

Спектры радиоактивных изотопологов водяного пара

Б.А. Воронин *

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева, Томск, Россия

**vba_iao@mail.ru*

Аннотация. В работе представлена информация по колебательно-вращательным спектрам водяного пара радиоактивных кислородных изотопологов водяного пара — H_2^{15}O и H_2^{14}O . Данные изотопологи могут появляться в среде в результате молний или пробоя заряда. Они могут принимать участия в сложных реакциях, представляющие интерес для исследования плазмы, геофизики, астрофизики и медицины.

Ключевые слова: H_2^{15}O , H_2^{14}O , водяной пар.

1. Введение

Плазма – четвертое состояние, является наиболее распространенной формой вещества во вселенной. При нормальных земных условиях плазму можно считать экзотическим состоянием. В атмосфере Земли плазма проявляется в грозах, при разрядах молний в виде низкотемпературной плазмы атмосферных газов с температурой порядка ~ 10000 К. Хорошо известно, что разряды молний приводят к синтезу различных молекул, например, озона (O_3), но то, что после молнии могут появляться не только нетипичные для атмосферы молекулы, но и изотопологи – известно уже намного меньше. Настоящая работа посвящена тому, чтобы осветить некоторые аспекты молнии и/или пробоя заряда в воздухе. Тут необходимо отметить, что сходные явления могут проявляться и при прохождении импульса фемтосекундного лазера через воздух с подобной локальной температурой ~ 7000 – 8000 К [1].

В связи с тем, что окружающая атмосфера имеет значительно более низкую температуру, различные процессы, происходящие при молнии (или пробое), имеют различные каналы релаксации, в том числе фотоядерные реакции, в результате которых, помимо всевозможных радикалов, могут образовываться короткоживущие радиоактивные изотопологи водяного пара. Более подробно этот вопрос обсуждается в обзорной статье Бабича [2]. Кроме того, некоторые результаты и обсуждение фотоядерных реакций при грозах, при солнечных вспышках изложены в [3]. В частности, в [3] отмечается, что суперпозиция грозового фронта и солнечной бури может вызывать проявление малоизученных быстротекущих процессов. Можно отметить ряд работ, в которых рассматривается излучение, происходящее во время молний [4–9]. Имеется еще ряд публикаций, в которых данный вопрос упоминается, в частности в работах Тарасенко [10–14]. Но тут надо отметить, что излучение, зарегистрированное в [10–14], относится к рентгеновскому диапазону. Также, были обнаружены всплески гамма- и нейтронного излучения (см., например, [2]). В работе [15] (и ссылки в ней) приводятся примеры наблюдения как рентгеновского, так и гамма излучения в грозовых фронтах и в экспериментальных условиях, приближенных к ним. Вероятно, одним из каналов релаксации фотоядерных реакций является образование относительно долгоживущих радиоактивных изотопологов молекул водяного пара.

2. Радиоактивные изотопологи водяного пара

Как известно, может существовать более 500 изотопических модификаций водяного пара. Необходимо принять во внимание, что известны 7 изотопов водорода – ^1H , $^2\text{H} = \text{D}$, $^3\text{H} = \text{T}$, ^4H , ^5H , ^6H , ^7H и 18 изотопов кислорода от ^{11}O до ^{28}O . Также хорошо известны 9 стабильных изотопологов водяного пара состоящих из водорода (^1H) и дейтерия (D) и

изотопов кислорода ^{16}O , ^{17}O и ^{18}O . Спектры стабильных изотопологов имеющие наибольшую концентрацию для земных условий представлены в БД HITRAN и GEISA [16]. Рассчитанные спектры четырех изотопологов содержащих тритий (Т) можно найти на сайте <http://spectra.iao.ru> описанного в [17]. Это изотопологи T_2^{16}O , TH^{16}O , TD^{16}O и T_2^{18}O , а также их спектры в ИК и видимом диапазонах, которые можно моделировать для различных смесей и условий.

Для настоящей работы основной интерес представляют кислородные радиоактивные долгоживущие изотопологи водяного пара. Их наличие в атмосфере обусловлено реакцией (1):



Но возможны и другие реакции. В разряде молнии тормозное гамма излучение создают релятивистские убегающие электроны, сталкивающиеся с атомами атмосферы. Реакция сопровождается потоком нейтронов, которые также регистрируются в грозовой атмосфере [2, 7]. Следует отметить, что период полураспада ^{19}O составляет 26 секунд, ^{14}O — 70 секунд, а ^{15}O — чуть более 2 минут (122 сек). Еще можно отметить, что изотопы ^{20}O , ^{21}O и ^{22}O имеют период полураспада 13, 3 и 2 секунды, соответственно. Очевидно, что для соответствующих изотопологов воды можно рассматривать колебательно — вращательные спектры поглощения, излучения или рассеяния. У других изотопов кислорода ^{11}O , ^{12}O , ^{13}O , ^{23}O – ^{28}O период полураспада — миллисекунды, наносекунды или еще меньше.

В настоящий момент, имеются расчетные спектры короткоживущих изотопологов водяного пара H_2^{15}O [18, 19], H_2^{14}O [20] и H_2^{19}O [21], где представлены расчеты КВ спектров в ИК и видимом диапазонах. Кроме того, в работе [22] имеется расчет колебательных уровней изотопологов водяного пара H_2^XO , где $X = 11 \div 26$.

В данной работе расчеты кислородных модификаций водяного пара были проведены с использованием широко известной методики DVR3D [23], в расчетах использовались высокоточные поверхности потенциальной энергии [24] и дипольного момента [25]. Кроме того, необходимо отметить работу [18], в которой измерялись спектры солнечного излучения, прошедшего через атмосферу Земли. Всего было исследовано около 4800 спектров, которые были зарегистрированы на Фурье-спектрометр Bruker-125HR станции NDACC [26, 27]. Эти спектры регистрировались в течении около 10 лет на физическом факультете СПбГУ. Спектры были разделены на 2 части. Большая часть из них была зарегистрирована в дни, когда не было гроз, и около 200 спектров были зарегистрированы в дни, когда были грозы. В результате объединения и сравнения спектров предположительно была обнаружена очень слабая линия H_2^{15}O с центром 1973.5 см^{-1} (5067.14 нм). Список линий H_2^{15}O представлен в статье [19]. Иллюстрацию поглощения данной линии (5067.14 нм), а также всех остальных атмосферных газов из БД HITRAN-2000 можно видеть на Рис.1.

Спектры поглощения H_2^{14}O , H_2^{15}O , H_2^{16}O и H_2^{19}O в диапазоне от 0.0001 см^{-1} до 20000 см^{-1} (10000000 нм до 500 нм) можно найти на сайте <https://ftp.iao.ru/pub/VTT/> в соответствующих разделах. На Рис. 2 и 3 представлено поглощение четырех изотопологов водяного пара H_2^{14}O , H_2^{15}O , H_2^{16}O и H_2^{19}O в диапазоне $100\text{--}300 \text{ см}^{-1}$ и $7100\text{--}7400 \text{ см}^{-1}$. В данном модельном спектре концентрация у всех изотопологов одинаковая. Видно, что можно отметить постоянный сдвиг, по крайней мере, для сильных вращательных линий на Рис. 2, но уже в ИК диапазоне данный сдвиг уже не очень четко отслеживается.

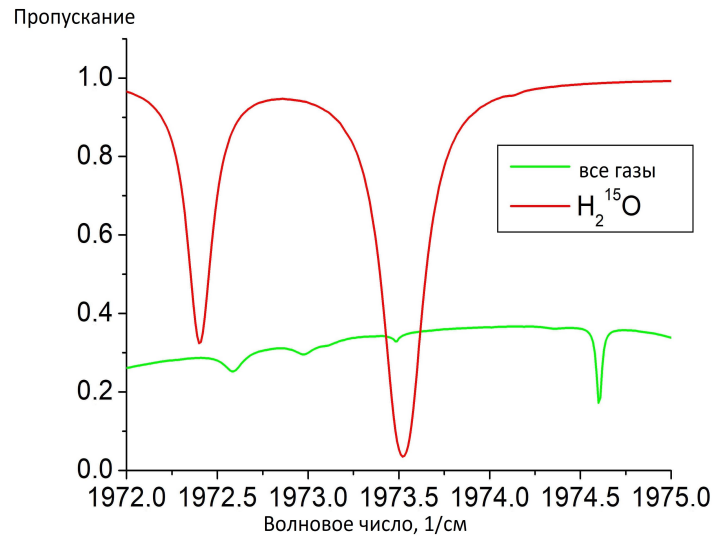


Рис. 1. Поглощение H_2^{15}O зарегистрированное в атмосфере Земли на частоте 1973.5 см^{-1} (5067.14 нм). Поглощение всеми другими газами взято из БД HITRAN2020.

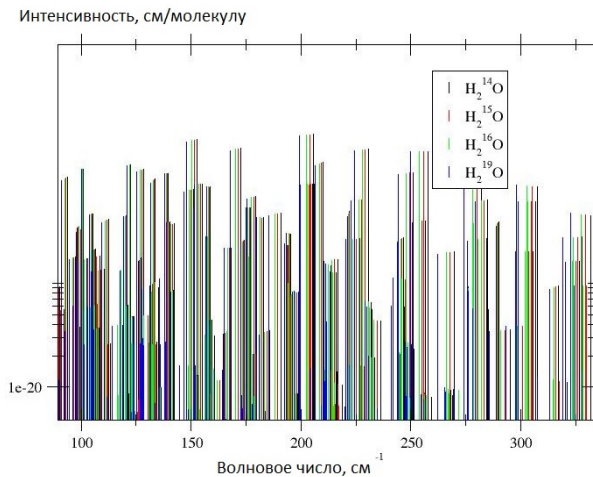


Рис. 2. Модель поглощения 4 изотопологами водяного пара (H_2^{14}O , H_2^{15}O , H_2^{16}O , H_2^{19}O) имеющими одинаковую концентрацию в районе вращательной полосы. $100\text{--}300 \text{ см}^{-1}$ ($100000\text{--}33333 \text{ нм}$).

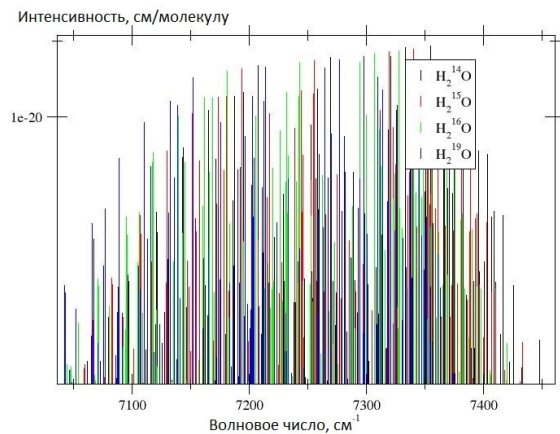


Рис. 3. Модель поглощения 4 изотопологами водяного пара (H_2^{14}O , H_2^{15}O , H_2^{16}O , H_2^{19}O) имеющими одинаковую концентрацию в ИК диапазоне. $7100\text{--}7400 \text{ см}^{-1}$ ($1408\text{--}1350 \text{ нм}$).

3. Выводы

В данной работе, на основе высокоточных поверхностей потенциальной функции и дипольного момента определены спектральные диапазоны, представляющие интерес для детектирования изотопологов H_2^{14}O , H_2^{15}O и H_2^{19}O в атмосфере. Ранее, аналогичные расчеты проводились в работах [19–21]. В качестве вывода отметим детектирование H_2^{15}O в атмосфере возможно в спектральных диапазонах около 1973 , 3810 , 3824.5 и 5276 см^{-1} и некоторых других, хотя это требует экспериментального подтверждения за исключением 1973.5 см^{-1} .

Благодарности

Автор выражает благодарность за помощь в работе А.Д. Быкову, М.В. Макаровой, Т.Ю. Чесноковой и А. Ченцову.

Работа выполнена в рамках Госзадания ИОА СО РАН.

4. Список литературы

- [1] F. Martin, R. Mawassi, F. Vidal, I. Gallimberti, D. Comtois, H. Pépin, J. C. Kieffer, H. P. Mercure, Spectroscopic Study of Ultrashort Pulse Laser-Breakdown Plasmas in Air, *Appl. Spectrosc.*, vol. **56**, 1444, 2002, <https://opg.optica.org/as/abstract.cfm?URI=as-56-11-1444>
- [2] L.P. Babich, Thunderous neutrons, *Phys. Usp.*, vol. **62**, 976, 2019, doi: 10.3367/UFNr.2018.12.038501
- [3] G.S. Bordonskiy, Possible mechanisms of anomalous electromagnetic radiation in the earth's atmosphere, *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, vol. **56**, 1687, 2020, doi: 10.1134/S0030400X11020032
- [4] H. Adila, A. Pedro, A. Marco et al. Investigating multiple elves and halos above strong lightning with the fluorescence detectors of the Pierre Auger Observatory, *Proceedings of Science*, vol. **372**, 2023, doi: 10.22323/1.444.0372
- [5] R. Mussa, Pierre Auger Collaboration. & Ciaccio, G. Observation of ELVES at the Pierre Auger Observatory, *Eur. Phys. J. Plus*, vol. **127**, 94, 2012, doi: 10.1140/epjp/i2012-12094-x
- [6] A. Abdul Halim, P. Abreu, M. Aglietta, et al., The Pierre Auger Collaboration, Study of downward Terrestrial Gamma-ray Flashes with the surface detector of the Pierre Auger Observatory, *38th International Cosmic Ray Conference (ICRC2023) – Cosmic-Ray Physics (Indirect, CRI)*, vol. **444**, 1, 2023, doi: 10.22323/1.444.0439
- [7] P.G. Ortega, Isotope production in thunderstorms, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, vol. **208**, 105349, 2020, doi: 10.1016/j.jastp.2020.105349
- [8] В.И. Коган, В.С. Лисица, *Излучение плазмы*, Большая российская энциклопедия. [online], 2016, [дата обращения: 12.08.2024]; <https://old.bigenc.ru/physics/text/2002014>
- [9] Д.А. Сорокин, Д.В. Белоплотов, А.А. Гришков, В.А. Шкляев, В.Ф. Тарасенко, С.Я. Беломытцев, М.И. Ломаев, *Высоковольтный наносекундный разряд в неоднородном электрическом поле и его свойства*. Томск: STT, 2020.
- [10] Е.Х. Бакшт, А.Г. Бураченко, М.И. Ломаев, А.Н.Панченко, В.Ф. Тарасенко, Источник импульсно-периодического УФ излучения на основе объемного разряда, инициируемого в азоте пучком электронов лавин, *Квантовая электроника*, том **45**, 366, 2015.
- [11] Д.В. Рыбка, А.Г. Бураченко, В.Ю. Кожевников, А.В. Козырев, В.Ф. Тарасенко, Влияние давления азота на характеристики рентгеновского излучения при переходе от диффузного к коронному разряду, *Оптика атмосферы и океана*, том **27**, 311, 2014.
- [12] V.F. Tarasenko, On the generation mechanism of supershort avalanche electron beams during a nanosecond discharge in high-pressure gases, *Atmospheric and Oceanic Optics*, vol. **23**, 60, 2010.
- [13] Э.А. Соснин, В.Ф. Тарасенко, А.И. Кирдяшкин, В.Г. Саламатов, Ю.М. Максимов, Р.М. Габбасов, Рентгеновское излучение в процессах самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, *Физика горения и взрыва*, том **44**, 127, 2008.
- [14] А.Н. Панченко, В.Ф. Тарасенко, А.Е. Тельминов, Рентгеновское излучение из разрядника с лазерным запуском, *Известия вузов. Физика*, том **51**, 106, 2008.
- [15] E.A. Mareev, Y.V. Shlyugaev, M.V. Shatalina, F.G. Sarafanov, V.V. Bogomolov, A.F. Iyudin, S.I. Svertilov, I.V. Yashin, X-Ray and gamma radiation of lightning discharge: orbital observations and laboratory simulation in experiments with long sparks, *Astronomičeskij žurnal*, vol. **100**, 119, 2023, doi: 10.31857/S0004629923010061
- [16] N. Jacquinet-Husson, R. Armante, N.A. Scott, et al., The 2015 edition of the GEISA spectroscopic database, *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. **327**, 31, 2016, doi: 10.1016/j.jms.2016.06.007.

-
- [17] С.Н. Михайленко, Ю.Л. Бабилов, В.Ф. Головкин, Информационно-вычислительная система “Спектроскопия атмосферных газов”. Структура и основные функции, *Оптика атмосферы и океана*, том. **18**, 765, 2005.
- [18] B.A. Voronin, M.V. Makarova, A.V. Poberovskii, A.D. Bykov, E.A. Dudnikova, J. Tennyson, The absorption spectrum of short-lived isotopic variant of water, $H_2^{15}O$: Tentative detection at the Earth's atmosphere, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. **276**, 107929, 2021, doi: 10.1016/j.jqsrt.2021.107929
- [19] B.A. Voronin, J. Tennyson, S.N. Yurchenko, T.Yu. Chesnokova, A.V. Chentsov, A.D. Bykov, M.V. Makarova, S.S. Voronina, F.C. Cruz, The infrared absorption spectrum of radioactive water isotopologue $H_2^{15}O$, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, vol. **311**, 124007, 2024, doi: 10.1016/j.saa.2024.124007
- [20] B.A. Voronin, J. Tennyson, T.Yu. Chesnokova, A.V. Chentsov, A.D. Bykov, The absorption spectrum of the $H_2^{14}O$ radioactive isotopologue of water vapour, *Molecular Physics*, vol. **122**, 2024, doi: 10.1080/00268976.2024.2333474
- [21] B.A. Voronin, J. Tennyson, T.Yu. Chesnokova, A.V. Chentsov, A.D. Bykov, The spectrum of radioactive water vapor: the $H_2^{19}O$ radioisotopologue, *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 2024, doi: 10.1007/s10967-024-09677-2 [принята в печать]
- [22] B.A. Voronin, A.D. Bykov, Calculation of vibrational levels of H_2^XO (where $X = 11, \dots, 26$), *Proceedings of SPIE*, vol. 11916, AOO21-AOO203-152, 2021, doi: 10.1117/12.2603166
- [23] J. Tennyson, M.A. Kostin, P. Barletta, G.J. Harris, O.L. Polyansky, J. Ramanlal, N.F. Zobov, DVR3D: a program suite for the calculation of rotation–vibration spectra of triatomic molecules, *Computer Phys. Comm.*, vol. **163**, 85, 2004.
- [24] I.I. Bubukina, N.F. Zobov, O.L. Polyansky, S.V. Shirin, S.N. Yurchenko, Optimized semiempirical potential energy surface for $H_2^{16}O$ up to 26000 cm^{-1} , *Opt. Spectrosc.*, vol. **110**, 160, 2011, doi: 10.1134/S0030400X11020032
- [25] L. Lodi, J. Tennyson, O.L. Polyansky, A global, high accuracy ab initio dipole moment surface for the electronic ground state of the water molecule, *J. Chem. Phys.* vol. **135**, 034113, 2011, doi: 10.1063/1.3604934
- [26] S.Ch. Foka, M.V. Makarova, A.V. Poberovsky, D.V. Ionov, E.V. Abakumov, Analysis of Mixing Ratios of Greenhouse Carbon-Containing Gases at the Atmospheric Monitoring Station of St. Petersburg State University, *Atmospheric and Oceanic Optics*, vol. **37**, 74, 2024, doi: 10.15372/AOO20231109
- [27] A.V. Poberovskii, High-Resolution Ground Measurements of the IR Spectra of Solar Radiation, *Atmospheric and Oceanic Optics*, vol. **23**, 161, 2010.