Б. Казымова, А. С. Гасанова, Г. И. Исмаилзаде, М. Р. Мензелейев. Журн. прикл. спектр., **85**, № 2 (2018) 194—198 [Ch. O. Kadjar, S. B. Kazimova, A. S. Hasanova, G. I. Ismailzadeh, M. R. Menzeleyev. J. Appl. Spectr., **85** (2018) 216—219]
- [7] Ч. О. Каджар, С. Б. Казымова, А. С. Гасанова. Журн. прикл. спектр., **84**, № 3 (2017) 483—485 [Ch. O. Kadjar, S. B. Kazimova, A. S. Gasanova. J. Appl. Spectr., **84** (2017) 498—500]