

ОЦЕНКА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИЗМЕРЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ НТО В ИСПАРЕНИЯХ РАДИОАКТИВНОЙ ВОДЫ

Ченцов А.В., Чеснокова Т.Ю., Колотков Г.А., Воронина Ю.В., Воронин Б.А.

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия

e-mail: cav@iao.ru, ches@iao.ru, kolotkov@iao.ru, yulia@iao.ru, vba@iao.ru

Проведено моделирование спектров пропускания тритиевого изотополога НТ¹⁶О тяжелой воды и основных семи изотопологов Н₂О в спектральном диапазоне 0-15000 см⁻¹ при различных концентрациях. Выявлены спектральные интервалы, наиболее подходящие для измерения содержания тритиевого изотополога НТ¹⁶О в испарениях радиоактивной воды.

Тритиевая вода появляется на Земле из различных источников. Тритий образуется в верхней атмосфере в результате ядерных реакций при взаимодействии атомов азота с космическим излучением [1] и с осадками поступает в почву, озера и океаны. Концентрация трития за счет естественных источников крайне мала (не более 7 кг на весь земной шар). Более значимы техногенные источники поступления трития: атомные электростанции и заводы, производящие тритий для нужд промышленности и обороны. Значительное количество трития выбрасывается в атмосферу при авариях на АЭС и ядерных взрывах [2]. Например, авария на АЭС "Фукусима-дайити" (FDNPP) привела к загрязнению окружающей среды на 2,7 ПБк радиоцезия (¹³⁷Cs) и примерно 200–210 ТБк трития (³H). Тритий (³H) — радиоактивный изотоп водорода с периодом полураспада 12,3 года. Из-за высокой подвижности и быстрого разбавления в окружающей среде он редко накапливается, но его мониторинг важен для оценки последствий ядерных аварий. После аварии на FDNPP в окружающую среду попало около 0,2–0,21 ПБк трития. Максимальная концентрация 267,8 Бк/л была зафиксирована в талой воде снега, собранной в 100 км от FDNPP через неделю после аварии, что превышает фоновые уровни 0,5–2 Бк/л в 200 раз [3].

Тритиевая тяжелая вода, как и газообразный тритий являются опасными для всего живого дозообразующими веществами. Поэтому возникает необходимость исследования влияния малых концентраций трития на организм человека. Существуют значительные трудности определения малых концентраций трития из-за методических проблем и стоимости измерительной аппаратуры. В отличие от применяемых в настоящее время методов, основанных на заборе проб и регистрации бета-излучения, спектроскопические методы могут позволить измерять малое содержание НТО неинвазивно и в режиме реального времени.

В работе проведено моделирование спектров пропускания тритиевого изотополога HT^{16}O и основных семи изотопологов H_2O в спектральном диапазоне $0\text{--}15000\text{ см}^{-1}$ при различном отношении концентрации HT^{16}O к концентрации паров H_2^{16}O . Необходимо заметить, что в атмосфере фоновая концентрация тритиевых изотопологов по отношению к содержанию всех изотопологов H_2O составляет всего лишь $4,987 \cdot 10^{-17}$ и $6,235 \cdot 10^{-34}$ для НТО и T_2O , соответственно. Тем не менее, дистанционные спектроскопические методы могут применяться для контроля выбросов с АЭС. Преимуществами таких методов являются высокая чувствительность и возможность работы на расстоянии.

Для поиска спектральных интервалов, наиболее подходящих для детектирования содержания НТО в испарениях радиоактивной воды, сделаны расчеты пропускания для лабораторных условий при длине трассы 250 м. Расчет производился методом line-by-line с использованием данных по параметрам линий поглощения HT^{16}O , представленных на сайте spectra.iao.ru [4,5]. Параметры линий HT^{16}O в [4] были рассчитаны С.А.Ташкуном в диапазоне $0,02\text{--}28750\text{ см}^{-1}$ с использованием программы VTET [6] и поверхностей потенциальной энергии и дипольного момента [7]. На сайте [4] для HT^{16}O кроме центров и интенсивностей линий приводится значение нижнего уровня энергии и колебательно-вращательная идентификация. Значения параметров центров линий в [4] фиксированы для всех переходов HT^{16}O : $\gamma_{\text{air}} = 0.06$, $\gamma_{\text{self}} = 0.3\text{ см}^{-1}/\text{атм.}$ В нашей работе были использованы параметры контура линий, которые были предложены для HD^{16}O в работе [8]. Параметры линий поглощения основных семи изотопологов H_2O взяты из БД HITRAN2020[9].

При моделировании пропускания давление, температура и концентрация H_2O задавалась для условий, близких к атмосферным ($T=294\text{ К}$, $P=1\text{ атм.}$, $P_{\text{H}_2\text{O}}=18800\text{ ppm}$). Спектры пропускания и оптической толщи НТО и H_2O в диапазоне от $0\text{--}15000\text{ см}^{-1}$ приведены на рис. 1. Наши расчеты пропускания показали, что НТО может быть обнаружен в парах тритиевой воды при его содержании $0,01\text{--}0,05\%$ от содержания H_2^{16}O . Наиболее перспективным для детектирования НТО спектральным интервалом является диапазон $2200\text{--}2400\text{ см}^{-1}$, содержащий сильную полосу линий поглощения НТО и слабо перекрывающийся с линиями основных изотопологов H_2O (рис.2). Также в ИК диапазоне имеются узкие спектральные интервалы, содержащие отдельные линии НТО, неперекрывающиеся с линиями H_2^{16}O , которые также могут быть использованы для детектирования содержания НТО (рис. 3).

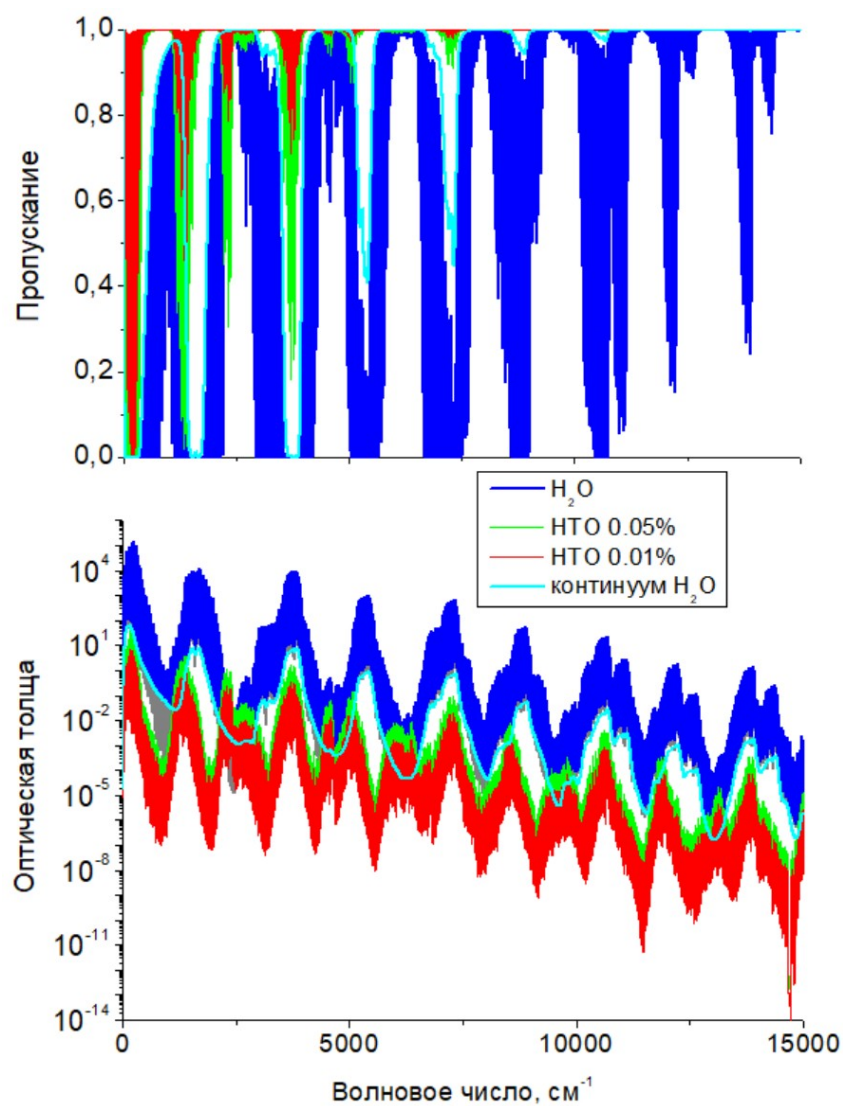


Рисунок 1 Пропускание и оптическая толщина H_2O (семь основных изотопологов), НТО и континуального поглощения H_2O при соотношениях концентраций $\text{HT}^{16}\text{O}/\text{H}_2^{16}\text{O}=0,05\%$ (зеленый график) и $0,01\%$ (красный график).

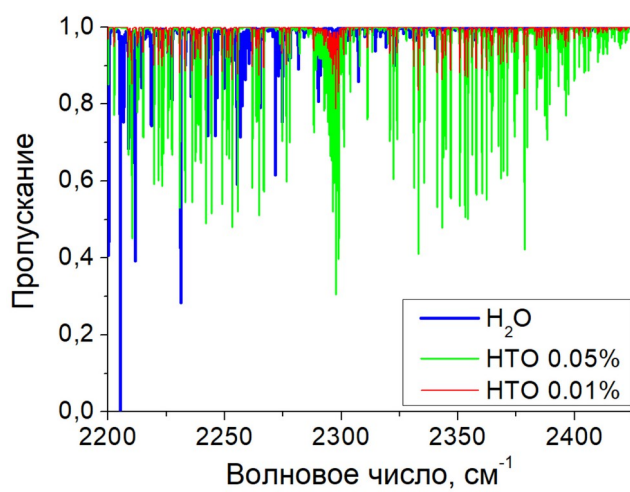


Рисунок 2 – Спектральный интервал, перспективный для определения содержания НТО.

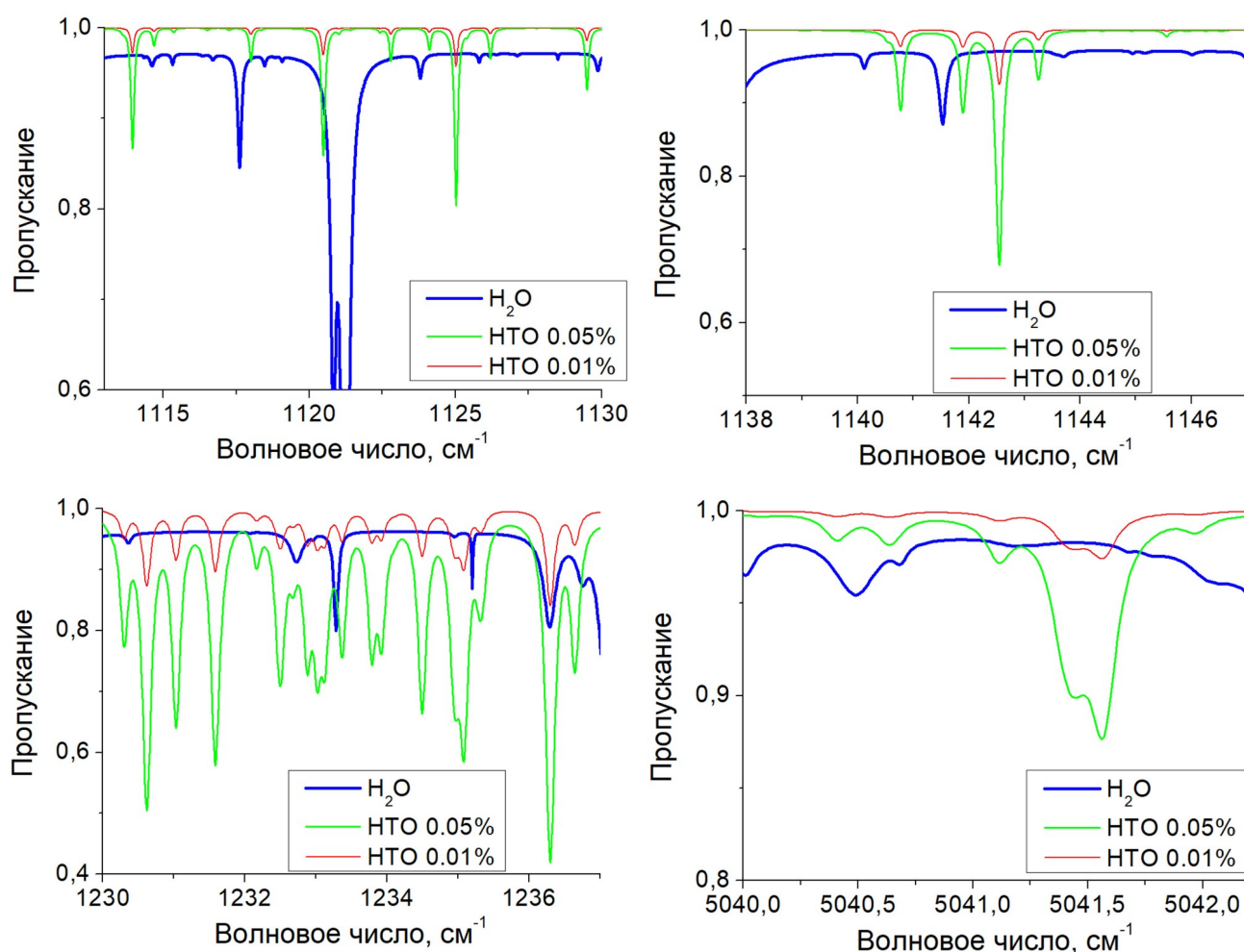


Рисунок 3 – Спектральные интервалы, перспективные для определения содержания НТО.

Авторы выражают благодарность А.Д. Быкову за полезные консультации, С.А. Ташкуну за теоретический расчет HT^{16}O , Ю.Л. Бабинову и С.Н. Михайленко за разработку и поддержание сайта <https://spectra.iao.ru>.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИОА СО РАН.

Литература

1. Шишелова Т.И., Бредгауэр А.В., Мухтарова А.А. Виды воды: H_2O , T_2O , D_2O // Успехи современного естествознания. 2010. № 10. С. 66-67.
2. <https://www.quarta-rad.ru/useful/ekologia-zdorovie/tritievaya-voda/>
3. Khemruthai Kheamsiri, Donovan Anderson, Hirofumi Tazoe, Kazusa Okada, Nao Otashiro, Haruka Kuwata, Hideki Kakiuchi, Masahiro Hosoda, Tibor Kovács, Shinji Tokonami, Naofumi Akata, Elevated levels of tritium in surface water collected in the immediate aftermath of the Fukushima accident // Environmental Pollution. 2025, 126040, <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2025.126040>.
4. <https://spectra.iao.ru/molecules>

5. Михайленко С.Н., Бабилов Ю.Л., Головки В.Ф. Информационно-вычислительная система "Спектроскопия атмосферных газов". Структура и основные функции // Оптика атмосферы и океана. 2005. Т. 18, № 9. С. 765-776.
6. Schwenke D. W. Variational calculations of rovibrational energy levels and transition intensities for tetratomic molecules // The Journal of Physical Chemistry. 1996. V.100 (8), P.2867-2884 DOI: 10.1021/jp9525447
7. Schwenke D.W., Partridge H. The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive ab initio calculations and experimental data // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. N 1. P. 4618–4639.
8. Voronin B.A., Lavrentieva N.N., Lugovskoy A.A., Bykov A.D., Starikov V.I., Tennyson J. Self- and Air-Broadening Coefficients of HD¹⁶O Spectral Lines // Atmospheric and Oceanic Optics. 2012. V. 25. N.1. P. 27–34.
9. [Gordon, I.E.](#), [Rothman, L.S.](#), [Hargreaves, R.J.](#), et al. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database// Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2022. V. 277(10794). P. 1-82.