

Спектр изотополога $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ в области 5200–5550 см^{-1} . Спектроскопические параметры для состояния $v = 3$

Ю.Г. Борков, О.Н. Сулакшина[✉], В.И. Сердюков, Л.Н. Сеница*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 27.03.2024;
после доработки 27.04.2024;
принята к печати 21.05.2024

Впервые с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS-125M с разрешением $0,0056 \text{ см}^{-1}$ зарегистрирован спектр молекулы $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ в области 5200–5550 см^{-1} . Анализ спектра позволил обнаружить 83 колебательно-вращательные линии полосы 3–0 для основных переходов в электронном состоянии $X^2\Pi$ молекулы $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$. Для 29 Λ -дублетов определены положения и относительные интенсивности каждой из компонент. Найдены параметры Λ -удвоения. Для оставшихся неразрешенных 25 дублетов также определены положения и относительные интенсивности центра дублета. Максимальное значение вращательного квантового числа J равно 24,5. Найденные экспериментальные положения линий в полосе 3–0 подтвердили корректность рассчитанных положений линий, приведенных в базе данных ExoMol. Проведена обработка частот зарегистрированных переходов, взвешенных в соответствии с экспериментальными погрешностями, и определены спектроскопические постоянные для колебательного состояния $v = 3$. С найденными постоянными выполнены предсказательные расчеты волновых чисел вращательных уровней колебательного состояния $v = 3$ до $J = 30,5$ и частот переходов в колебательной полосе 3–0 для электронных состояний $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$. Расчеты показали согласие с данными, приведенными в базе данных ExoMol, в пределах указанной погрешности.

Ключевые слова: изотополог $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$, зарегистрированный спектр, колебательная полоса 3–0, спектроскопические постоянные; $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ isotopologue, experimental spectrum, vibration band 3–0, transition frequency, relative intensity, spectroscopic constant.

Введение

Настоящая работа является продолжением серии исследований спектра монооксида азота и его изотопологов [1–4]. Моноокись азота — двухатомный радикал, структура энергетического спектра которого отличается от спектра обычной двухатомной молекулы. Основное электронное состояние молекулы NO представляет собой дублет $^2\Pi$, который за счет взаимодействия спина неспаренного электрона и орбитального момента электронов разделяется на нижнее $X^2\Pi_{1/2}$ и верхнее $X^2\Pi_{3/2}$ состояния. Расстояние между компонентами дублета составляет примерно 123 см^{-1} . Учет взаимодействия между электронным состоянием и вращением приводит к расщеплению каждого вращательного уровня на два близких уровня — так называемое Λ -удвоение. Поэтому в спектре молекулы NO можно наблюдать переходы как внутри каждой из компонент

дублета $^2\Pi_{1/2}$ или $^2\Pi_{3/2}$, так и между ними, а также Λ -удвоение и эффекты сверхтонкого расщепления, возникающие за счет взаимодействия спина ядра с электронным орбитальным и спиновым моментами.

Являясь химически активной молекулой, моноокись азота играет важную роль в химии атмосферы [5], в механизмах генерации и деструкции озона [6]. NO продуцируется в организме животных и человека, имеет отношение почти ко всем метаболическим и физиологическим процессам [7]. Молекула NO также участвует в процессах горения, присутствует она и в спектре излучения ночных атмосфер планет [8–10], и в межзвездном пространстве [11]. В свою очередь, исследование спектров этой молекулы дает информацию о динамических процессах, происходящих на внутри- и межмолекулярном уровне.

Обзор литературы по экспериментальным исследованиям инфракрасных спектров изотопологов монооксида азота можно найти в работах [1–4, 12–15]. Молекула $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ — один из редких изотопологов монооксида азота, его природное содержание составляет примерно 0,038%. Информация о его спектрах отсутствует в известной базе HITRAN [15]. Впервые

* Юрий Геннадьевич Борков (geo@iao.ru); Ольга Николаевна Сулакшина (son@iao.ru); Виктор Иванович Сердюков (svi@iao.ru); Леонид Никифорович Сеница (sln@iao.ru).

три спектральные линии основной полосы этого изотополога были зарегистрированы методом лазерного магнитного резонанса в работе [16]. Затем 98 линий в спектре основной полосы были зарегистрированы на Фурье-спектрометре с разрешением $2,5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ при давлении от 0,05 до 5 торр [17]. Авторам [17] удалось разрешить Λ -дублеты и определить спектроскопические постоянные для колебательных состояний $v = 0$ и 1. Характерная сложная сверхтонкая структура вращательного спектра основного состояния этой молекулы наблюдалась в работе [18], где были определены спектроскопические постоянные этого состояния. Рассчитанные данные по параметрам спектральных линий для изотополога $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ можно найти только в базе данных ExoMol [13], где авторы приводят список линий «NOname», представляющий наиболее обширные вариационные расчеты для шести изотопологов монооксида азота. Для расчета энергетических уровней в проекте используется комбинация двух методов: эффективных гамильтонианов и вариационного.

Цель работы — получение новых экспериментальных данных по параметрам спектральных линий молекулы $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ в области $5200\text{--}5550 \text{ см}^{-1}$ и определение на этой основе спектроскопических постоянных для колебательного состояния $v = 3$.

Эксперимент

Для исследования спектра изотопологов монооксида азота была выбрана смесь от компании IZOTOP из двух изотопологов: 80% $^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ и 20% $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$. В результате изотопного обмена образовалась смесь из оксидов азота, в которой представлены все шесть стабильных изотопологов монооксида азота. Спектр поглощения оксида азота регистрировался в диапазоне $4000\text{--}7000 \text{ см}^{-1}$ с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS-125M с многоходовой кюветой длиной 60 см. Спектрометр был снабжен галогенной лампой в качестве источника света, германиевым фотодетектором и светоделителем из CaF_2 . Условия эксперимента приведены в табл. 1. Частотная шкала Фурье-спектрометра калибровалась по положениям 84 линий H_2^{16}O , присутствующего в смеси в качестве примеси, в области $4000\text{--}6000 \text{ см}^{-1}$ с интенсивностями более $3 \cdot 10^{-25} \text{ см}^2/\text{молек.}$ Положения центров линий воды взяты из HITRAN [15]. Точность калибровки составила $0,0014 \text{ см}^{-1}$.

Таблица 1

Условия эксперимента

Параметр	Значение
Разрешение, см^{-1}	0,0056
Оптический путь, см	2400
Давление, мбар	$16 \pm 0,03$
Температура, К	297 ± 1
Сигнал/шум	650

Методы и результаты

Определение параметров спектральных линий

Анализ экспериментального спектра проводился в диапазоне $5200\text{--}5550 \text{ см}^{-1}$. В данной области впервые наблюдались колебательно-вращательные линии основных переходов между электронными состояниями $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$ полосы $3\text{--}0$ для двухатомного радикала $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$. Идентификация линий проводилась на основе предсказанных значений из базы данных ExoMol [13]. Для определения параметров линий использовалась программа MultiFit [19] с моделью Фойгта для контура линии. Были зарегистрированы 83 вращательные линии основных подполос $^2\Pi_{1/2} - ^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2} - ^2\Pi_{3/2}$ с максимальным значением вращательного квантового числа $J = 24,5$. Все Λ -дублеты не были спектрально разрешены, однако для 29 из них, когда величина расщепления была больше $4,5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$, удалось определить положения и относительные интенсивности каждой компоненты дублета. В этом случае коэффициент самоуширения фиксировался значением, взятым из HITRAN для основного изотополога, а интенсивности e - и f -компонент считались равными. На рис. 1 приведен пример экспериментального и рассчитанного спектров в районе линии $P 17,5$ основного перехода $^2\Pi_{1/2} - ^2\Pi_{1/2}$. На рисунке также отмечены неидентифицированные линии, предположительно одного из оксидов азота. Для оставшихся неразрешенных 25 Λ -дублетов были найдены положения центра и суммарная относительная интенсивность дублета.

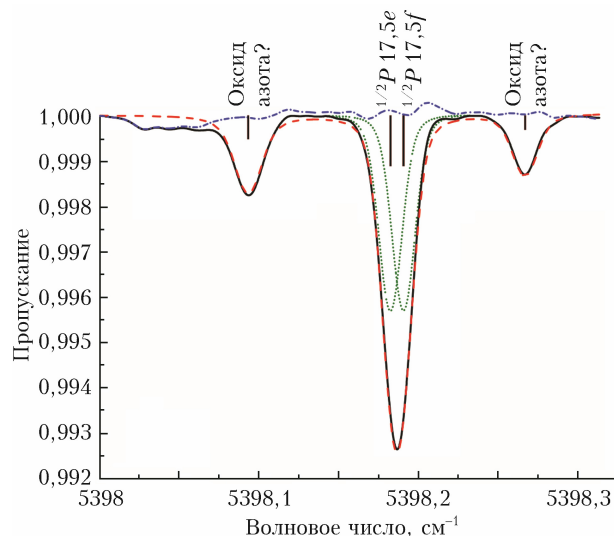


Рис. 1. Экспериментальный (сплошная кривая) и рассчитанный (штриховая кривая) спектры в районе линии $P 17,5$ основного перехода $^2\Pi_{1/2} - ^2\Pi_{1/2}$; рассчитанное пропускание отдельных компонент дублета (пунктирная кривая) и отношение экспериментального и рассчитанного спектра (штрихпунктирная кривая). Вертикальные отрезки — центры обрабатываемых линий (см. цветные рис. 1–5 на сайте <http://iao.ru/ru/content/vol.37-2024/iss.07>)

Учитывая малость полного давления смеси, мы пренебрегали сдвигом положения линии давлением. Абсолютные интенсивности не определялись, поскольку отсутствовала информация о значении парциального давления рассматриваемого изотополога. Таким образом, в результате анализа были определены положения и относительные интенсивности 83 спектральных линий для молекулы $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ (Приложение, табл. П1). В табл. П1 также представлены наши оценки погрешности как для положений линий, так и для их относительных интенсивностей. Экспериментальные величины Λ -расщепления для зарегистрированных линий в сравнении с расчетами из базы данных ExoMol [13] приведены на рис. 2. Видно, что эти данные согласуются между собой в пределах экспериментальной погрешности, показанной вертикальными отрезками. Распределение относительных интенсивностей линий по ветвям полосы спектра представлено на рис. 3.

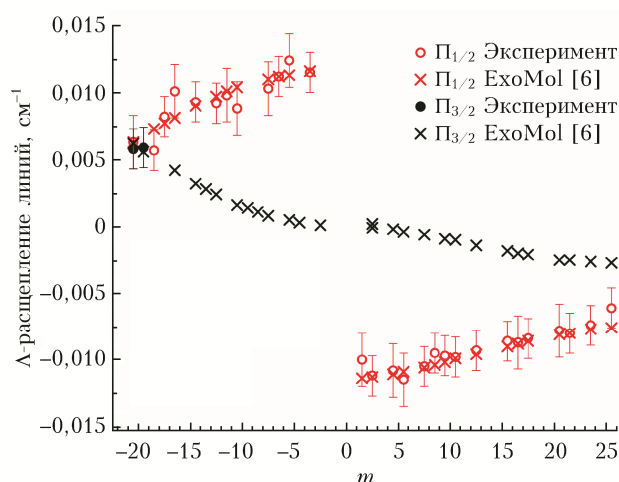


Рис. 2. Экспериментально полученные величины Λ -расщепления с погрешностью в виде вертикальных отрезков и их рассчитанные значения из [13]; m — $-J$, J , $J+1$ для P -, Q - и R -ветвей соответственно

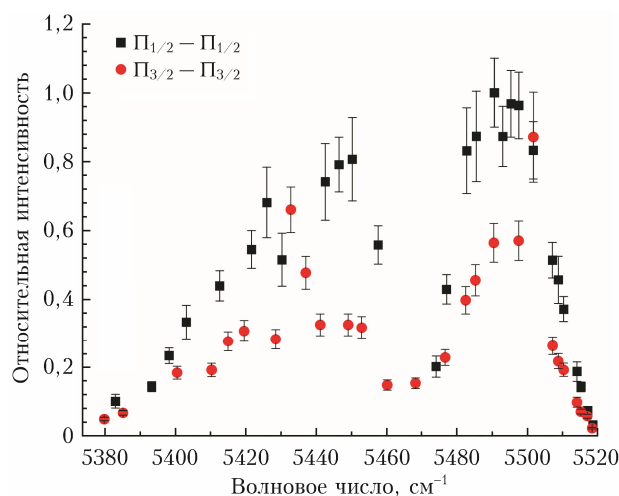


Рис. 3. Зависимость экспериментальных относительных интенсивностей линий от волнового числа; погрешности показаны вертикальными отрезками

Определение спектроскопических постоянных колебательного состояния $v = 3$

Для моделирования значений уровней энергии двухатомных стабильных радикалов в состоянии $^2\Pi$ был выбран эффективный гамильтониан Брауна [20], учитывающий спин-орбитальное и спин-вращательное взаимодействия. Эффективные спектроскопические параметры гамильтониана определялись в результате подгонки рассчитанных значений частот переходов к их экспериментальным значениям. Значения колебательно-вращательных уровней энергии для электронного состояния $^2\Pi$ находились путем диагонализации матрицы эффективного гамильтониана для нижнего и верхнего состояний. Для расчета был составлен список из 108 частот переходов, включающий 58 частот переходов отдельных компонент Λ -дублетов и удвоенные частоты 25 неразрешенных Λ -дублетов (Приложение, табл. П1). Эти данные, взвешенные в соответствии с экспериментальными погрешностями, обрабатывались программным кодом [2], основанным на нелинейном методе наименьших квадратов. При обработке спектра среднее квадратичное отклонение для положений центров линий оказалось меньше, чем $0,001 \text{ cm}^{-1}$, тогда основной вклад в погрешность для разрешенных дублетов вносит точность калибровки. Поэтому данная погрешность оценена в пределах $0,0015$ – $0,002 \text{ cm}^{-1}$. Для неразрешенных дублетов погрешность $0,004 \text{ cm}^{-1}$ выбрана исходя из минимальной величины определенного в работе Λ -расщепления.

Спектроскопические постоянные для основного колебательного состояния $v = 0$ были взяты из работы [18]. В табл. 2 для сравнения мы привели спектроскопические постоянные для основного состояния, взятые из работ [17, 18]. Следует заметить, что приведенные значения хорошо согласуются между собой. Постоянная спин-орбитального взаимодействия A фиксировалась значением, рассчитанным по изотопическим соотношениям из значения для основного изотополога [21]. Стандартное отклонение взвешенной обработки составило 0,35.

Таблица 2
Спектроскопические параметры для колебательных состояний $v = 0$ и 3 в молекуле $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$, cm^{-1}

Параметр	$v = 0$		$v = 3$
	[17]	[18]	Данная работа
T	59,9247 ^a	58,277385 ^a	5527,34879(18)
A	123,13527*	123,14065619*	122,38843(31)
$A_d \cdot 10^4$	1,63(18)	1,7347(6)	1,467(11)
B	1,649507(30)	1,64945413(9)	1,5988231(13)
$D \cdot 10^6$	5,20 (13)	5,1509(77)	5,2092(20)
$p \cdot 10^3$	10,76(40)	11,3669(13)	11,313(16)
$q \cdot 10^6$	89,90 ^a	88,63(80)	83,9(16)

^a Значение параметра получено из условия равенства нулю энергии нижнего энергетического уровня с квантовыми числами $\Omega = 1/2$, $J = 0,5$ симметрии «e».

* Значение фиксировано.

В результате обработки были определены семь спектроскопических постоянных для состояния $v = 3$ изотополога $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$. Все значения параметров для колебательного состояния $v = 3$ изотополога $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ получены впервые (табл. 2).

На рис. 4 представлена зависимость относительных отклонений рассчитанных частот переходов $((v_{\text{эксп}} - v_{\text{расч}})/\Delta v_{\text{эксп}})$ от вращательного квантового числа нижнего колебательного состояния ($J_{\text{ниж}}$). Видно, что все относительные отклонения рассчитанных частот переходов не превышают единицу, т.е. найденные спектроскопические постоянные восстанавливают экспериментальные данные в пределах экспериментальной точности. С помощью полученных постоянных нами выполнен предсказательный расчет вращательных уровней энергии колебательного состояния $v = 3$ (Приложение, табл. П2) и частот переходов в полосе 3–0 до $J = 30,5$. Для вычисленных значений частот переходов проведено сравнение с расчетами [13] (рис. 5).

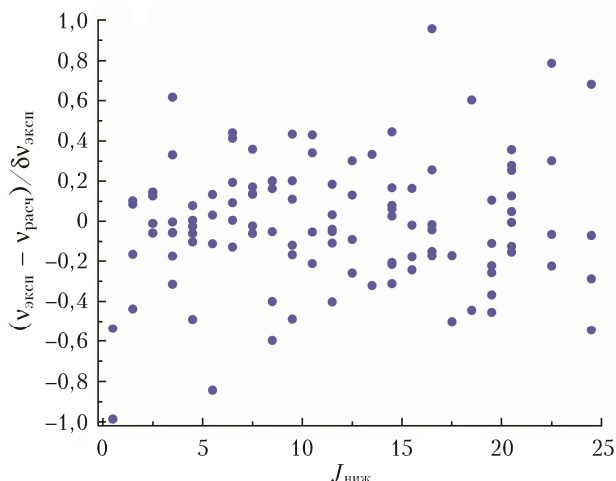


Рис. 4. Зависимость относительных отклонений рассчитанных частот переходов $\Delta v_{\text{эксп}}$ от вращательного квантового числа нижнего колебательного состояния

Различия между двумя расчетами, выполненными в пределах экспериментальной точности, не превышают экспериментальные погрешности, а для экстраполированных значений частот переходов они достигают $0,008 \text{ см}^{-1}$. Расчет частот переходов выполнен до $J = 30,5$, что на шесть больше максимального значения квантового числа для измеренных частот переходов.

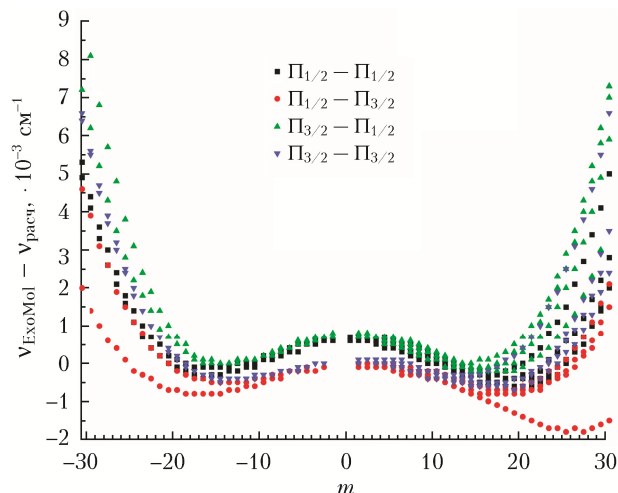


Рис. 5. Отклонения рассчитанных в данной работе значений частот переходов в полосе 3–0 для основных и спутных переходов от приведенных в базе данных ExoMol [13]

Заключение

Впервые зарегистрирован и проанализирован спектр молекулы $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$ в области $5200\text{--}5550 \text{ см}^{-1}$. В результате обнаружены 83 вращательные линии полос 3–0 для основных переходов между электронными состояниями $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$. Для 29 Λ -дублетов определены положения и относительные интенсивности каждой из компонент. Впервые экспериментально установлены величины Λ -расщепления. Для 25 неразрешенных дублетов определены положения и относительные интенсивности центра дублета. Максимальное значение вращательного квантового числа J составило 24,5. Экспериментальные значения положений линий полосы 3–0 изотополога $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$, полученные в настоящей работе, подтвердили корректность таковых в базе данных ExoMol. Проведена взвешенная обработка частот зарегистрированных переходов, в результате которой впервые определены спектроскопические постоянные для колебательного состояния $v = 3$ изотополога $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$. Выполнены предсказательные расчеты вращательных уровней энергии колебательного состояния $v = 3$ до $J = 30,5$ и частот переходов в колебательной полосе 3–0 для электронных состояний $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$, которые согласуются с данными из базы данных ExoMol.

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

Приложение

Таблица П1

Параметры линий полосы 3–0 молекулы $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$

Идентификация			$v_{\text{эксп}}, \text{ см}^{-1}$			$v_{\text{эксп}} - v_{\text{расч}}, 10^{-3} \text{ см}^{-1}$		Относительная $I_{\text{эксп}}$	
Ω	Ветвь	$J_{\text{ниж}}$	e	f	$\Delta \cdot 10^3$	e	F	e/f^b	$\Delta, \%$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1/2	<i>P</i>	3,5	5457,5717	5457,5602	1,5	0,93	0,50	0,56	10
1/2	<i>P</i>	5,5	5450,2741*	5450,2617*	2	–0,22	–1,69	0,81	15
1/2	<i>P</i>	6,5	5446,4786	5446,4674	1,5	0,66	0,29	0,79	10
1/2	<i>P</i>	7,5	5442,5827*	5442,5724*	2	–0,05	0,34	0,74	15

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1/2	P	10,5	5430,3036*	5430,2948*	2	-0,42	0,86	0,52	15
1/2	P	11,5	5426,0132*	5426,0034*	2	-0,10	-0,08	0,68	15
1/2	P	12,5	5421,6235	5421,6143	1,5	-0,14	0,20	0,54	10
1/2	P	14,5	5412,5475	5412,5382	1,5	0,12	-0,31	0,44	10
1/2	P	17,5	5398,1903	5398,1821	1,5	-0,26	-0,75	0,23	10
1/2	P	18,5	5393,2063	5393,2006	1,5	-0,67	0,91	0,14	10
1/2	P	20,5	5382,9434*	5382,9371*	2	0,51	0,56	0,10	20
1/2	R	0,5	5474,0720*	5474,0820*	2	-1,07	-1,97	0,20	15
1/2	R	1,5	5477,0789	5477,0901	1,5	-0,66	-0,25	0,43	10
1/2	R	3,5	5482,7954*	5482,8062*	2	-0,63	-0,35	0,83	15
1/2	R	4,5	5485,5049*	5485,5164*	2	-0,98	0,15	0,87	15
1/2	R	6,5	5490,6285	5490,6390	1,5	0,14	0,62	1,00	10
1/2	R	7,5	5493,0413	5493,0508	1,5	0,54	0,21	0,87	10
1/2	R	8,5	5495,3540	5495,3637	1,5	0,24	0,30	0,97	10
1/2	R	9,5	5497,5675	5497,5773	1,5	0,30	0,65	0,96	10
1/2	R	11,5	5501,6948	5501,7041	1,5	0,05	0,28	0,83	10
1/2	R	14,5	5507,1350	5507,1436	1,5	0,04	0,09	0,51	10
1/2	R	15,5	5508,7469*	5508,7556*	2	-0,35	-0,04	0,46	15
1/2	R	16,5	5510,2584	5510,2668	1,5	-0,23	-0,06	0,37	10
1/2	R	19,5	5514,1845*	5514,1923*	2	-0,44	-0,51	0,19	15
1/2	R	20,5	5515,2901	5515,2981	1,5	-0,23	-0,01	0,14	10
1/2	R	22,5	5517,1945	5517,2019	1,5	-0,10	-0,33	0,07	10
1/2	R	24,5	5518,6896	5518,6957	1,5	1,02	-0,43	0,03	10
3/2	P	2,5	5460,1799		4	0,50	0,58	0,15	10
3/2	P	4,5	5452,8703		4	-0,25	0,02	0,32	10
3/2	P	5,5	5449,0621		4	0,12	0,53	0,33	10
3/2	P	7,5	5441,1376		4	-0,25	0,54	0,33	10
3/2	P	8,5	5437,0226		4	-0,21	0,80	0,48	10
3/2	P	9,5	5432,8042		4	-1,95	-0,67	0,66	10
3/2	P	10,5	5428,4879		4	-0,21	1,36	0,28	10
3/2	P	12,5	5419,5479		4	-1,04	1,21	0,31	10
3/2	P	13,5	5414,9270		4	-1,29	1,34	0,28	10
3/2	P	14,5	5410,2060		4	-1,24	1,78	0,19	10
3/2	P	16,5	5400,4648*		4	-0,07	3,83	0,18	10
3/2	P	19,5	5385,1036	5385,0977	1,5	-0,17	-0,68	0,07	10
3/2	P	20,5	5379,7849	5379,7791	1,5	0,07	0,19	0,05	10
3/2	Q	2,5	5468,2805		4	-0,24	-0,04	0,15	10
3/2	R	1,5	5476,6418		4	0,41	0,34	0,23	10
3/2	R	3,5	5482,4972		4	-0,01	-0,23	0,40	10
3/2	R	4,5	5485,2680		4	-0,10	-0,41	0,46	10
3/2	R	6,5	5490,4950		4	0,02	-0,51	0,56	10
3/2	R	9,5	5497,5463		4	0,44	-0,48	0,57	10
3/2	R	11,5	5501,7183*		4	-0,44	-1,61	0,87	15
3/2	R	14,5	5507,1852		4	0,66	-0,86	0,26	10
3/2	R	15,5	5508,7952		4	0,65	-0,97	0,22	10
3/2	R	16,5	5510,2995		4	1,02	-0,69	0,19	10
3/2	R	19,5	5514,1736*		4	0,42	-1,47	0,10	15
3/2	R	20,5	5515,2536		4	1,42	-0,50	0,07	10
3/2	R	22,5	5517,0941*		4	3,15	1,21	0,06	15
3/2	R	24,5	5518,5034		4	-0,28	-2,18	0,02	10

Δ — погрешность измеренного параметра.

^a Для неразрешенных дублетов приведена половина интенсивности дублета.

* Перекрывающиеся линии.

Рассчитанные уровни энергии $E_{\text{расч}}$ (см⁻¹) для колебательных состояний $v = 0$ и 3 в электронных состояниях $^2\Pi_{1/2}$ ($\Omega = 1/2$) и $^2\Pi_{3/2}$ ($\Omega = 3/2$) молекулы $^{14}\text{N}^{17}\text{O}$

J	$v = 0$				$v = 3$			
	$\Omega = 1/2$		$\Omega = 3/2$		$\Omega = 1/2$		$\Omega = 3/2$	
	e	f	e	f	e	f	e	f
0,5	0	0,0115			5469,3463	5469,3578		
1,5	4,8742	4,8972	124,8643	124,8644	5474,0724	5474,0953	5593,4039	5593,4039
2,5	13,0016	13,0361	133,2249	133,2250	5481,9530	5481,9874	5601,5050	5601,5052
3,5	24,3823	24,4282	144,9290	144,9292	5492,9881	5493,0338	5612,8458	5612,8461
4,5	39,0162	39,0734	159,9755	159,9761	5507,1776	5507,2345	5627,4255	5627,4260
5,5	56,9033	56,9716	178,3637	178,3646	5524,5214	5524,5894	5645,2429	5645,2438
6,5	78,0434	78,1227	200,0920	200,0936	5545,0193	5545,0983	5666,2970	5666,2985
7,5	102,4365	102,5266	225,1592	225,1615	5568,6712	5568,7609	5690,5864	5690,5885
8,5	130,0823	130,1830	253,5635	253,5667	5595,4767	5595,5770	5718,1092	5718,1122
9,5	160,9807	161,0918	285,3029	285,3073	5625,4356	5625,5463	5748,8639	5748,8679
10,5	195,1314	195,2526	320,3755	320,3813	5658,5474	5658,6683	5782,8482	5782,8536
11,5	232,5340	232,6651	358,7790	358,7864	5694,8119	5694,9427	5820,0602	5820,0671
12,5	273,1882	273,3289	400,5109	400,5203	5734,2284	5734,3689	5860,4973	5860,5060
13,5	317,0934	317,2434	445,5687	445,5802	5776,7964	5776,9462	5904,1571	5904,1679
14,5	364,2490	364,4081	493,9495	493,9636	5822,5151	5822,6741	5951,0368	5951,0500
15,5	414,6545	414,8223	545,6505	545,6674	5871,3838	5871,5516	6001,1338	6001,1496
16,5	468,3089	468,4852	600,6687	600,6887	5923,4015	5923,5780	6054,4449	6054,4636
17,5	525,2114	525,3958	659,0008	659,0242	5978,5674	5978,7521	6110,9670	6110,9890
18,5	585,3611	585,5533	720,6435	720,6706	6036,8802	6037,0728	6170,6969	6170,7224
19,5	648,7567	648,9564	785,5934	785,6246	6098,3387	6098,5390	6233,6312	6233,6606
20,5	715,3970	715,6038	853,8469	853,8825	6162,9416	6163,1492	6299,7664	6299,7999
21,5	785,2807	785,4943	925,4003	925,4406	6230,6873	6230,9019	6369,0989	6369,1369
22,5	858,4061	858,6262	1000,2499	1000,2953	6301,5742	6301,7956	6441,6250	6441,6677
23,5	934,7717	934,9979	1078,3917	1078,4425	6375,6006	6375,8283	6517,3407	6517,3885
24,5	1014,3755	1014,6076	1159,8219	1159,8783	6452,7644	6452,9983	6596,2421	6596,2953
25,5	1097,2157	1097,4534	1244,5362	1244,5986	6533,0638	6533,3034	6678,3252	6678,3841
26,5	1183,2902	1183,5330	1332,5304	1332,5992	6616,4963	6616,7414	6763,5857	6763,6506
27,5	1272,5966	1272,8443	1423,8003	1423,8758	6703,0598	6703,3101	6852,0195	6852,0907
28,5	1365,1326	1365,3849	1518,3416	1518,4240	6792,7517	6793,0068	6943,6221	6943,7000
29,5	1460,8956	1461,1521	1616,1496	1616,2393	6885,5693	6885,8290	7038,3891	7038,4739
30,5	1559,8828	1560,1434	1717,2198	1717,3172	6981,5099	6981,7738	7136,3159	7136,4078

Список литературы

1. Sulakshina O.N., Borkov Yu.G. Critical evaluation of measured line positions of $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ in $X^2\Pi$ state // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2018. V. 209. P. 171–179. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.01.020.
2. Sulakshina O.N., Borkov Yu.G. Global modelling of the experimental energy levels and observed line positions: Dunham coefficients for the ground state of $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ // Mol. Phys. 2018. V. 116. P. 3519–3529. DOI: 10.1080/00268976.2018.1468043.
3. Борков Ю.Г., Сулакшина О.Н., Сердюков В.И., Синеца Л.Н. Параметры спектральных линий колебательной полосы 3–0 для молекулы $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ в основном электронном состоянии // Оптика атмосфер. и океана. 2023. Т. 36, № 4. С. 251–256. DOI: 10.15372/AOO20230401; Borkov Yu.G., Sulakshina O.N., Serdyukov V.I., Sinita L.N. Spectroscopic parameters of the (3–0) vibrational band for the $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ molecule in the ground electronic state // Atmos. Ocean. Opt. 2023. V. 36, N 5. P. 427–432.
4. Борков Ю.Г., Сулакшина О.Н., Сердюков В.И., Синеца Л.Н. Анализ спектра изотополога $^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ в области 5200–5500 см⁻¹ // Оптика атмосфер. и океана. 2023. Т. 36, № 10. С. 799–806. DOI: 10.15372/AOO20231002; Borkov Yu.G., Sulakshina O.N., Serdyukov V.I., Sinita L.N. Analysis of $^{14}\text{N}^{18}\text{O}$ spectrum in the 5200–5500 cm⁻¹ spectral region vapors // Atmos. Ocean. Opt. 2023. V. 36, N S1. P. S17–S26.
5. Исидоров В.А. Органическая химия атмосферы. СПб.: Химиздат, 2001. 352 с.
6. Белан Б.Д. Озон в тропосфере. Томск: ИОА СО РАН, 2010. 488 с.
7. Roller C., Namjou K., Jeffers J.D., Camp M., Mock A., McCann P.J., Grego J. Nitric oxide breath testing by tunable diode laser absorption spectroscopy: Application in monitoring respiratory inflammation // Appl. Opt. 2002. V. 41. P. 6018. DOI: 10.1364/AO.41.006018.
8. Gerard J.C. Satellite observations of the nitric oxide nightglow // Geophys. Res. Lett. 1975. V. 2. P. 179–182.
9. Bertaux J.-L., Leblanc F., Perrier S., Quemerais E., Korablev O., Dimarellis E., Reberac A., Forget F., Simon P.C., Stern S.A., Sandel B., the SPICAM team. Nightglow in the upper atmosphere of Mars and implications for atmospheric transport // Science. 2005. V. 307. P. 566–569. DOI: 10.1126/science.1106957.
10. Munoz A.G., Mills F.P., Piccioni G., Drossart P. From the cover: The near-infrared nitric oxide nightglow in the upper atmosphere of Venus // Proc. Natl. Acad. Sci. 2009. V. 106. P. 985–988. DOI: 10.1073/pnas.0808091106.
11. Millar T.J., Farquhar P.R.A., Willacy K. The UMIST database for astrochemistry 1995 // Astron. Astrophys. Suppl. Ser. 1997. V. 121. P. 139–185.

12. Muller H.S.P., Kobayashi K., Takahashi K., Tomaru K., Matsushima F. Terahertz spectroscopy of $N^{18}O$ and isotopic invariant fit of several nitric oxide isotopologs // J. Mol. Spectros. 2015. V. 310. P. 92–98. DOI: 10.1016/S1369-7021(08)70016-6.
13. Wong A., Yurchenko S.N., Bernath P., Holder S., Muller P., McConkey S., Tennyson J. ExoMol line list-XXI. Nitric oxide (NO) // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2017. V. 470. P. 882–897. DOI: 10.1093/mnras/staa2034.
14. Hargreaves R.J., Gordon I.E., Rothman L.S., Tashkun S.A., Perevalov V.I., Lukashchuk A.A., Yurchenko S.N., Tennyson J., Müller H.S.P. Spectroscopic line parameters of NO, NO₂, and N₂O for the HITEMP database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2019. V. 232. P. 35–53. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.04.040.
15. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hasemi R., Karlovets E.V., Skinner F.M., Conway E.K., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Wcislo P., Finenko A.A., Nelson K., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Coustenis A., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Mlawer E.J., Nikitin A.V., Perevalov V.I., Rotger M., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Cane E., Császár A.G., Dudaryonok A., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbaey H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneman V.-M., Huang X., Karman T., Karns J., Kass S., Kleiner I., Kofman V., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N.N., Lee T.J., Long D.A., Lukashchuk A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Mondelain D., Reed Z.D., Rey M., Richard C., Tobias R., Sadiek I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Vanderauwera J., Vasilenko I.A., Vivasin A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // J. Quantum. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. V. 277. P. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.
16. Dale R.M., Johns J.W.C., McKellar A.R.W., Rigin M. High-resolution laser magnetic resonance and infrared-radiofrequency double-resonance spectroscopy of NO and its isotopes near 5.4 μm // J. Mol. Spectrosc. 1977. V. 67. P. 440–458.
17. Amiot C., Basis R., Guelachvili G. Infrared study of the $X^2\Pi$ $v = 0, 1, 2$ levels of $^{14}N^{16}O$. Preliminary results on the $v = 0, 1$ levels of $^{14}N^{17}O$, $^{14}N^{18}O$, and $^{15}N^{16}O$ // Can. J. Phys. 1978. V. 56. P. 251–265. DOI: 10.1139/p78-032.
18. Salek A.H., Liedtke M., Dolgner A., Winnemisser G. Rotational spectra of $^{14}N^{17}O$ and $^{15}N^{18}O$ // Z. Naturforsch. 1994. V. 49. P. 1111–1118. DOI: 10.1515/zna-1994-1203.
19. Люлин О.М. Определение параметров спектральных линий из нескольких спектров поглощения с помощью программы MultiSpectrum Fitting // Оптика атмосф. и океана. 2015. Т. 28, № 5. С. 408–416. DOI: 10.15372/AOO20150504; Lyulin O.M. Determination of spectral line parameters from several absorption spectra with the MultiSpectrum Fitting computer code // Atmos. Ocean. Opt. 2015. V. 28, N 6. P. 487–495.
20. Brøsen J.M., Colbourn E.A., Watson J.K.G., Wayne F.D. An effective Hamiltonian for diatomic molecules. *Ab initio* calculations of parameters of HCl^+ // J. Mol. Spectrosc. 1979. V. 74. P. 294–318.
21. Salek A.H., Yamada K.M.T., Winnemisser G. Isotopic nitric oxide spectra and breakdown of the Born–Oppenheimer approximation // Mol. Phys. 1991. V. 72. P. 1135–1148. DOI: 10.1080/00268979100100811.

Yu.G. Borkov, O.N. Sulakshina, V.I. Serdyukov, L.N. Sinitsa. Spectrum of $^{14}N^{17}O$ isotopologue in the region 5200–5550 cm^{-1} . Spectroscopic parameters for $v = 3$ state.

The absorption spectrum of the $^{14}N^{17}O$ molecule in the range 5200–5550 cm^{-1} was recorded for the first time using a Bruker IFS-125M Fourier spectrometer with a spectral resolution of 0.0056 cm^{-1} . An analysis of the spectrum made it possible to detect 83 vibrational-rotational lines of the 3–0 band of the main transitions in the $X^2\Pi$ electronic state of the $^{14}N^{17}O$ molecule. For 29 resolved doublets, the positions and relative intensities of each component of a doublet are determined. The spectroscopic A -parameters are found. For the remaining 25 unresolved doublets, the positions and relative intensities of the doublet center are also determined. The maximum of the rotational quantum number J was 24.5. The found experimental line positions in the 3–0 band confirmed the calculated data given in the ExoMol database. The frequencies of registered transitions weighted in accordance with experimental uncertainties have been processed, and the spectroscopic constants for the vibrational state $v = 3$ have been determined. With the found spectroscopic constants, predictive calculations were made of the rotational energy term values up to $J = 30.5$ in the vibrational state $v = 3$ and, accordingly, the transition frequencies of the 3–0 vibrational band for $^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ electronic states. The calculations performed showed agreement with the data given in the ExoMol database, within the error specified.