

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 539.194

Параметры спектральных линий колебательной полосы 3–0 для молекулы $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ в основном электронном состоянии

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 20.01.2023 г.;
после доработки 15.02.2023 г.;
принята к печати 21.02.2023 г.

Зарегистрирован и проанализирован спектр молекулы $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ в области 5200–5500 cm^{-1} . В результате анализа обнаружено 150 колебательно-вращательных линий, представляющих Λ -дублеты в полосе 3–0 основных переходов между электронными состояниями $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$. Для 108 из них, когда величина расщепления была 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 HITRAN2020, а интенсивности e - и f -компонент считались равными. Максимальное значение вращательного квантового числа J составило 30,5. Частоты зарегистрированных переходов, взвешенные в соответствии с экспериментальными погрешностями, были обработаны программным кодом, использующим нелинейный метод наименьших квадратов. В результате обработки найдены спектроскопические постоянные для колебательного состояния $v = 3$ изотополога $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$. Постоянные Λ -удвоения для данного состояния определены впервые. Проведено сравнение полученных результатов с известной базой спектроскопической информации HITRAN2020.

Ключевые слова: изотополог $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, зарегистрированный спектр, колебательная полоса 3–0, спектроскопические постоянные; $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ isotopologue, registered spectrum, vibration band 3–0, spectroscopic constants.

Введение

Оксид азота, или окись азота, является одной из немногих двухатомных молекул, которые привлекают к себе внимание ученых из различных областей знаний, таких как физика, химия, биология и медицина. Молекула NO, находясь в основном электронном состоянии $^2\Pi$, имеет один неспаренный электрон и обладает свойствами радикала и тем самым выделяется среди других двухатомных молекул своей химической активностью. Состояние $^2\Pi$ представляет собой мультиплет, состоящий из двух компонент $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$, имеющих полный электронный момент относительно межъядерной оси, обозначаемый Ω , $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$ 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 Λ (проекции орбитального углового момента на межъядерную ось молекулы) — так называемое Λ -удвоение. Колебательно-вращательный спектр молекулы в этом случае состоит как бы из двух: спектра для состоя-

ния $^2\Pi_{1/2}$ и спектра для состояния $^2\Pi_{3/2}$. При этом кроме переходов внутри состояний $^2\Pi_{1/2} \rightarrow ^2\Pi_{1/2}$, $^2\Pi_{3/2} \rightarrow ^2\Pi_{3/2}$, называемых основными полосами, наблюдаются переходы между компонентами $^2\Pi_{1/2} \leftrightarrow \leftrightarrow ^2\Pi_{3/2}$, которые называют сателлитными полосами.

Являясь одним из газовых компонентов атмосферы Земли, окись азота играет существенную роль в атмосферных процессах, особенно в образовании и разрушении озона [1]. Экспериментальные исследования спектральных характеристик оксида азота затруднены в силу его химической активности. Достаточно обширная спектроскопическая информация по инфракрасным спектрам для его основного изотопа известна и изложена в работах [2, 3]. Для других изотопологов оксида азота, таких как $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, экспериментальная информация по параметрам спектральных линий в инфракрасной области весьма скудная [4–7]. Впервые первый и второй обертоны для этого изотополога были зарегистрированы в работе [4] и на основе этих данных найдены вращательные молекулярные постоянные. Основной переход (1–0) был исследован в работе [5], там же обнаружены сателлитные полосы, представляющие переходы между состояниями $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$. Фурье-спектрометр с разрешением $0,0027 \text{ cm}^{-1}$ использовался в [6] для регистрации частот переходов в основной полосе 1–0 и горячей полосе 2–1 [6]. В результате

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

были определены спектроскопические постоянные и рассчитаны уровни энергии для трех колебательных состояний $v = 0, 1, 2$. Последние измерения, выполненные в инфракрасной области спектра, представлены в публикации [7], где были зарегистрированы разрешенные Λ -дублеты в спутниковой подполосе ${}^2P_{3/2} - {}^2P_{1/2}$ перехода $1-0$, а также неразрешенные Λ -дублеты в первом и втором обертонах. Следует отметить, что спектроскопические постоянные Λ -удвоения для колебательных состояний $v = 2, 3$ не были определены в [7]. Наиболее точные измерения Λ -удвоения и сверхтонкой структуры были выполнены в микроволновой области спектра [8–11], что и позволило определить спектроскопические постоянные для основного состояния. Хорошо известная база спектроскопической информации HITRAN [2] для молекулы ${}^{15}\text{N}{}^{16}\text{O}$ содержит рассчитанные данные для колебательных полос с $\Delta v = 9$ ($v_{\text{max}} = 9$), взятые из [12]. Авторы работы [12] приводят список линий «NOname», представляющий наиболее обширные вариационные расчеты для пяти изотопологов молекулы NO, исключая основной изотополог. Такой подход подразумевает *ab initio* расчеты потенциальной кривой и кривой спин-орбитального взаимодействия, а затем их корректировку методом наименьших квадратов с использованием экспериментальных данных по частотам переходов.

Целью данной работы является получение новых экспериментальных данных по частотам и относительным интенсивностям колебательно-вращательных переходов в полосе $3-0$ изотополога ${}^{15}\text{N}{}^{16}\text{O}$ и на их основе уточнение спектроскопических постоянных для колебательного состояния $v = 3$.

Эксперимент

В лаборатории молекулярной спектроскопии ИОА СО РАН с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS 125M со спектральным разрешением $0,0056 \text{ см}^{-1}$ был зарегистрирован спектр поглощения оксида азота в диапазоне $4000-7000 \text{ см}^{-1}$. В смеси от компании IZOTOP NO был представлен двумя изотопологами: $80\% \text{ }^{15}\text{N}{}^{18}\text{O}$ и $20\% \text{ }^{14}\text{N}{}^{16}\text{O}$. Для достижения полного оптического пути в 2400 см использовалась многоходовая кювета длиной 60 см . Спектрометр был снабжен галогенной лампой в качестве источника света, германиевым фотодетектором и светоделителем из CaF_2 . Давление образца измерялось датчиком АИР-20/М2-Н с точностью $0,03 \text{ мбар}$. Коррекция фазы Мерца к усредненным интерферограммам проводилась с фазовым разрешением 1 см^{-1} .

Использовалась аподизация треугольной функцией. Термостабилизация помещения позволяла вести длительную регистрацию спектра. Отношение сигнал/шум в зарегистрированных спектрах составляло 650 для самых сильных линий. Спектр поглощения смеси закиси азота регистрировали при температуре $24 \pm 1 \text{ }^\circ\text{C}$ и давлении газа 16 мбар . Парциальное давление отдельных изотопологов не удалось

определить в силу многокомпонентности смеси и отсутствия информации об интенсивностях линий рассматриваемых изотопологов. Спектр калибровался по линиям водяного пара, присутствующего в смеси в качестве примеси. Точность калибровки составила $0,0014 \text{ см}^{-1}$.

Методы и результаты

Определение параметров спектральных линий

Зарегистрированный спектр анализировался в области $5200-5500 \text{ см}^{-1}$, где были обнаружены колебательно-вращательные линии полосы $3-0$ для основных переходов между электронными состояниями ${}^2P_{1/2}$ и ${}^2P_{3/2}$ молекулы ${}^{15}\text{N}{}^{16}\text{O}$. Линии данной полосы идентифицировались на основе рассчитанных данных, представленных в HITRAN [2]. Для определения параметров линий использовалась программа MultiFit [13] с моделью контура линии Фойгта. Всего было зарегистрировано 150 положений вращательных линий в трех ветвях основных подполос $2P_{1/2} - {}^2P_{1/2}$ и ${}^2P_{3/2} - {}^2P_{3/2}$. Максимальное значение вращательного квантового числа J составило $30,5$. Только в линиях Q -ветви наблюдалось Λ -расщепление. Все Λ -дублеты в P - и R -ветвях зарегистрированного спектра не были разрешены. Для большинства из них, в случае когда величина расщепления больше $4,5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$, удалось получить положения и относительные интенсивности каждой компоненты дублета, при этом параметр самоуширения фиксировался значением из HITRAN [2], а интенсивности e - и f -компонент считались равными. Сравнение найденных величин Λ -расщепления для зарегистрированных линий с расчетными данными из HITRAN2020 приведено на рис. 1. Осталось 42 неразрешенных Λ -дублета, для которых были найдены положения и интенсивности.

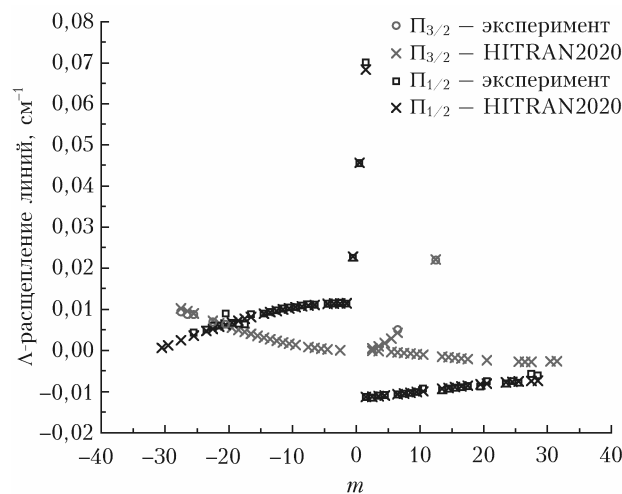


Рис. 1. Сравнение с расчетом найденных величин Λ -расщепления для зарегистрированных линий; $m = -J$, $J - 1$ и $J + 1$ для P -, Q - и R -ветвей соответственно

Величиной сдвига положения линии давлением мы пренебрегали, учитывая малость полного давления смеси.

Таким образом, в результате анализа были определены положения (частоты переходов) 150 спектральных линий и их относительные интенсивности (Приложение). Там же приведены частоты переходов в см^{-1} , поскольку в спектроскопии используется волновое число энергетического уровня $\tilde{E} = E/hc$ (см^{-1}), а также экспериментальные погрешности для положений линий и относительных интенсивностей. Абсолютные интенсивности не определялись, поскольку не известно значение парциального давления рассматриваемого изотополога.

Определение спектроскопических постоянных колебательного состояния $v = 3$

В лаборатории теоретической спектроскопии ИОА СО РАН создана программа, позволяющая на основе модели эффективного гамильтониана для стабильных двухатомных радикалов в состоянии $^2\Pi$ [14] выполнять обработку уровней энергии или частот переходов, в результате которой определяются спектроскопические постоянные колебательных состояний. Для проведения обработки был составлен файл из 192 частот разрешенных Λ -дублетов (Приложение, столбец II таблицы), в котором частоты неразрешенных Λ -дублетов были удвоены. Частоты переходов, взвешенные в соответствии с экспериментальными погрешностями, были обработаны программным кодом, использующим нелинейный метод наименьших квадратов [15]. Частоты четырех перекрывающихся линий (см. Приложение) были исключены из обработки. Экспериментальная погрешность для разрешенных и неразрешенных Λ -дублетов составила 0,0015 и 0,004 см^{-1} соответственно. Волновые числа для электронного состояния $^2\Pi$ находились путем диагонализации матрицы эффективного гамильтониана для нижнего и верхнего состояний. Для расчета волновых чисел основного состояния использовались спектроскопические постоянные из работы [11]. Стандартное отклонение взвешенной обработки составило 0,3. Данная обработка позволила определить семь спектроскопических постоянных для состояния $v = 3$ изотополога $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ и сравнить их с имеющимися в литературе данными. Значения параметров и их сравнение с известными данными приведено в таблице.

Спектроскопические постоянные для колебательного состояния $v = 3$ молекулы $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$

Параметр	Данная работа	Работа [7]
ν_V	5447,50045(12)	5447,50948(180)
A_V	122,39744(20)	122,39398(200)
γ_V	-0,005417(22)	0
B_V	1,58613554(77)	1,5861155(320)
D_V	$5,1384(9) \cdot 10^{-6}$	$5,1192(7930) \cdot 10^{-6}$
p_V	0,011235(11)	0
q_V	0,00008490(77)	0

Параметры спектральных линий колебательной полосы 3–0 для молекулы $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$...

Следует отметить, что значения параметров спин-орбитального взаимодействия p и q для $v = 3$ изотополога $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ найдены впервые. Качество обработки демонстрирует рис. 2, на котором представлена зависимость относительных отклонений рассчитанных частот переходов от вращательного квантового числа J (нижнего состояния $J_{\text{ниж}}$). Как видно из рис. 2, относительные отклонения рассчитанных частот переходов не превышают единицу, и это говорит о том, что найденные спектроскопические постоянные восстанавливают экспериментальные частоты в пределах экспериментальной погрешности.

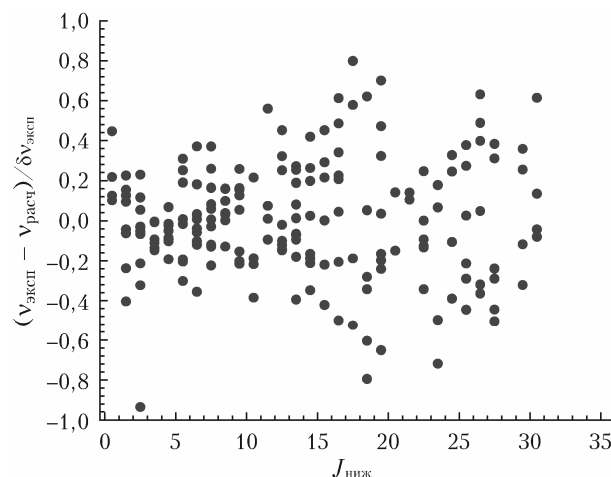


Рис. 2. Зависимость относительных отклонений рассчитанных частот переходов от вращательного квантового числа $J_{\text{ниж}}$

С найденными спектроскопическими постоянными мы выполнили расчет частот переходов в полосе 3–0 и сравнили с расчетными данными из HITRAN2020. Рис. 3 показывает отклонения экспериментальных и рассчитанных нами частот переходов от значений, приведенных в HITRAN2020. Следует заметить, что эти отклонения не превышают 0,001 см^{-1} .

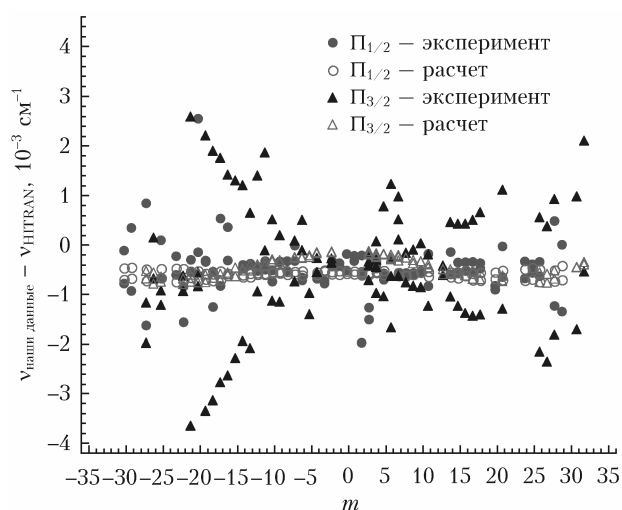


Рис. 3. Отклонения экспериментальных и рассчитанных в данной работе частот переходов от приведенных в HITRAN2020

В свою очередь, отклонения рассчитанных значений частот переходов, приведенных в HITRAN2020, от экспериментальных значений, полученных в нашей работе, могут достигать $0,004 \text{ см}^{-1}$.

Заключение

Анализ зарегистрированного в настоящей работе спектра молекулы $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ в области $5200\text{--}5500 \text{ см}^{-1}$ позволил обнаружить 150 колебательно-вращательных линий, представляющих Λ -дублеты в полосе $3\text{--}0$ основных переходов между электронными состояниями $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$. Впервые в этой полосе наблюдалось Λ -расщепление и были определены положения и относительные интенсивности 108 компонент дублета, при этом максимальное вра-

щательное квантовое число $J = 30,5$. В результате обработки программным кодом частот зарегистрированных переходов, взвешенных в соответствии с экспериментальными погрешностями, определены спектроскопические постоянные для колебательного состояния $v = 3$ изотополога $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$. Впервые определены постоянные Λ -удвоения для состояния $v = 3$. С найденными спектроскопическими постоянными проведен расчет частот переходов в полосе $3\text{--}0$ между электронными состояниями $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$. Рассчитанные частоты показали совпадение с частотами, приведенными в базе данных HITRAN, в пределах $0,001 \text{ см}^{-1}$.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

Приложение

Параметры линий полосы $3\text{--}0$ молекулы $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$

I. Идентификация			II. $\nu_{\text{эксп}}, \text{ см}^{-1}$			III. $\nu_{\text{эксп}} - \nu_{\text{расч}}, \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$		IV. Относительная $I_{\text{эксп}}$		
Ω	Ветвь	$J_{\text{ниж}}$	e	f	$\Delta \cdot 10^{-3}$	e	f	e	f	$\Delta, \%$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1/2	P	1,5	5442,9988	5442,9874	1,5	0,18	0,16	2,3E-01	2,3E-01	8
1/2	P	2,5*	5439,6251	5439,6135	1,5	0,22	0,14	4,2E-01	4,2E-01	8
1/2	P	3,5	5436,1534	5436,1419	1,5	-0,20	-0,27	5,6E-01	5,4E-01	8
1/2	P	4,5	5432,5846	5432,5732	1,5	-0,09	-0,09	6,7E-01	6,5E-01	8
1/2	P	6,5	5425,1541	5425,1429	1,5	-0,13	-0,11	8,0E-01	7,7E-01	7
1/2	P	7,5	5421,2930	5421,2818	1,5	0,52	0,26	8,2E-01	8,2E-01	8
1/2	P	8,5	5417,3334	5417,3224	1,5	0,26	0,01	7,9E-01	7,9E-01	8
1/2	P	9,5	5413,2763	5413,2658	1,5	0,23	0,20	7,6E-01	7,4E-01	8
1/2	P	10,5	5409,1214	5409,1109	1,5	0,02	-0,17	6,9E-01	6,9E-01	8
1/2	P	11,5	5404,8692	5404,8590	1,5	0,25	0,09	6,5E-01	6,5E-01	8
1/2	P	12,5	5400,5188	5400,5091	1,5	0,13	0,07	5,7E-01	5,7E-01	8
1/2	P	13,5	5396,0709	5396,0616	1,5	0,20	0,25	4,9E-01	4,9E-01	8
1/2	P	14,5	5391,5251	5391,5161	1,5	0,20	0,18	4,2E-01	4,2E-01	8
1/2	P	16,5	5382,1409	5382,1321	1,5	0,94	0,31	2,8E-01	3,0E-01	9
1/2	P	17,5*	5377,3006	5377,2942	1,5	-0,31	1,24	1,9E-01	1,9E-01	13
1/2	P	18,5*	5372,3632	5372,3567	2,5	-0,66	0,18	4,8E-01	4,8E-01	13
1/2	P	19,5	5367,3289	5367,3233	1,5	-0,33	0,97	1,2E-01	1,2E-01	9
1/2	P	20,5*	5362,1999	5362,1909	1,5	3,07	9,57	1,2E-01	1,2E-01	13
1/2	P	21,5	5356,9668	5356,9608	1,5	0,24	0,12	7,8E-02	7,8E-02	8
1/2	P	22,5*	5351,6384	5351,6325	2,5	-0,36	-0,84	5,8E-02	5,8E-02	13
1/2	P	23,5	5346,2135	5346,2084	1,5	0,24	0,14	4,1E-02	4,1E-02	8
1/2	P	25,5	5335,0701	5335,0657	1,5	0,57	0,00	2,0E-02	2,0E-02	9
1/2	P	27,5	5323,5346		4,0	-1,14	1,56	5,8E-03	5,8E-03	20
1/2	P	29,5	5311,6119		4,0	-0,48	1,02	4,1E-03	4,1E-03	26
1/2	P	30,5*	5305,5045		4,0	-0,32	0,58	1,9E-03	1,9E-03	55
1/2	Q	0,5	5447,8455	5447,8230	1,5	0,01	0,39	1,3E-01	1,3E-01	8
1/2	Q	1,5	5447,7108	5447,6652	1,5	0,26	0,31	4,9E-02	5,4E-02	9
1/2	Q	2,5	5447,4783	5447,4082	1,5	0,39	-1,41	4,5E-02	4,3E-02	9
1/2	R	0,5	5452,5232	5452,5345	1,5	-0,04	-0,02	2,4E-01	2,4E-01	8
1/2	R	1,5	5455,5058	5455,5172	1,5	-0,95	-0,67	4,9E-01	4,9E-01	8
1/2	R	2,5	5458,3928	5458,4038	1,5	0,15	0,08	6,1E-01	6,1E-01	8
1/2	R	3,5	5461,1807	5461,1916	1,5	-0,06	-0,10	7,2E-01	7,2E-01	8
1/2	R	5,5	5466,4637	5466,4744	1,5	-0,04	0,06	9,4E-01	9,4E-01	8
1/2	R	6,5	5468,9582	5468,9687	1,5	-0,01	0,04	9,9E-01	9,9E-01	8
1/2	R	7,5	5471,3547	5471,3650	1,5	-0,02	0,02	1,0	1,0	8
1/2	R	8,5	5473,6530	5473,6631	1,5	-0,02	0,02	9,8E-01	9,8E-01	8
1/2	R	9,5	5475,8533	5475,8625	1,5	0,35	-0,19	8,7E-01	8,8E-01	8
1/2	R	12,5	5481,8607	5481,8704	1,5	-0,05	0,50	7,4E-01	7,4E-01	8
1/2	R	13,5	5483,6634	5483,6747	1,5	0,02	0,31	6,4E-01	6,4E-01	8
1/2	R	14,5	5485,3709	5485,3800	1,5	-0,01	0,27	5,4E-01	5,4E-01	8
1/2	R	15,5	5486,9768	5486,9858	1,5	0,03	0,37	4,6E-01	4,6E-01	8

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1/2	R	16,5	5488,4832	5488,4919	1,5	0,08	0,35	3,7E-01	3,7E-01	8
1/2	R	18,5*	5491,1954	5491,2037	1,5	-0,35	-0,14	2,4E-01	2,4E-01	13
1/2	R	19,5	5492,4021	5492,4096	1,5	0,48	0,06	1,7E-01	1,7E-01	8
1/2	R	22,5	5495,4145	5495,4226	1,5	-0,19	0,38	8,1E-02	8,1E-02	8
1/2	R	23,5	5496,2169	5496,2243	1,5	0,07	0,13	5,6E-02	5,6E-02	8
1/2	R	24,5	5496,9172	5496,9250	1,5	-0,14	0,41	4,4E-02	4,4E-02	8
1/2	R	26,5	5498,0138	5498,0195	1,5	0,99	-0,50	1,6E-02	1,6E-02	10
1/2	R	27,5	5498,4078	5498,4139	1,5	0,42	-0,64	1,1E-02	1,1E-02	12
3/2	P	2,5	5438,7387		4,0	-0,23	-0,13	1,6E-01	1,6E-01	8
3/2	P	4,5	5431,4920		4,0	-0,40	-0,10	3,4E-01	3,4E-01	8
3/2	P	5,5*	5427,7156		4,0	-1,16	-0,76	5,8E-01	5,8E-01	13
3/2	P	6,5*	5423,8403		4,0	0,16	0,76	5,6E-01	5,6E-01	13
3/2	P	7,5	5419,8620		4,0	-0,47	0,33	4,5E-01	4,5E-01	8
3/2	P	9,5	5411,6047		4,0	-0,79	0,51	4,1E-01	4,1E-01	8
3/2	P	10,5	5407,3259		4,0	-0,79	0,81	3,9E-01	3,9E-01	8
3/2	P	11,5*	5402,9482		4,0	0,30	2,20	5,3E-01	5,3E-01	8
3/2	P	12,5*	5398,4690		4,0	-0,51	1,79	3,8E-01	3,8E-01	8
3/2	P	13,5	5393,8900		4,0	-1,56	1,04	2,4E-01	2,4E-01	8
3/2	P	14,5	5389,2132		4,0	-1,42	1,68	2,2E-01	2,2E-01	8
3/2	P	15,5	5384,4369		4,0	-1,64	1,76	1,9E-01	1,9E-01	8
3/2	P	16,5	5379,5618		4,0	-2,03	1,97	1,6E-01	1,6E-01	8
3/2	P	17,5	5374,5883		4,0	-2,06	2,34	1,2E-01	1,2E-01	8
3/2	P	18,5	5369,5163		4,0	-2,46	2,44	1,0E-01	1,0E-01	8
3/2	P	19,5	5364,3463		4,0	-2,59	2,81	7,9E-02	7,9E-02	8
3/2	P	20,5	5359,0813	5359,0749	1,5	0,21	-0,27	5,4E-02	5,4E-02	8
3/2	P	21,5*	5353,7126	5353,7122	1,5	-2,89	3,19	2,2E-02	2,3E-02	14
3/2	P	22,5	5348,2521	5348,2452	1,5	-0,14	0,05	2,6E-02	2,6E-02	9
3/2	P	25,5	5331,2776	5331,2689	1,5	-0,46	-0,28	9,3E-03	9,3E-03	13
3/2	P	26,5	5325,4258	5325,4170	1,5	0,11	0,71	5,6E-03	5,6E-03	20
3/2	P	27,5	5319,4752	5319,4658	2,5	-1,29	-0,63	4,1E-03	4,1E-03	26
3/2	Q	3,5	5446,4158		4,0	-0,53	-0,03	1,0E-01	1,0E-01	8
3/2	Q	4,5	5445,9545		4,0	-0,78	0,32	5,8E-02	5,8E-02	9
3/2	Q	5,5	5445,3912		4,0	-0,84	0,96	4,9E-02	4,9E-02	8
3/2	Q	6,5	5444,7250		4,0	-1,38	1,52	4,2E-02	4,2E-02	8
3/2	Q	7,5	5443,9591	5443,9541	1,5	0,34	-0,31	3,5E-02	3,5E-02	9
3/2	Q	13,5	5437,2120	5437,1901	1,5	-0,12	0,17	5,8E-03	6,4E-03	19
3/2	R	1,5	5455,0670		4,0	-0,21	-0,21	1,6E-01	1,6E-01	8
3/2	R	2,5	5458,0243		4,0	-0,07	-0,27	2,8E-01	2,8E-01	8
3/2	R	4,5	5463,6290		4,0	-0,03	-0,43	4,6E-01	4,6E-01	8
3/2	R	5,5*	5466,2772		4,0	1,22	0,72	7,2E-01	7,2E-01	8
3/2	R	6,5	5468,8193		4,0	0,10	-0,50	5,3E-01	5,3E-01	8
3/2	R	7,5	5471,2587		4,0	0,28	-0,52	5,4E-01	5,4E-01	8
3/2	R	8,5	5473,5941		4,0	0,37	-0,53	5,4E-01	5,4E-01	8
3/2	R	9,5	5475,8250		4,0	0,26	-0,84	4,7E-01	4,7E-01	8
3/2	R	12,5	5481,8930		4,0	1,05	-0,55	3,7E-01	3,7E-01	8
3/2	R	13,5	5483,7064		4,0	0,99	-0,71	3,3E-01	3,3E-01	8
3/2	R	14,5	5485,4152		4,0	1,04	-0,86	2,9E-01	2,9E-01	8
3/2	R	15,5	5487,0195		4,0	1,18	-0,92	2,3E-01	2,3E-01	8
3/2	R	16,5	5488,5191		4,0	1,35	-0,85	1,8E-01	1,8E-01	8
3/2	R	19,5	5492,3885		4,0	1,84	-0,66	9,7E-02	9,7E-02	8
3/2	R	24,5	5496,7355		4,0	1,31	-1,59	2,0E-02	2,0E-02	9
3/2	R	25,5	5497,2891		4,0	1,14	-1,76	1,4E-02	1,4E-02	11
3/2	R	26,5*	5497,7381		4,0	1,61	-1,29	6,6E-03	6,6E-03	17
3/2	R	29,5	5498,4503		4,0	1,44	-1,26	2,1E-03	2,1E-03	49
3/2	R	30,5	5498,4776		4,0	2,45	-0,15	1,5E-03	1,5E-03	66

Примечание. Звездочкой обозначены перекрывающиеся линии; Ω – квантовое число; ν – частота перехода; e, f – частоты переходов для e - и f -состояний; Δ – погрешность; I – интенсивность перехода.

Список литературы

1. Белан Б.Д. Озон в тропосфере. Томск: ИОА СО РАН, 2010. 488 с.
2. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hashemi 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., M. Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Cane E., Csaszar A.G., Dudaryonok A., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbaey H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneiman 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., Lukashovskaya 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., Schwenske D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Vasilenko I.A., Viganin A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2022. V. 277. P. 107949.
3. 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.
4. Olman M.D., McNelis D. M., Hause C.D. Molecular constants of nitric oxide from near infrared spectrum // *J. Mol. Spectrosc.* 1964. V. 14. P. 62–78.
5. Keck D.B., Hause C.D. High resolution study of nitric oxide near 5.4 microns // *J. Mol. Spectrosc.* 1968. V. 26. P. 163–174.
6. Amiot C., Guelachvili G. Infrared study of the ^{15}N isotopic species of nitric oxide near 5.4 μm // *J. Mol. Spectrosc.* 1979. V. 76. P. 86–103.
7. Teffo J.L., Henry A., Cardinet Ph., Valentin A. Determination of molecular constants of nitric oxide from (1–0), (2–0) (3–0) bands of the $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ and $^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ isotopic species // *J. Mol. Spectrosc.* 1980. V. 82. P. 348–363.
8. Meerts W.L., Dymanus A. The hyperfine Λ -doubling spectrum of $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ and $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ // *J. Mol. Spectrosc.* 1972. V. 44. P. 320–3463.
9. Dale R.M., Johns J.W.C., McKeller 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.
10. Saleck A.H., Yamada K.M.T., Winnewisser G. Isotopic nitric oxide spectra and breakdown of the Born-Oppenheimer approximation // *Mol. Phys.* 1991. V. 72. P. 1135–1148.
11. Varberg T.D., Stroth F., Evenson K.M. Far-Infrared rotational and fine-structure transition frequencies and molecular constants of NO and NO in the $X\Pi$ ($v = 0$) state // *J. Mol. Spectrosc.* 1999. V. 196. P. 5–13.
12. Wong A., Yurchenko S.N., Bernath P., Holder S., Muller P., McConkey S., Tennyson J. ExoMol line list-XXI. Nitric Oxide (NO) // *M. N. R. Astron. Soc.* 2017. V. 470. P. 882–897.
13. 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; 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.
14. Brown 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.
15. 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.

Yu.G. Borkov, O.N. Sulakshina, V.I. Serdyukov, L.N. Sinitsa. Spectroscopic parameters of the (3–0) vibrational band for the $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ molecule in the ground electronic state.

The spectrum of the $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ molecule in the region 5200–5500 cm^{-1} is recorded and analyzed. As a result of the analysis, 150 Λ -doublets of vibration-rotational lines are found in the 3–0 band of the main transitions between the $^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ electronic states. For 108 of them, when the splitting value was greater than $4.5 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^{-1}$, it was possible to obtain the positions and relative intensities of each component of the doublet, while the self-expansion parameter was fixed to the value from HITRAN2020, and the intensities of the components e and f were considered equal. The maximum of the rotational quantum number J was 30.5. The frequencies of the transitions recorded, weighted in accordance with the experimental uncertainties, were processed by the program code using the non-linear least squares method. As a result of processing, the spectroscopic constants for the $v = 3$ vibrational state of the $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$ isotopologue are found. The Λ -doubling constants for this state are determined for the first time. The results are compared with the well-known database of spectroscopic information HITRAN2020.