

01

## Спектр изотополога $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$ в области $1.86\ \mu\text{m}$ . Определение постоянных „типа Данхэма“

© Ю.Г. Борков, О.Н. Сулакшина, В.И. Сердюков, Л.Н. Синица

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения РАН,  
634055 Томск, Россия

e-mail: geo@iao.ru

Поступила в редакцию 07.02.2024 г.

В окончательной редакции 07.02.2024 г.

Принята к публикации 24.02.2024 г.

Впервые с помощью фурье-спектрометра Bruker IFS-125M со спектральным разрешением  $0.0056\ \text{cm}^{-1}$  зарегистрирован спектр молекулы  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  в области  $5200\text{--}5500\ \text{cm}^{-1}$ . Анализ спектра позволил обнаружить колебательно-вращательные линии полосы 3-0 основных переходов в электронном состоянии  $X^2\Pi$  молекулы  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$ . Для основных переходов  $^2\Pi_{1/2} - ^2\Pi_{1/2}$  и  $^2\Pi_{3/2} - ^2\Pi_{3/2}$  зарегистрировано 149 положений вращательных линий в трех ветвях, с максимальным значением вращательного квантового числа  $J = 29.5$ . Впервые удалось определить параметры  $\Lambda$ -расщепления в данной полосе. Определены положения и относительные интенсивности как отдельных компонент  $\Lambda$ -дублетов, так и центров 31 неразрешенного дублета. Проведена совместная взвешенная обработка частот переходов в колебательной полосе 1-0 и частот зарегистрированных переходов по двум моделям. В результате обработок определены спектроскопические параметры для колебательных состояний  $v = 0, 1, 3$ , а также постоянные „типа Данхэма“ для изотополога  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$ . С найденными постоянными „типа Данхэма“ выполнены модельные расчеты частот переходов в колебательных полосах 1-0, 2-0, 3-0 до  $J = 35.5$ . Проведено сравнение рассчитанных частот переходов с приведенными в проекте ExoMol.

**Ключевые слова:** изотополог  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$ , зарегистрированный спектр, колебательная полоса 3-0, спектроскопические параметры, постоянные „типа Данхэма“.

DOI: 10.61011/OS.2024.02.57769.6002-23

Молекула монооксида азота  $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$  представляет собой двухатомный стабильный радикал, спектр которого является предметом многочисленных исследований в инфракрасной и микроволновой областях. Интерес к этой молекуле обусловлен ее химической активностью, которая проявляется в атмосферной химии, процессах горения, а также физиологических и патологических процессах, протекающих в живых организмах. Присутствует монооксид азота в атмосфере Земли и других планет.

Основное электронное состояние молекулы NO представляет собой дублет  $^2\Pi$ , состоящий из двух компонент  $^2\Pi_{1/2}$  и  $^2\Pi_{3/2}$ , имеющих полный электронный момент относительно межъядерной оси, обозначаемый  $\Omega$ ,  $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$  и равный 1/2 и 3/2 соответственно. Расщепление дублета на две компоненты происходит за счет спин-орбитального взаимодействия. Каждая компонента дублета, в свою очередь, остается дважды вырожденной по знаку  $\Lambda$  (проекции орбитального углового момента на межъядерную ось молекулы), так называемое  $\Lambda$ -удвоение. Колебательно-вращательный спектр молекулы в этом случае состоит как бы из двух: спектра для состояния  $^2\Pi_{1/2}$  и спектра для состояния  $^2\Pi_{3/2}$ . При этом кроме переходов  $^2\Pi_{1/2} \rightarrow ^2\Pi_{1/2}$ ,  $^2\Pi_{3/2} \rightarrow ^2\Pi_{3/2}$  внутри состояний, называемых основными полосами, наблюдаются переходы между компонентами  $^2\Pi_{1/2} \leftrightarrow ^2\Pi_{3/2}$ , которые называют сателлитными полосами.

Настоящая работа является продолжением исследований спектра монооксида азота и его изотопологов [1–4]. Обзор литературы по экспериментальным исследованиям инфракрасных спектров изотопологов монооксида азота можно найти в работах [1,2,5–8]. Исследования спектров изотопологов весьма скудные, а для изотополога  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  известна только одна работа в области  $5.4\ \mu\text{m}$  [5]. В этой работе спектр основной полосы (1-0) данного изотополога был зарегистрирован на фурье-спектрометре с разрешением  $2.7 \cdot 10^{-3}\ \text{cm}^{-1}$  при давлении 1.35 Torr. Авторам удалось разрешить  $\Lambda$ -дублеты и определить спектроскопические постоянные для колебательных состояний  $v = 0, 1$ . В известной базе спектроскопической информации HITRAN для молекулы NO представлены данные только по трем изотопологам  $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ ,  $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$  и  $^{14}\text{N}^{18}\text{O}$  с природным содержанием 0.993974, 0.003654 и 0.001093 соответственно. Рассчитанные данные по параметрам спектральных линий для изотополога  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  можно найти только в проекте ExoMol [6], где авторы приводят список линий „NOname“, представляющий наиболее обширные вариационные расчеты для шести изотопологов этой молекулы. Для расчета энергетических уровней в проекте используется комбинация двух методов: метода эффективных гамильтонианов и вариационного метода.

Целью настоящей работы является определение параметров типа Данхэма для изотополога  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  с исполь-

зованием новых экспериментальных данных в области  $1.86\ \mu\text{m}$  и применение их для моделирования спектра этой молекулы.

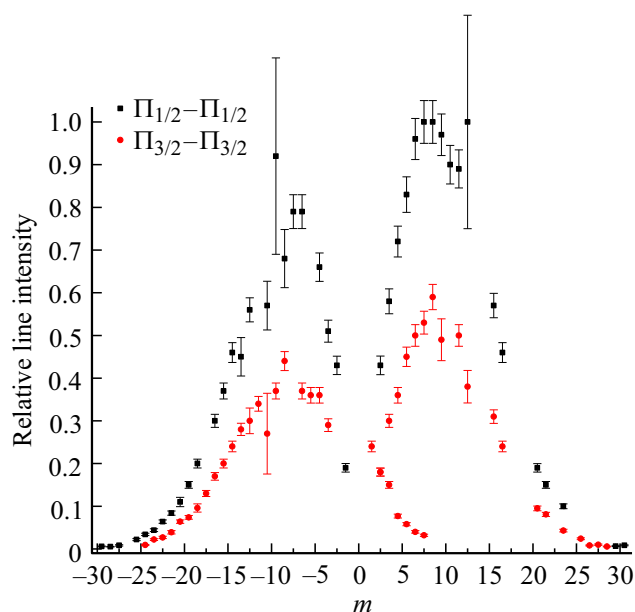
## Эксперимент

Для исследования спектра монооксида азота была выбрана смесь от компании IZOTOP, представленная двумя изотопологами: 80%  $^{15}\text{N}^{18}\text{O}$  и 20%  $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ . В результате изотопного обмена в такой смеси образуются все шесть изотопологов монооксида азота. Спектр поглощения оксида азота регистрировался в диапазоне  $4000\text{--}7000\ \text{cm}^{-1}$  с помощью фурье-спектрометра Bruker IFS-125M со спектральным разрешением  $0.0056\ \text{cm}^{-1}$ . Для достижения полного оптического пути в  $2400\ \text{cm}$  использовалась многоходовая кювета длиной  $60\ \text{cm}$ . Спектрометр был снабжен галогенной лампой в качестве источника света, германиевым фотодетектором и светоделителем из  $\text{CaF}_2$ . Давление образца измерялось датчиком АИР-20/М2-Н с погрешностью  $0.03\ \text{mbar}$ . К усредненной интерферограмме применялся метод фазовой коррекции Мерца с разрешением по фазе  $1\ \text{cm}^{-1}$ . Использовалась треугольная аподизация. Термостабилизация помещения позволяла вести длительную запись. Отношение сигнал/шум в зарегистрированных спектрах составляет около 650 для сильных линий. Спектр поглощения смеси закиси азота регистрировали при температуре  $297 \pm 1\ \text{K}$  и давлении газа  $16\ \text{mbar}$ . Калибровка спектра осуществлялась по линиям водяного пара, присутствующего в смеси в качестве примеси. Погрешность калибровки составила  $0.0014\ \text{cm}^{-1}$ .

## Методы и результаты

### Определение параметров спектральных линий

Зарегистрированный спектр анализировался в области  $5200\text{--}5500\ \text{cm}^{-1}$ , где были впервые обнаружены колебательно-вращательные линии полосы 3-0 основных переходов между электронными состояниями  $^2\Pi_{1/2}$  и  $^2\Pi_{3/2}$  молекулы  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$ . Идентификация линий данной полосы проводилась на основе рассчитанных данных, представленных в проекте ExoMol [6]. Для определения параметров линий использовалась программа MultiFit [9] с моделью Фойгта для контура линии. Для молекулы  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  всего было зарегистрировано 149 положений вращательных линий в трех ветвях основных подполос  $^2\Pi_{1/2}\text{--}^2\Pi_{1/2}$  и  $^2\Pi_{3/2}\text{--}^2\Pi_{3/2}$ . Максимальное значение вращательного квантового числа  $J$  составило 29.5. Все  $\Lambda$ -дублеты в зарегистрированном спектре не были спектрально разрешены. Для большинства из них в случае, когда расщепление было больше  $4.5 \cdot 10^{-3}\ \text{cm}^{-1}$ , удалось получить положения и относительные интенсивности каждой компоненты дублета, при этом параметр самоуширения фиксировался значением из HITRAN [8] для основного изотополога, а интенсивности компонент



**Рис. 1.** Зависимость экспериментальных относительных интенсивностей линий от вращательного квантового числа  $m$ . Параметр  $m$  принимает значения  $-J$ ,  $J$  и  $J+1$  для  $P$ -,  $Q$ - и  $R$ -ветвей соответственно.

„e“ и „f“ считались равными. Число оставшихся неразрешенных  $\Lambda$ -дублетов составило 31 и для них были найдены положения центра и суммарная интенсивность дублета. Сдвигом положения линии давлением мы пренебрегали, учитывая малость полного давления смеси. Таким образом, в результате анализа были определены положения (частоты переходов  $\nu_{\text{obs}}$ ) 149 спектральных линий и их относительные интенсивности для молекулы  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  (табл. П1). В таблице частоты переходов приведены в единицах  $\text{cm}^{-1}$ , поскольку в спектроскопии широко используется волновое число энергетического уровня  $\tilde{E} = E/hc$  ( $\text{cm}^{-1}$ ). В этой же таблице представлены наши оценки погрешности для положений линий  $\Delta\nu_{\text{obs}}$  и относительных интенсивностей  $\Delta I_{\text{obs}}$ . Абсолютные интенсивности не определялись, поскольку не известно значение парциального давления рассматриваемого изотополога. Распределение относительных интенсивностей линий по ветвям в наблюдаемом спектре иллюстрирует рис. 1.

### Определение спектроскопических параметров колебательного состояния $v = 3$ и параметров „типа Данхэма“

В лаборатории теоретической спектроскопии ИОА СО РАН создана программа, позволяющая на основе моделей эффективных гамильтонианов для различных электронных состояний стабильных двухатомных радикалов [1] выполнять обработку экспериментальных уровней энергий, а также частот переходов отдельных колебательных полос или системы полос. В результате такой обработки определяются спектроскопические па-

**Таблица 1.** Спектроскопические параметры для колебательных состояний  $v = 0, 1, 2, 3$  в молекуле  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  ( $\text{cm}^{-1}$ )

| Параметр         | Состояние $v = 0$                          | Состояние $v = 1$                         | Состояние $v = 3$ | Состояние $v = 2$<br>Расчет <sup>в</sup> |
|------------------|--|---|-------------------|--|
| $T$              | 58.3952739<br><i>0</i>                     | 1875.177691(16)<br><i>1816.766455(88)</i> | 5429.81843(17)    | 3665.6519                                |
| $A$              | 123.13744 <sup>а</sup><br><i>123.13744</i> | 122.901029(24)<br><i>122.90102(14)</i>    | 122.39989(29)     | 122.6549                                 |
| $A_d \cdot 10^4$ | 1.624(10) <sup>б</sup><br><i>1.496(26)</i> | 1.550(9)<br><i>1.453(26)</i>              | 1.369(13)         | 1.460                                    |
| $B$              | 1.58950546(78)<br><i>1.5895337(24)</i>     | 1.57357029(78)<br><i>1.5735982(52)</i>    | 1.5416150(12)     | 1.55761                                  |
| $D \cdot 10^6$   | 4.7984(27)<br><i>4.785(18)</i>             | 4.8139(22)<br><i>4.804(14)</i>            | 4.8432(25)        | 4.8299                                   |
| $p \cdot 10^3$   | 10.59(2)<br><i>10.52(11)</i>               | 10.58(2)<br><i>10.51(12)</i>              | 10.564(26)        | 10.570                                   |
| $q \cdot 10^6$   | 83.465 <sup>а</sup><br><i>83.465</i>       | 81.09(30)<br><i>1.1(16)</i>               | 79.84(98)         | 80.92                                    |
| $q_d \cdot 10^8$ |  |   |                   | -1.595                                   |

Примечание. Курсивом выделены спектроскопические постоянные из работы [5].

<sup>а</sup> Эффективные постоянные  $A$  и  $q$  для основного состояния фиксировались значениями, взятыми из [5].

<sup>б</sup> Параметр  $\gamma$  фиксировался нулем, поскольку  $A_d$  и  $\gamma$  зависимы.

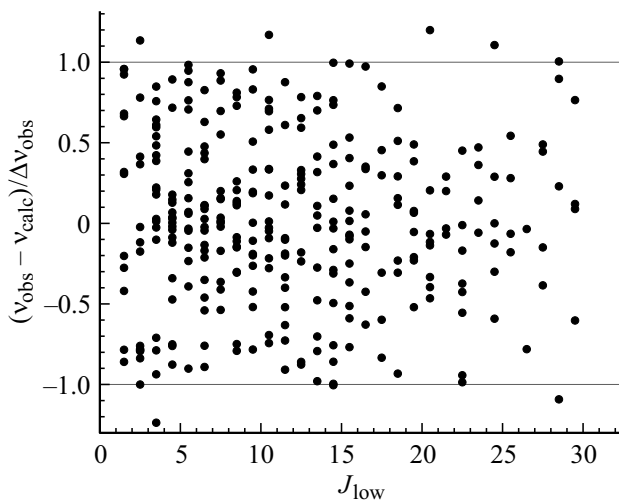
<sup>в</sup> Расчет авторов выполнен из найденных молекулярных постоянных „типа Данхэма“.

параметры колебательных состояний либо молекулярные постоянные „типа Данхэма“ для отдельных электронных состояний рассматриваемой молекулы. Найденные таким образом молекулярные постоянные „типа Данхэма“ позволяют проводить моделирование спектров радикалов в диапазонах, экспериментально недоступных на сегодняшний день. В основу программы положен эффективный гамильтониан Брауна [10], описывающий спин-орбитальное и спин-вращательное взаимодействия.

Для моделирования значений уровней энергии изотополога  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  использовались экспериментальные значения частот переходов в колебательной полосе 1-0 [5] и новые экспериментальные данные по частотам переходов в полосе 3-0. Для обработки данных был составлен файл, состоящий из 306 частот переходов. В него вошли 126 значений частот переходов из колебательной полосы 1-0 [5], 118 значений частот переходов для разрешенных  $\Lambda$ -дублетов и удвоенные значения частот неразрешенных дублетов из полосы 3-0. Все включенные в файл данные, взвешенные в соответствии с экспериментальными погрешностями, были обработаны программным кодом, использующим нелинейный метод наименьших квадратов. Экспериментальная погрешность частот переходов в полосе 1-0 изменялась в пределах  $(0.1-1) \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ . Оцененная нами экспериментальная погрешность для частот разрешенных  $\Lambda$ -дублетов в полосе 3-0 варьировала в пределах  $(0.15-2) \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ , а для частот неразрешенных дублетов была равна  $4 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ . Волновые числа колебательно-вращательных уровней энергии для электронного состояния  $^2\Pi$  находились путем диаго-

нализации матрицы эффективного гамильтониана для нижнего и верхнего колебательных состояний. Сначала созданный файл частот переходов был использован для нахождения спектроскопических параметров колебательных состояний  $v = 0, 1, 3$ . Данная обработка со стандартным отклонением 0.57 позволила определить 18 спектроскопических параметров для указанных трех состояний. Найденные значения параметров и их сравнение с известными в литературе приведено в табл. 1.

Как видно из табл. 1, полученные спектроскопические параметры для  $v = 0, 1$  хорошо согласуются с приведенными в [5]. Для колебательного параметра  $T$  наблюдается отличие, связанное с выбором значения нижнего уровня энергии, от которого ведется отчет. Отсутствие данных по частотам спутанных переходов не позволило нам, как и авторам работы [5], определить параметр спин-орбитального взаимодействия  $A$  для данного изотополога. Поэтому данный параметр фиксировался значением, взятым из работы [5], где он был пересчитан на основе изотопических соотношений из значения для основного изотополога. То же самое было выполнено и для параметра спин-вращательного взаимодействия  $q$ . Его значение было фиксировано и пересчитано из значения для основного изотополога [5]. Найденные спектроскопические параметры восстанавливают имеющиеся экспериментальные данные в пределах указанной экспериментальной точности, но не позволяют проводить предсказательные расчеты в недоступных для эксперимента интервалах. Для такого моделирования необходимы молекулярные постоянные „типа Данхэма“, когда спектроскопические параметры



**Рис. 2.** Зависимость относительных отклонений  $(v_{\text{obs}} - v_{\text{calc}})/\Delta v_{\text{obs}}$  для частот переходов от вращательного квантового числа нижнего колебательного состояния  $J_{\text{low}}$ .

эффективного гамильтониана представляют в виде ряда по колебательному квантовому числу  $(v + 1/2)$ :

$$P_V = \sum_{i=0} Y_i (v + 1/2)^i,$$

где коэффициенты „типа Данхэма“  $Y_i$  определяются для каждого параметра  $P_V$ , а  $i$  определяет степень полинома. Поэтому составленный файл экспериментальных частот был обработан также по модели, использующей молекулярные постоянные „типа Данхэма“. В результате этой обработки со стандартным отклонением 0.55 были определены 16 молекулярных постоянных „типа Данхэма“ для изотополога  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$ . Найденные постоянные и их сравнение с опубликованными в [5] приведено в табл. 2. Следует заметить, что значения постоянных „типа Данхэма“ из табл. 2 хорошо согласуются между собой. Значение равновесной постоянной спин-орбитального взаимодействия  $A_e$  фиксировалось значением для основного изотополога [5]. Равновесное значение постоянной  $\Lambda$ -удвоения  $q_e$  было также фиксировано и пересчитано по изотопическим соотношениям из значения для основного изотополога [2].

Качество обработки демонстрирует рис. 2, на котором представлена зависимость относительных отклонений для частот переходов  $(v_{\text{obs}} - v_{\text{calc}})/\Delta v_{\text{obs}}$  от вращательного квантового числа  $J$  нижнего колебательного состояния  $J_{\text{low}}$ . Из рис. 2 видно, что относительное отклонение рассчитанных частот переходов превышает единицу только для шести линий из колебательной полосы 3-0, и это говорит о том, что найденные постоянные „типа Данхэма“ восстанавливают экспериментальные данные в пределах экспериментальной точности. Найденные молекулярные постоянные „типа Данхэма“ позволили провести модельные интерполяционные расчеты уровней энергий в колебательном состоянии  $v = 2$  и со-

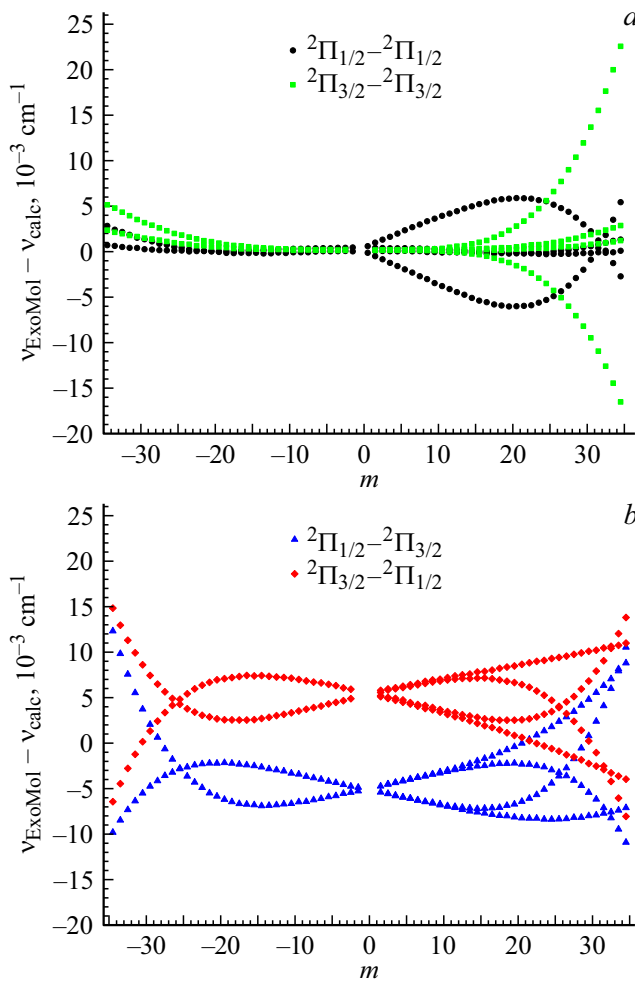
**Таблица 2.** Молекулярные постоянные „типа Данхэма“ ( $\text{cm}^{-1}$ ) для  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$   $0 \leq v \leq 3$

| Параметр            | 1  | $(v + 1/2)$   | $(v + 1/2)^2$   |
|---------------------|--|---|---|
| $G_V$               | -859.8615538                                       | 1843.090487(55)   | -13.154034(26)  |
| $A_V$               | 123.25191 <sup>a</sup>                             | -0.22692(11)<br>-0.22748(59)<br>-0.22654(61)*                                     | $-4.749(49) \cdot 10^{-3}$<br>$-4.749(49) \cdot 10^{-3}$<br>$-4.79(23) \cdot 10^{-3}$ |
| $A_{VD} \cdot 10^5$ | 16.48(11)  | -0.627(44)  | -0.050(16)  |
| $B_V$               | 1.59746256(75)<br>1.5974790(101)<br>1.5974795(84)* | -0.01590712(27)<br>-0.0158992(117)<br>-0.158991(135)*                             | $-1.403(13) \cdot 10^{-5}$<br>$-1.83 \cdot 10^{-5}$<br>$-1.83(44) \cdot 10^{-5}$      |
| $D_V \cdot 10^6$    | 4.7917(25)<br>4.7755(90)<br>4.7954(88)*            | $1.527(47) \cdot 10^{-2}$<br>$1.90(78) \cdot 10^{-2}$<br>$1.39(75) \cdot 10^{-2}$ |   |
| $p_V \cdot 10^2$    | 1.0597(21)   | -0.00105(17)  |   |
| $q_V \cdot 10^5$    | 8.384 <sup>b</sup>                                 | -0.117(28)  |   |
| $q_{VD} \cdot 10^8$ | -1.59(42)  |   |   |

*Примечание.* Курсивом выделены значения постоянных, найденные в работе [5], звездочкой (\*) отмечены значения из этой же работы, рассчитанные по изотопическим соотношениям. Равновесная постоянная  $A_e$  спин-орбитального взаимодействия фиксировалась значением для основного изотополога [5]. Равновесное значение постоянной  $q_e$  было фиксировано и пересчитано по изотопическим соотношениям из значения для основного изотополога [2].

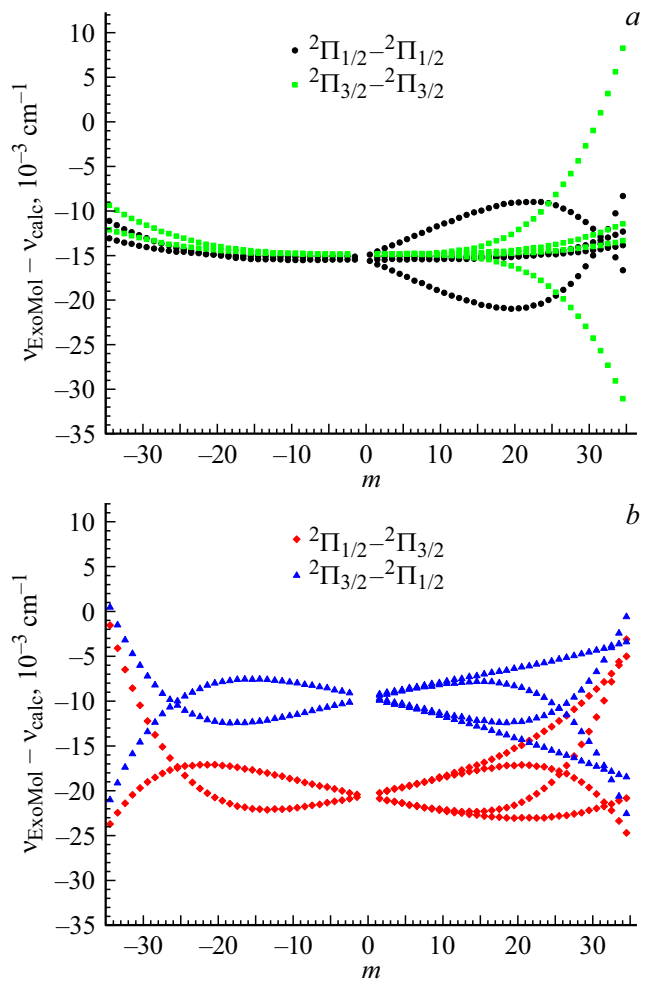
<sup>a, b</sup> Смотри примечания к табл. 1.

ответственно рассчитать частоты переходов в колебательной полосе 2-0 для электронных состояний  $^2\Pi_{1/2}$  и  $^2\Pi_{3/2}$  с учетом  $\Lambda$ -удвоения для изотополога  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$ . С найденными постоянными „типа Данхэма“ нами были также рассчитаны и спектроскопические параметры для колебательного состояния  $v = 2$ . Эти данные помещены в табл. 1. На рис. 3 и 4 показано сравнение рассчитанных значений частот переходов, полученных в данной работе, со значениями из проекта ECHOmol [6] для колебательной полосы 3-0 и для предсказанной с помощью найденных постоянных „типа Данхэма“ полосы 2-0. Сравнительный расчет приведен до  $J = 35.5$ , что на пять единиц превышает значение вращательного квантового числа последнего наблюдаемого энергетического уровня. Различия между двумя расчетами для основных переходов (рис. 3, a) в полосе 3-0, превышающие экспериментальные погрешности, наблюдаются только для частот переходов в  $Q$ -ветви и становятся существенными для переходов с  $J \geq 28.5$ . Для спутанных переходов в этой же полосе (рис. 3, b) кроме отклонений в  $Q$ -ветви наблюдается систематический сдвиг положений линий на величину  $\sim 0.005\ \text{cm}^{-1}$ . Этот сдвиг объясняется различием в значениях постоянных спин-орбитального взаимодействия  $A_e$ , используемых в данной работе и в проекте ECHOmol [6]. Отклонения в  $Q$ -ветви как для основных, так и спутанных переходов связаны с точностью определения постоянных спин-вращательного взаимодействия  $p_V$  и  $q_V$ . Для более точного определе-



**Рис. 3.** Отклонения рассчитанных в данной работе значений частот переходов в колебательной полосе 3-0 от приведенных в [6]; параметр  $m$  принимает значения  $-J, J$  и  $J+1$  для  $P$ -,  $Q$ - и  $R$ -ветвей соответственно:  $a$  — для основных полос  ${}^2\Pi_{1/2} \rightarrow {}^2\Pi_{1/2}$ ,  ${}^2\Pi_{3/2} \rightarrow {}^2\Pi_{3/2}$ ;  $b$  — для спутных полос  ${}^2\Pi_{1/2} \rightarrow {}^2\Pi_{3/2}$ ,  ${}^2\Pi_{3/2} \rightarrow {}^2\Pi_{1/2}$ .

ния этих постоянных недостаточно экспериментальных данных по частотам разрешенных  $\Lambda$ -дублетов в  $Q$ -ветви, где  $\Lambda$ -удвоение проявляется наиболее наглядно. В проекте ExoMol [6] для расчета  $\Lambda$ -удвоения в частотах переходов различных изотопологов используются изотопонезависимые постоянные „типа Данхэма“, которые определяются на основе известных экспериментальных данных по  $\Lambda$ -расщеплению для основного изотополога. Для молекулы  ${}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$  спин-вращательное расщепление наблюдалось только в  $Q$ -ветви колебательной полосы 3-0 ( $J_{\max} = 2.5$ ) [11], а также в ветвях  $P$  и  $R$  полосы 3-1 основных переходов до  $J_{\max} = 16.5$  [12]. Такой экспериментальной информации явно недостаточно для точного определения параметров спин-вращательного взаимодействия в колебательной полосе 3-0. На рис. 4 показано сравнение наших предсказательных расчетов частот переходов в полосе 2-0, выполненных с использованием найденных постоянных „типа Данхэма“, с



**Рис. 4.** Отклонения рассчитанных в данной работе значений частот переходов в колебательной полосе 2-0 от приведенных в [6]; параметр  $m$  принимает значения  $-J, J$  и  $J+1$  для  $P$ -,  $Q$ - и  $R$ -ветвей соответственно:  $a$  — для основных полос  ${}^2\Pi_{1/2} \rightarrow {}^2\Pi_{1/2}$ ,  ${}^2\Pi_{3/2} \rightarrow {}^2\Pi_{3/2}$ ;  $b$  — для спутных полос  ${}^2\Pi_{1/2} \rightarrow {}^2\Pi_{3/2}$ ,  ${}^2\Pi_{3/2} \rightarrow {}^2\Pi_{1/2}$ .

расчетами из проекта ExoMol [6]. Для расчетов в этой колебательной полосе характерны те же самые различия, что и для полосы 3-0, т.е. отличия, возникающие за счет использования разных значений постоянной спин-орбитального взаимодействия, и отличия, связанные с недостаточной точностью определения параметров спин-вращательного взаимодействия. Следует отметить, что для предсказанной полосы 2-0 (рис. 4,  $a, b$ ) наблюдается также систематический сдвиг в  $0.015 \text{ cm}^{-1}$ , который определяется точностью параметра  $G_V$  для данной полосы.

## Заключение

В настоящей работе впервые зарегистрирован спектр молекулы  ${}^{15}\text{N}^{17}\text{O}$  в области  $5200\text{--}5500 \text{ cm}^{-1}$  и проведен его анализ. В результате анализа обнаружено

149 колебательно-вращательных линий, представляющих  $\Lambda$ -дублеты в полосе 3-0 основных переходов между электронными состояниями  $^2\Pi_{1/2}$  и  $^2\Pi_{3/2}$  с максимальным значением вращательного квантового числа  $J = 29.5$ . Впервые удалось определить параметры  $\Lambda$ -расщепления в данной полосе. Определены положения и относительные интенсивности как отдельных компонент  $\Lambda$ -дублетов, так и центров 31 неразрешенного дублета. Все значения представлены в табл. П1 (Приложение). Проведена совместная взвешенная обработка частот переходов в колебательной полосе 1-0 [5] и частот зарегистрированных переходов по двум моделям. В результате определены спектроскопические параметры для колебательных состояний  $v = 0, 1, 3$ , а также

постоянные „типа Данхэма“ для изотополога  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$ . С найденными постоянными „типа Данхэма“ выполнены модельные расчеты частот переходов в колебательных полосах 1-0, 2-0, 3-0 до  $J = 35.5$ . Проведено сравнение рассчитанных частот переходов с приведенными в проекте Exomol [6].

### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Института оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Приложение

Таблица П1. Параметры линий полосы 3-0 молекулы  $^{15}\text{N}^{17}\text{O}$

| Идентификация |       |                  | $\nu_{\text{obs}}, \text{cm}^{-1}$ |           |                                     | $\nu_{\text{obs}} - \nu_{\text{calc}}, 10^{-3} \text{cm}^{-1}$ |       | Относительная $I_{\text{obs}}$ |                             |
|---------------|-------|------------------|------------------------------------|-----------|-------------------------------------|--|-------|--------------------------------|-----------------------------|
| $\Omega$      | Ветвь | $J_{\text{low}}$ | $e$                                | $f$       | $\Delta\nu_{\text{obs}} \cdot 10^3$ | $e$  | $f$   | $e/f^a$                        | $\Delta I_{\text{obs}}, \%$ |
| 1/2           | P     | 1.5              | 5366.9992                          | 5366.9896 | 4.0                                 | 2.70   | 3.81  | 1.9E-01                        | 5.3                         |
| 1/2           | P     | 2.5              | 5363.7185                          | 5363.7101 | 1.5                                 | -1.15  | 1.20  | 4.3E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | P     | 3.5              | 5360.3497                          | 5360.3390 | 1.5                                 | 0.34   | 0.33  | 5.1E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | P     | 4.5              | 5356.8859                          | 5356.8748 | 1.5                                 | 0.31   | -0.23 | 6.6E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | P     | 6.5              | 5349.6779                          | 5349.6671 | 1.5                                 | 0.21   | -0.24 | 7.9E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | P     | 7.5              | 5345.9338                          | 5345.9233 | 1.5                                 | 0.22   | -0.04 | 7.9E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | P     | 8.5              | 5342.0963                          | 5342.0863 | 2.0*                                | 0.42   | 0.50  | 6.8E-01                        | 10.0                        |
| 1/2           | P     | 9.5              | 5338.1657                          | 5338.1544 | 2.0*                                | 1.04   | -0.39 | 9.2E-01                        | 25.0                        |
| 1/2           | P     | 10.5             | 5334.1411                          | 5334.1326 | 2.0*                                | 1.23   | 2.31  | 5.7E-01                        | 10.0                        |
| 1/2           | P     | 12.5             | 5325.8101                          | 5325.8009 | 1.5                                 | 0.41   | 0.33  | 5.6E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | P     | 13.5             | 5321.5042                          | 5321.4955 | 2.0*                                | -0.12  | 0.14  | 4.5E-01                        | 10.0                        |
| 1/2           | P     | 14.5             | 5317.1054                          | 5317.0962 | 1.5                                 | 0.15   | -0.45 | 4.6E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | P     | 15.5             | 5312.6125                          | 5312.6039 | 1.5                                 | 0.03   | -0.38 | 3.7E-01                        | 5.1                         |
| 1/2           | P     | 16.5             | 5308.0261                          | 5308.0181 | 1.5                                 | -0.12  | -0.21 | 3.0E-01                        | 5.1                         |
| 1/2           | P     | 18.5             | 5298.5730                          | 5298.5653 | 1.5                                 | 0.17   | -0.28 | 2.0E-01                        | 5.2                         |
| 1/2           | P     | 19.5             | 5293.7056                          | 5293.6986 | 1.5                                 | -0.06  | -0.26 | 1.5E-01                        | 5.3                         |
| 1/2           | P     | 20.5             | 5288.7449                          | 5288.7391 | 2.0*                                | -0.08  | 0.40  | 1.1E-01                        | 5.6                         |
| 1/2           | P     | 21.5             | 5283.6908                          | 5283.6848 | 1.5                                 | -0.02  | -0.13 | 8.4E-02                        | 5.9                         |
| 1/2           | P     | 22.5             | 5278.5429                          | 5278.5376 | 1.5                                 | -0.25  | 0.00  | 6.4E-02                        | 6.3                         |
| 1/2           | P     | 23.5             | 5273.3019                          | 5273.2974 | 1.5                                 | -0.06  | 0.51  | 4.4E-02                        | 7.2                         |
| 1/2           | P     | 24.5             | 5267.9672                          | 5267.9631 | 1.5                                 | -0.17  | 0.41  | 3.4E-02                        | 7.9                         |
| 1/2           | P     | 25.5             | 5262.5393                          | 5262.5359 | 1.5                                 | -0.11  | 0.82  | 2.2E-02                        | 11.2                        |
| 1/2           | P     | 27.5             | 5251.4019                          |           | 4.0                                 | -1.52  | 1.98  | 8.4E-03                        | 19.4                        |
| 1/2           | P     | 28.5             | 5245.6965                          |           | 4.0                                 | 0.88   | 3.98  | 5.3E-03                        | 14.8                        |
| 1/2           | P     | 29.5             | 5239.8949                          |           | 4.0                                 | 0.35   | 3.05  | 5.9E-03                        | 14.5                        |
| 1/2           | R     | 1.5              | 5379.1580                          | 5379.1689 | 1.5                                 | -0.55  | -0.27 | 4.3E-01                        | 5.1                         |
| 1/2           | R     | 2.5              | 5381.9678                          | 5381.9785 | 1.5                                 | -0.26  | 0.03  | 5.8E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 3.5              | 5384.6839                          | 5384.6945 | 1.5                                 | 0.01   | 0.25  | 7.2E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 4.5              | 5387.3055                          | 5387.3151 | 1.5                                 | -0.54  | -1.06 | 8.3E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 5.5              | 5389.8343                          | 5389.8449 | 1.5                                 | -0.07  | 0.53  | 9.6E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 6.5              | 5392.2686                          | 5392.2788 | 1.5                                 | -0.32  | 0.05  | 1.0E+00                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 7.5              | 5394.6091                          | 5394.6191 | 1.5                                 | -0.32  | 0.00  | 1.0E+00                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 8.5              | 5396.8553                          | 5396.8651 | 1.5                                 | -0.46  | -0.19 | 9.7E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 9.5              | 5399.0082                          | 5399.0173 | 1.5                                 | 0.25   | 0.03  | 9.0E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 10.5             | 5401.0656                          | 5401.0749 | 1.5                                 | -0.06  | 0.02  | 8.9E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 11.5             | 5403.0278                          | 5403.0381 | 1.5                                 | -1.10  | 0.18  | 1.0E+00                        | 5.0                         |

Таблица П1. Продолжение

| Идентификация |       |                  | $\nu_{\text{obs}}, \text{cm}^{-1}$ |           |                                     | $\nu_{\text{obs}} - \nu_{\text{calc}}, 10^{-3} \text{cm}^{-1}$ |       | Относительная $I_{\text{obs}}$ |                             |
|---------------|-------|------------------|------------------------------------|-----------|-------------------------------------|--|-------|--------------------------------|-----------------------------|
| $\Omega$      | Ветвь | $J_{\text{low}}$ | $e$                                | $f$       | $\Delta\nu_{\text{obs}} \cdot 10^3$ | $e$  | $f$   | $e/f^a$                        | $\Delta I_{\text{obs}}, \%$ |
| 1/2           | R     | 14.5             | 5408.3495                          | 5408.3581 | 1.5                                 | -0.04  | 0.04  | 5.7E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 15.5             | 5409.9327                          | 5409.9411 | 1.5                                 | -0.08  | -0.13 | 4.6E-01                        | 5.0                         |
| 1/2           | R     | 19.5             | 5415.3093                          | 5415.3168 | 1.5                                 | 0.11   | -0.32 | 1.9E-01                        | 5.2                         |
| 1/2           | R     | 20.5             | 5416.4129                          | 5416.4207 | 1.5                                 | -0.23  | -0.24 | 1.5E-01                        | 5.3                         |
| 1/2           | R     | 22.5             | 5418.3304                          | 5418.3382 | 1.5                                 | -0.59  | -0.61 | 1.0E-01                        | 5.7                         |
| 1/2           | R     | 28.5             | 5421.7545                          | 5421.7544 | 4.0                                 | 3.63   | -4.36 | 6.6E-03                        | 14.1                        |
| 1/2           | R     | 29.5             | 5421.9758                          | 5421.9864 | 4.0                                 | -2.40  | 0.24  | 8.6E-03                        | 13.1                        |
| 3/2           | P     | 3.5              | 5359.3888                          |           | 4.0                                 | -0.02  | 0.08  | 2.9E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | P     | 4.5              | 5355.8260                          |           | 4.0                                 | 0.00   | 0.30  | 3.6E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | P     | 5.5              | 5352.1663                          |           | 4.0                                 | 0.21   | 0.61  | 3.6E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | P     | 6.5              | 5348.4092                          |           | 4.0                                 | -0.10  | 0.50  | 3.7E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | P     | 8.5              | 5340.6057                          |           | 4.0                                 | -0.37  | 0.53  | 4.4E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | P     | 9.5              | 5336.5598                          |           | 4.0                                 | -0.39  | 0.71  | 3.7E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | P     | 10.5             | 5332.4183                          |           | 4.0*                                | -0.07  | 1.33  | 2.7E-01                        | 35.1                        |
| 3/2           | P     | 11.5             | 5328.1801                          |           | 4.0                                 | -0.80  | 0.90  | 3.4E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | P     | 12.5             | 5323.8472                          |           | 4.0*                                | -0.72  | 1.28  | 3.0E-01                        | 10.1                        |
| 3/2           | P     | 13.5             | 5319.4186                          |           | 4.0                                 | -1.06  | 1.34  | 2.8E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | P     | 14.5             | 5314.8952                          |           | 4.0                                 | -1.19  | 1.51  | 2.4E-01                        | 5.2                         |
| 3/2           | P     | 15.5             | 5310.2769                          |           | 4.0                                 | -1.46  | 1.64  | 2.0E-01                        | 5.2                         |
| 3/2           | P     | 16.5             | 5305.5678                          | 5305.5627 | 2.2                                 | 2.13   | 0.48  | 1.7E-01                        | 5.3                         |
| 3/2           | P     | 17.5             | 5300.7592                          | 5300.7542 | 1.5                                 | 0.73   | -0.49 | 1.3E-01                        | 5.4                         |
| 3/2           | P     | 18.5             | 5295.8573                          | 5295.8533 | 1.5*                                | 0.15   | 0.37  | 9.6E-02                        | 10.7                        |
| 3/2           | P     | 19.5             | 5290.8624                          | 5290.8571 | 1.5                                 | 0.71   | 0.07  | 7.4E-02                        | 6.1                         |
| 3/2           | P     | 20.5             | 5285.7741                          | 5285.7665 | 1.5                                 | 1.78   | -0.68 | 6.4E-02                        | 6.3                         |
| 3/2           | P     | 21.5             | 5280.5895                          | 5280.5841 | 1.5*                                | 0.29   | 0.39  | 3.9E-02                        | 10.5                        |
| 3/2           | P     | 22.5             | 5275.3111                          | 5275.3026 | 1.5*                                | -1.40  | -3.90 | 2.7E-02                        | 10.7                        |
| 3/2           | P     | 23.5             | 5269.9431                          | 5269.9362 | 1.5                                 | 0.69   | 0.20  | 2.2E-02                        | 9.5                         |
| 3/2           | P     | 24.5             | 5264.4775                          | 5264.4749 | 2.5                                 | -1.47  | 2.77  | 9.2E-03                        | 12.9                        |
| 3/2           | Q     | 1.5              | 5370.9071                          |           | 4.0                                 | 0.02   | 0.12  | 2.4E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | Q     | 2.5              | 5370.6621                          |           | 4.0                                 | 0.25   | 0.45  | 1.8E-01                        | 5.3                         |
| 3/2           | Q     | 3.5              | 5370.3193                          |           | 4.0                                 | 0.50   | 1.00  | 1.5E-01                        | 5.3                         |
| 3/2           | Q     | 4.5              | 5369.8774                          |           | 4.0                                 | -0.43  | 0.57  | 7.7E-02                        | 6.0                         |
| 3/2           | Q     | 5.5              | 5369.3382                          |           | 4.0                                 | -0.64  | 0.96  | 5.8E-02                        | 6.5                         |
| 3/2           | Q     | 6.5              | 5368.7012                          |           | 4.0                                 | -0.83  | 1.67  | 4.0E-02                        | 7.4                         |
| 3/2           | Q     | 7.5              | 5367.9675                          | 5367.9639 | 1.5                                 | -0.04  | 0.18  | 3.2E-02                        | 8.1                         |
| 3/2           | R     | 1.5              | 5378.7149                          |           | 4.0                                 | 0.35   | 0.25  | 1.8E-01                        | 5.2                         |
| 3/2           | R     | 2.5              | 5381.5918                          |           | 4.0                                 | 0.20   | 0.10  | 3.0E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | R     | 3.5              | 5384.3700                          |           | 4.0                                 | 0.15   | -0.05 | 3.6E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | R     | 4.5              | 5387.0494                          |           | 4.0                                 | 0.13   | -0.17 | 4.5E-01                        | 5.0                         |
| 3/2           | R     | 5.5              | 5389.6298                          |           | 4.0                                 | 0.27   | -0.13 | 5.0E-01                        | 5.0                         |
| 3/2           | R     | 6.5              | 5392.1109                          |           | 4.0                                 | 0.41   | -0.19 | 5.3E-01                        | 5.0                         |
| 3/2           | R     | 7.5              | 5394.4930                          |           | 4.0                                 | 0.85   | 0.15  | 5.9E-01                        | 5.0                         |
| 3/2           | R     | 8.5              | 5396.7748                          |           | 4.0*                                | 0.36   | -0.34 | 4.9E-01                        | 10.0                        |
| 3/2           | R     | 10.5             | 5401.0404                          |           | 4.0                                 | 0.75   | -0.35 | 5.0E-01                        | 5.0                         |
| 3/2           | R     | 11.5             | 5403.0223                          |           | 4.0*                                | -0.43  | -1.63 | 3.8E-01                        | 10.1                        |
| 3/2           | R     | 14.5             | 5408.3704                          | 5408.3742 | 1.5                                 | -1.45  | 0.71  | 3.1E-01                        | 5.1                         |
| 3/2           | R     | 15.5             | 5409.9539                          | 5409.9568 | 1.5                                 | -0.94  | 0.29  | 2.4E-01                        | 5.2                         |
| 3/2           | R     | 19.5             | 5415.2841                          | 5415.2847 | 1.5                                 | 0.58   | -0.77 | 9.5E-02                        | 5.7                         |
| 3/2           | R     | 20.5             | 5416.3642                          | 5416.3661 | 1.5                                 | -0.52  | -0.57 | 8.1E-02                        | 5.9                         |
| 3/2           | R     | 22.5             | 5418.2261                          | 5418.2266 | 1.5                                 | 0.74   | -0.83 | 4.3E-02                        | 7.2                         |
| 3/2           | R     | 24.5             | 5419.6831                          | 5419.6855 | 1.5                                 | -0.51  | -0.04 | 2.4E-02                        | 9.1                         |
| 3/2           | R     | 25.5             | 5420.2619                          | 5420.2631 | 1.5                                 | 0.36   | -0.33 | 8.2E-03                        | 13.3                        |
| 3/2           | R     | 26.5             | 5420.7370                          | 5420.7403 | 2.0*                                | -1.60  | -0.15 | 1.0E-02                        | 15.5                        |
| 3/2           | R     | 27.5             | 5421.1145                          | 5421.1171 | 1.5                                 | -0.19  | 0.68  | 5.6E-03                        | 14.6                        |

Примечание. \* Перекрывающиеся линии.

<sup>a</sup> Для расщепленных дублетов приведена интенсивность одной компоненты (интенсивности компонент „e“ и „f“ равны), а для не расщепленных дублетов приведена половина интенсивности дублета.

## Список литературы

- [1] O.N. Sulakshina, Yu.G. Borkov. *JQSRT*, **209**, 171 (2018). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.01.020
- [2] O.N. Sulakshina, Yu.G. Borkov. *Mol. Phys.*, **116**, 3519 (2018). DOI: 10.1080/00268976.2018.1468043
- [3] Ю.Г. Борков, О.Н. Сулакшина, В.И. Сердюков, Л.Н. Снина. *Оптика атмосферы и океана*, **36** (4), 251 (2023). DOI: 10.15372/AOO20230401  
[Yu.G. Borkov, O.N. Sulakshina, V.I. Serdyukov, L.N. Sinitsa. *Atmospheric and Oceanic Optics*, **36** (5), 427 (2023). DOI: 10.1134/S1024856023050081].
- [4] Ю.Г. Борков, О.Н. Сулакшина, В.И. Сердюков, Л.Н. Снина. *Оптика атмосферы и океана*, **36** (10), 799 (2023). DOI: 10.15372/AOO20231002].
- [5] C. Amiot, G. Guelachvili. *J. Mol. Spectrosc.*, **76**, 86 (1979). DOI: 10.1016/0022-2852(79)90219-4
- [6] A. Wong, S.N. Yurchenko, P. Bernath, S. Holder, P. Muller, S. McConkey, J. Tennyson. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, **470**, 882 (2017). DOI: 10.1093/mnras/stx1211
- [7] R.J. Hargreaves, I.E. Gordon, L.S. Rothman, S.A. Tashkun, V.I. Perevalov, A.A. Lukashetskaya, S.N. Yurchenko, J. Tennyson, H.S.P. Müller. *JQSRT*, **232**, 35 (2019). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.04.040
- [8] I.E. Gordon, L.S. Rothman, R.J. Hargreaves, R. Hashemi, E.V. Karlovets, F.M. Skinner, E.K. Conway, C. Hill, R.V. Kochanov, Y. Tan, P. Weislo, A.A. Finenko, K. Nelson, P.F. Bernath, M. Birk, V. Boudon, A. Campargue, K.V. Chance, A. Coustenis, B.J. Drouin, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, J.T. Hodges, D. Jacquemart, E.J. Mlawer, A.V. Nikitin, V.I. Perevalov, M. Rotger, J. Tennyson, G.C. Toon, H. Tran, V.G. Tyuterev, E.M.M. Adkins, A. Baker, A. Barbe, E. Cane, A.G. Csaszar, A. Dudaryonok, O. Egorov, A.J. Fleisher, H. Fleurbaey, A. Foltynowicz, T. Furtenbacher, J.J. Harrison, J.-M. Hartmann, V.-M. Horneman, X. Huang, T. Karman, J. Karns, S. Kassi, I. Kleiner, V. Kofman, F. Kwabia-Tchana, N.N. Lavrentieva, T.J. Lee, D.A. Long, A.A. Lukashetskaya, O.M. Lyulin, V.Yu. Makhnev, W. Matt, S.T. Massie, M. Melosso, S.N. Mikhailenko, D. Mondelain, Z.D. Reed, M. Rey, C. Richard, R. Tobias, I. Sadiek, D.W. Schwenke, E. Starikova, K. Sung, F. Tamassia, S.A. Tashkun, J. Vander Auwera, I.A. Vasilenko, A.A. Viganin, G.L. Villanueva, B. Vispoel, G. Wagner, A. Yachmenev, S.N. Yurchenko. *JQSRT*, **277**, 107949 (2022). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949
- [9] О.М. Люлин. *Оптика атмосферы и океана*, **28** (5), 408 (2015). DOI: 10.15372/AOO20150504
- [10] J.M. Brown, E.A. Colbourn, J.K.G. Watson, F.D. Wayne. *J. Mol. Spectrosc.*, **74**, 294 (1979). DOI: 10.1016/0022-2852(79)90059-6
- [11] A. Henry, M.F. Le Moal, Ph. Cardinet, A. Valentin. *J. Mol. Spectrosc.*, **70**, 18 (1978). DOI: 10.1016/0022-2852(78)90004-8
- [12] J-Y. Mandin, V. Dana, L. Regalia, A. Barbe, P. Von der Heyden. *J. Mol. Spectrosc.*, **187**, 200 (1998). DOI: 10.1006/jmsp.1997.7492