

Высокоточная спектроскопия молекул в интересах астрофизики

Шубняков Иван Сергеевич

11 класс, МАОУ Школа № 183 им. Р. Алексеева Нижнего Новгорода, Научное объединение
«Школа юного исследователя» АНО ДО «Академ клуб», ИПФ РАН

Научный руководитель Лапинов А. В.

д.ф.-м.н., заведующий лабораторией миллиметровой радиоастрономии ИПФ РАН

Субдоплеровская миллиметровая спектроскопия с провалом Лэмба позволяет исследовать спектры молекул, интересных для астрономии тем, что они содержатся в туманностях, хвостах комет, атмосферах экзопланет, иных галактиках. Изучение различных космических процессов часто затруднено большой оптической толщиной материи вокруг объектов исследований. Точность измерений доплеровских скоростей в них нередко ограничена ошибками лабораторных измерений частот молекул. Примененная методика позволила повысить точность измерений частот молекул на несколько порядков по сравнению с традиционной доплеровской спектроскопией, а написанная на Python программа позволила быстро и просто строить и анализировать спектральные линии.

Цель исследования - повышение точности описания спектров космических молекул с учетом сверхтонкого расщепления за счет лабораторных измерений на основе провала Лэмба. Данный метод превосходит возможности традиционной доплеровской спектрометрии и позволяет значительно повысить точность астрономических измерений, что дает шанс обнаружить ранее неизученные явления и эффекты, связанные с внутримолекулярными процессами и межмолекулярными взаимодействиями.

Принцип действия применяемого метода. Из-за броуновского движения молекул вдоль распространения излучения со скоростью v происходит доплеровский сдвиг – взаимодействие излучения и движущейся молекулы происходит на частоте, смещенной на величину сдвига $\frac{\Delta v}{v} = -v/c$ [1]. На произвольной отстройке частоты от центра линии всегда найдутся молекулы, которые будут доплеровски сдвинуты соответствующим образом и будут поглощать излучение. При прямом распространении излучения и при обратном распространении это будут молекулы, двигающиеся с одинаковой абсолютной скоростью, но в противоположных направлениях. Всегда будут две группы поглощающих молекул. На центральной же частоте те молекулы, которые перешли на более высокий энергетический уровень после первого прохождения электромагнитной волны, при прохождении в обратную сторону уже не будут больше поглощать и в спектре поглощения будет замечен провал, называемый Лэмбовским (рис. 1). Ширина и глубина провала зависят от давления газа в ячейке, потока излучения и ряда других факторов [5]. При помощи этого метода можно изучать строение, молекул. Внутри широкого доплеровского контура возможно различить отдельные сверхтонкие компоненты [3].

Причиной, по которой в данной работе исследуются именно CH_3CN , CH_3OH , HNCO , является то, что эти молекулы обладают спин-вращательными взаимодействиями, интересными для астрофизики [4]. Вращение можно детектировать при помощи спектроскопических измерений. Кроме этого, эти молекулы легкодоступны и представляют интерес для астрофизики, т.к. найдены в самых разных уголках Вселенной.

Повышение точности измерений и нахождение сверхтонких расщеплений в линиях молекул возможно следующими способами:

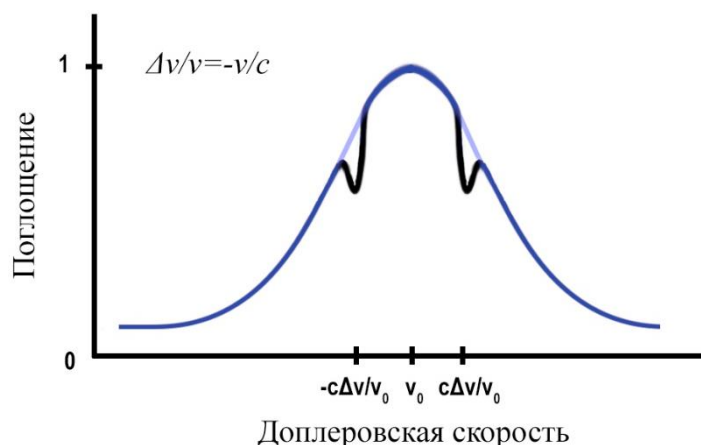


Рисунок 1. Провал Лэмба (Спектр доплеровских скоростей)

- Подбор оптимальной частоты модуляции. Чтобы увидеть сверхтонкие переходы расщепленными, частота модуляции должна быть меньше разницы частот расщепления. Если взять слишком малую частоту, сильно вырастут шумы (особенности установки)
- Подбор оптимальной частоты девиации нужен для достижения баланса между четкостью расщепленных линий и шумами. Частота девиации влияет на амплитуду модулированного сигнала; оказывает «сглаживающее» влияние на спектр
- Снижение давления в газовой ячейке.
- Подбор оптимальной мощности ЛОВ. От неё зависит ширина линии

Результаты исследования молекул:

Зависимость уровня шумов и ширины линии поглощения от мощности ЛОВ и от давления

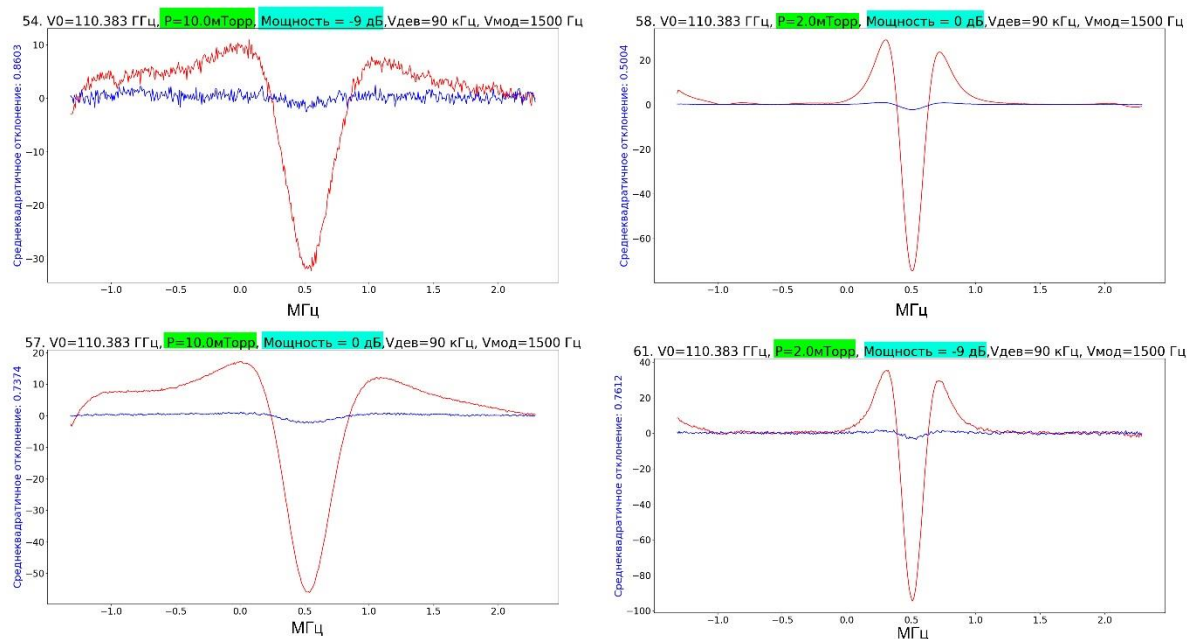


Рисунок 2. Зависимость уровня шумов и ширины линии поглощения от мощности ЛОВ и от давления

CH_3CN – Ацетонитрил

Исследована зависимость ширины линии и частот сверхтонких переходов от давления и мощности (рис. 2). Подобраны оптимальные частоты модуляции и девиации. Заметно уширение линии при повышении давления с 2 до 10 мТорр, связанное с увеличением частоты столкновений молекул между собой. При больших давлениях форма линии определяется соударениями молекул и близка к распределению по функции Лоренца. При снижении давления до ≈ 1 мТорр взаимодействие молекул практически исчезает, поэтому возможно различить сверхтонкие расщепления (рис. 2 – 0.3 мТорр, различимы три сверхтонкие компоненты). Кроме этого, на ширину линии влияет мощность

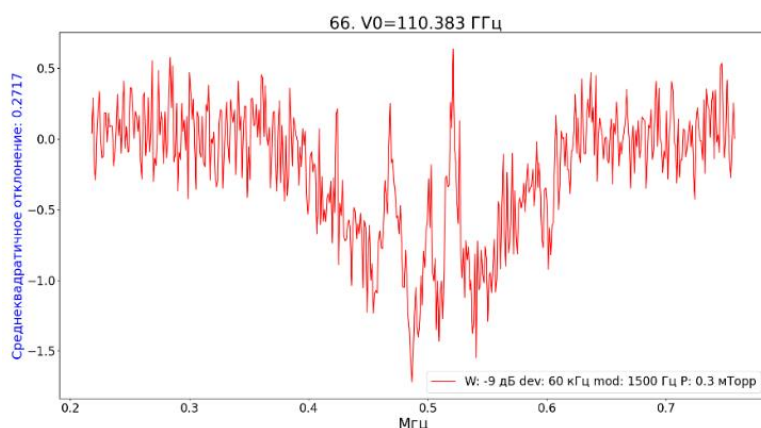


Рисунок 3. Детектирование трех сверхтонких расщеплений в линии 110 ГГц ацетонитрила CH_3CN

излучения. В наших измерениях мощность ЛОВ достигала примерно 30 мВт. Указанные на графиках на рис. 2 уровни мощности указывают ослабление мощности ЛОВ калиброванным аттенуатором. При малой мощности различимы сверхтонкие компоненты, при высокой мощности увеличивается отношение сигнала к шуму (S/N), но сверхтонкие компоненты становятся незаметными. Поэтому важно подобрать достаточную мощность излучения для насыщения верхних энергетических уровней.

CH3OH – метанол

Детектированы три вращательных перехода в метаноле (рис. 4). E1 и E2 – линии метанола, находящегося соответственно на нижнем и верхнем энергетическом уровне Е-метанол обладает суммарным ядерным спином в метильной группе 1/2. Очевидно, что на более высоком уровне будет меньше молекул, поэтому линия E2 гораздо меньше E1. А+ метанол обладает, в отличие от Е – метанола, спином СН3-группы 3/2. Определены частоты переходов (табл. 1)

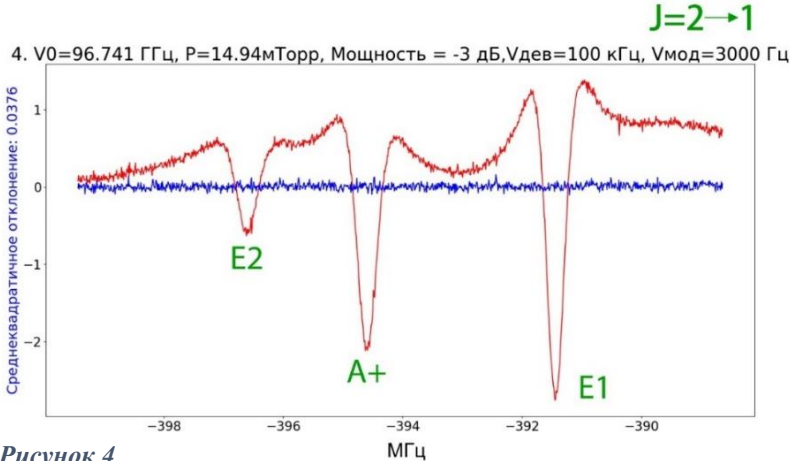


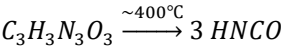
Рисунок 4

E2	96739.3662 МГц
A+	96741.3784 МГц
E1	96744.5516 МГц

Таблица 1

HNCO – изоциановая кислота

Получение изоциановой кислоты из циануровой в лабораторных условиях для дальнейших измерений в газообразном состоянии:



Детектирование при помощи провалов Лэмба сверхтонких расщеплений в широкой полосе (рис. 5). Найдены частоты расщеплений, провалов Лэмба для линии 87.597 ГГц (табл. 2)

Для проверки верности результатов экспериментов полезно сравнить их с полученными при помощи распределения Лоренца (рис. 6), являющегося первой производной от функции Коши, т.к. спектральные линии подчиняются этому распределению.

$$F(x) = \frac{1}{\pi} \arctg\left(\frac{x-x_0}{\gamma}\right) + \frac{1}{2}, \text{ где } x - \text{частота, } x_0 - \text{центральная частота}$$

линии, γ – половина ширины линии

В результате выполненных исследований доказана высокая эффективность субдоплеровской миллиметровой спектроскопии с провалом Лэмба. Удалось различить сверхтонкие компоненты в метаноле, изоциановой кислоте и ацетонитриле, сделать это ранее при помощи однопроходовой доплеровской спектроскопии не представлялось возможным из-за малости расщепления. Осуществлен подбор оптимальных настроек спектрометра. Проведены измерения спектральных линий различных космических молекул при различном давлении, мощности излучения, частоте девиации, частоте модуляции. Написана программа на Python 3 для построения и анализа спектров.

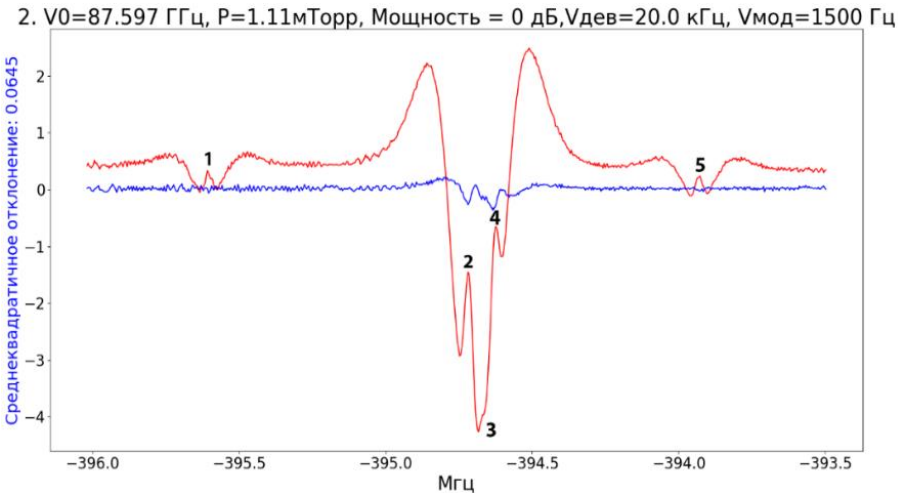
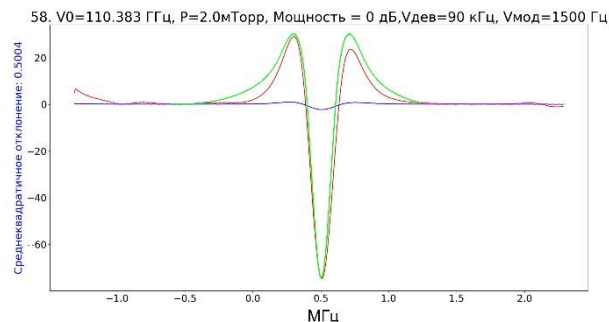
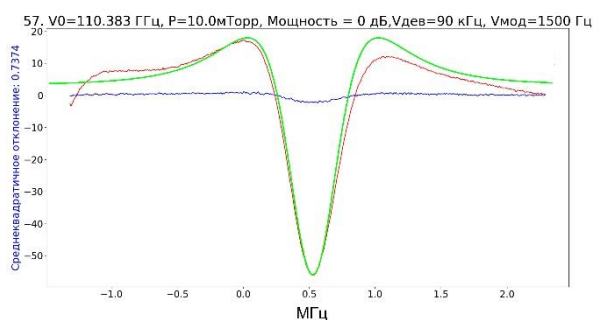


Рисунок 5. Спектр HNCO на центральной частоте 87.597 ГГц

1	87.59626278 ГГц
2	87.5967416 ГГц
3	87.5972318 ГГц
4	87.5972816 ГГц
5	87.5981888 ГГц

Таблица 2



**Смоделированный сигнал
Ассиметрия линии -
следствие нелинейности
метода измерения**

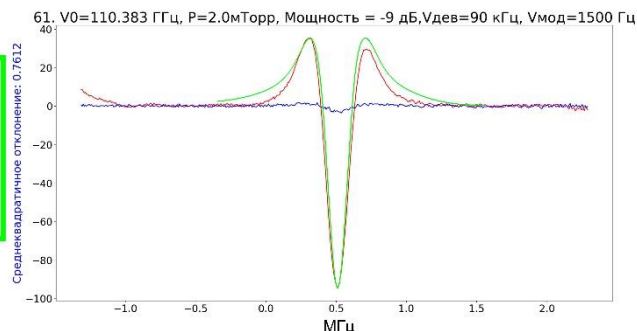


Рисунок 6. Сопоставление фактического сигнала и смоделированного (3-я производная). Заметно отличие от моделируемого сигнала из-за нелинейности метода измерения

Полученные результаты исследования можно применить для изучения космических процессов в микро- и макро- масштабе: рождения звезд в туманностях, давление и температуру которых можно измерить благодаря подобным исследованиям [3, 4]. По смещению линий спектра определяют радиальную скорость движения звёзд, галактик и т. д. Планируются дальнейшие измерения молекул, представляющих интерес для радиоастрономии.

Список литературы

- [1] Е. М. Гершензон. Субмиллиметровая спектроскопия. Соросовский образовательный журнал, №4, 1998. М: МГПУ
- [2] М. Ю. Третьяков. Высокоточная резонаторная спектроскопия атмосферных газов в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах длин волн. Нижний Новгород: ИПФ РАН, 2016. 320 с.
- [3] Лапинов А.В., Левшаков С.А., Козлов М.Г., Голубятников Г.Ю., Белов С.П., Андриянов А.Ф., Шкаев А.П., Агафонова И.И., Зинченко И.И. Исследование фундаментальных свойств вселенной на основе прецизионной спектроскопии молекул. Вестник РФФИ, № 1(73) январь-март 2012
- [4] А. В. Лапинов, Г. Ю. Голубятников, В. Н. Марков, А. Гварнери. Лабораторные исследования спектра молекулы HNCO для прецизионной спектроскопии темных облаков // Письма в астрономический журнал, 2007, том 33, No 2, с. 143–152
- [5] Р. А. Алексеев, И. В. Лапкин, А. В. Лапинов, Т. А. Хабарова, Г. Ю. Голубятников, А. Ф. Адриянов, А. П. Шкаев, П. М. Землянуха. Квазиоптический субдоплеровский спектрометр на основе провала Лэмба (Статья) Нижний Новгород.: ИПФ РАН, 2022