ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ТРИТИЕВОГО ИЗОТОПОЛОГА $T_2{}^{18}O$ В ВОДЯНОМ ПАРЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

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

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

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

Проведено моделирование пропускания излучения с целью определения чувствительности метода ИК спектроскопии для детектирования содержания тритиевого изотополога $T_2{}^{18}O$ в испарениях радиоактивной воды. Для линий поглощения $T_2{}^{18}O$ рассчитаны коэффициенты уширения воздухом и самоуширения. Определены спектральные интервалы, наиболее подходящие для обнаружения $T_2{}^{18}O$ в радиоактивном водяном паре.

Ключевые слова: радиоактивные изотопологи водяного пара, тритий, тяжелая вода

Тритий и стабильные изотопологи кислорода часто используются для анализа биологических объектов [1-3]. Довольно популярны для этого дважды меченые молекулы воды. Дважды меченые молекулы H_2O – это молекулы, в которых наиболее распространенные водород - протий (^1H) и кислород (O^{16}) заменены на тяжелые изотопы. Обычный водород ^1H заменяется на дейтерий $^2H(D)$ и/или тритий $^3H(T)$, а кислород ^{16}O заменяется на более тяжелый изотоп ^{17}O или ^{18}O. В виду того, что из организма млекопитающих выделение кислорода имеет два выхода – через выдох (CO_2) и жидкость, а водорода только через жидкость, то образуются два различных канала, и дважды меченые молекулы воды дают обширную информацию исследователям. Так, тяжелый тритиевый изотополог $T_2{}^{18}O$ используется для изучения метаболизма животных [2,3].

В составе земной атмосферы и гидросферы естественное содержание изотопа ^{18}O составляет приблизительно 0,2% от общего содержания (пула) кислорода. В океанической воде на одну молекулу ^{18}O приходится 500 молекул обычной воды. Естественное содержание трития T в природе мало, значительное количество трития образуется в процессе эксплуатации ядерных реакторов. В радиоактивной воде реакторов совместно с другими изотопологами H_2O содержится тритиевый изотополог $T_2{}^{18}O$, и представляет интерес оценить возможность обнаружить его в испарениях радиоактивной воды методом ИК спектроскопии. Для того, чтобы сделать такие оценки, мы провели моделирование пропускания излучения полинейным методом с учетом поглощения изотопологами водяного пара и поиск спектральных интервалов, наиболее подходящих для обнаружения $T_2{}^{18}O$, при варьировании концентрации тритиевых изотопологов H_2O.

Экспериментальные исследования спектров $T_2{}^{18}O$ очень редки. В настоящее время известна работа японских авторов [4], посвященная экспериментальным спектрам $T_2{}^{18}O$,

измеренным на ИК спектрометре в диапазонах 850-1100 см$^{-1}$ и 2150-2450 см$^{-1}$. В этой работе в диапазоне 862-1094 см$^{-1}$ приводятся около 200 частот переходов, относящихся к полосе ν_2 . Вращательное квантовое число полного момента принимает значение от J_{min}=1 до J_{max}=15. Имеются теоретические расчеты [5,6] спектров некоторых тритиевых изотопологов H_2O, в том числе $T_2{}^{18}O$ в спектральном диапазоне от 0,2 до 14713 см$^{-1}$. Поэтому для моделирования пропускания мы использовали теоретические параметры линий тритиевых изотопологов водяного пара (интенсивность и положение центра линии, нижний уровень энергии) из [6], а параметры уширения контура линий $T_2{}^{18}O$ (полуширина линии в случае уширения воздухом и в случае самоуширения) рассчитали по методу *JJ'*-зависимости, описанному в нашей работе [7]. Коэффициент температурной зависимости полуширины вычислялся согласно данным из таблицы [8]. Параметры линий нерадиоактивных изотопологов H_2O взяты из спектроскопической базы данных HITRAN2024 [9]. Для описания континуального поглощения H_2O применялась модель MT_CKD.

Для поиска спектральных интервалов, наиболее подходящих для обнаружения $T_2{}^{18}O$ в радиоактивном водяном паре, сделаны расчеты пропускания для условий, близких к атмосферным (P=1 атм, P_{H2O}=18800 ppm, t=294^{o}K). Длина трассы 250 м. Концентрации тритиевых изотопологов задавались отношением их содержания к содержанию основного изотополога $H_2{}^{16}O$ и варьировались. Спектральное разрешение 0,01 см$^{-1}$. Спектры пропускания и оптической толщи тритиевых изотопологов H_2O приведены на рис. 1 и 2.

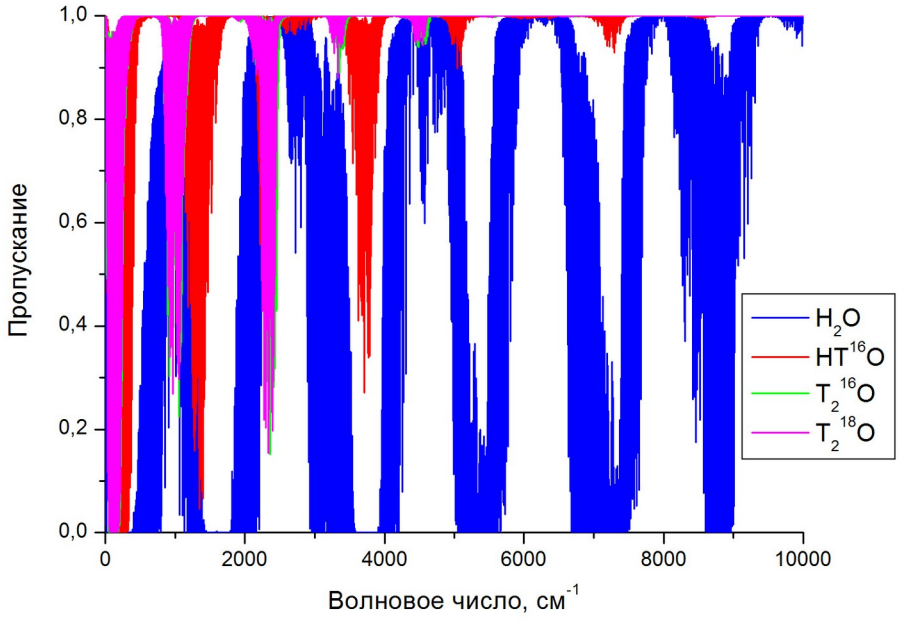


Рис. 1 Пропускание тритиевых изотопологов $HT^{16}O$, $T_2{}^{16}O$ и $T_2{}^{18}O$ при соотношении их содержания к содержанию основного изотополога $H_2{}^{16}O$ 0,05% и пропускание нерадиоактивных изотопологов H_2O ($H_2{}^{16}O$, $H_2{}^{18}O$, $H_2{}^{17}O$, $D_2{}^{16}O$, $HD^{16}O$, $HD^{18}O$, $HD^{17}O$, синий график) при их природном содержании

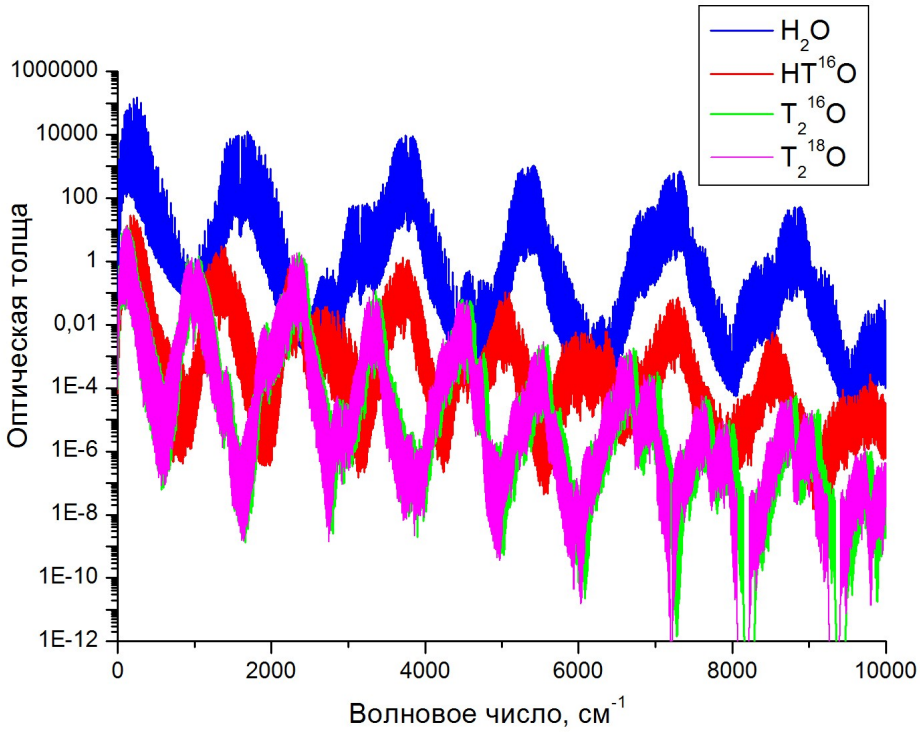


Рис. 2 Оптическая толща тритиевых изотопологов $HT^{16}O$, $T_2{}^{16}O$ и $T_2{}^{18}O$ при отношении их содержания к содержанию $H_2{}^{16}O$ 0,05% и суммарная оптическая толща нерадиоактивных изотопологов H_2O ($H_2{}^{16}O$, $H_2{}^{18}O$, $H_2{}^{17}O$, $D_2{}^{16}O$, $HD^{16}O$, $HD^{18}O$, $HD^{17}O$, синий график) при их природном содержании

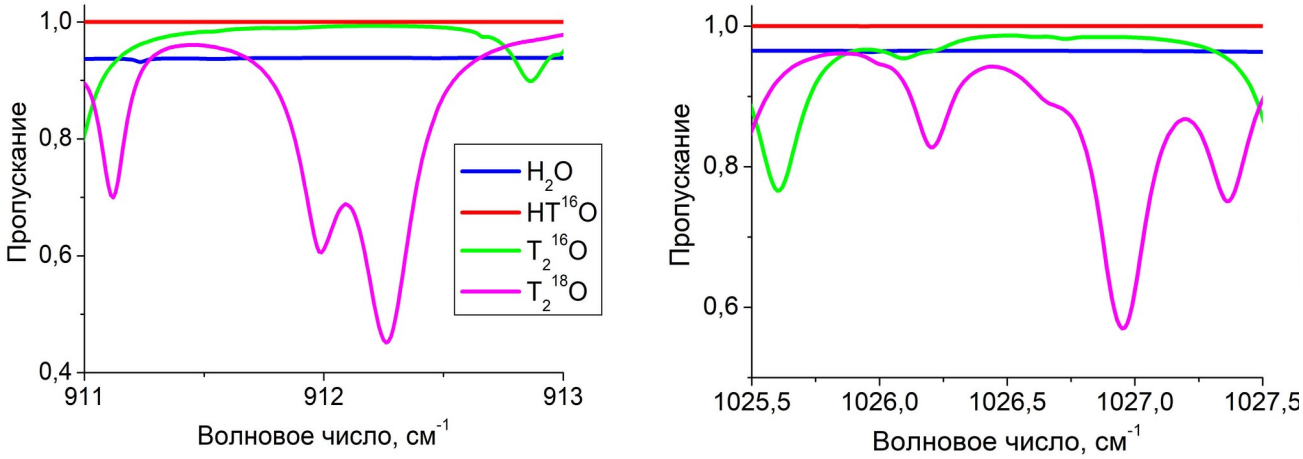


Рис. 3 Спектральные диапазоны, перспективные для детектирования $T_2{}^{18}O$. Отношение содержания $HT^{16}O$, $T_2{}^{16}O$ и $T_2{}^{18}O$ к содержанию $H_2{}^{16}O$ 0,05%.

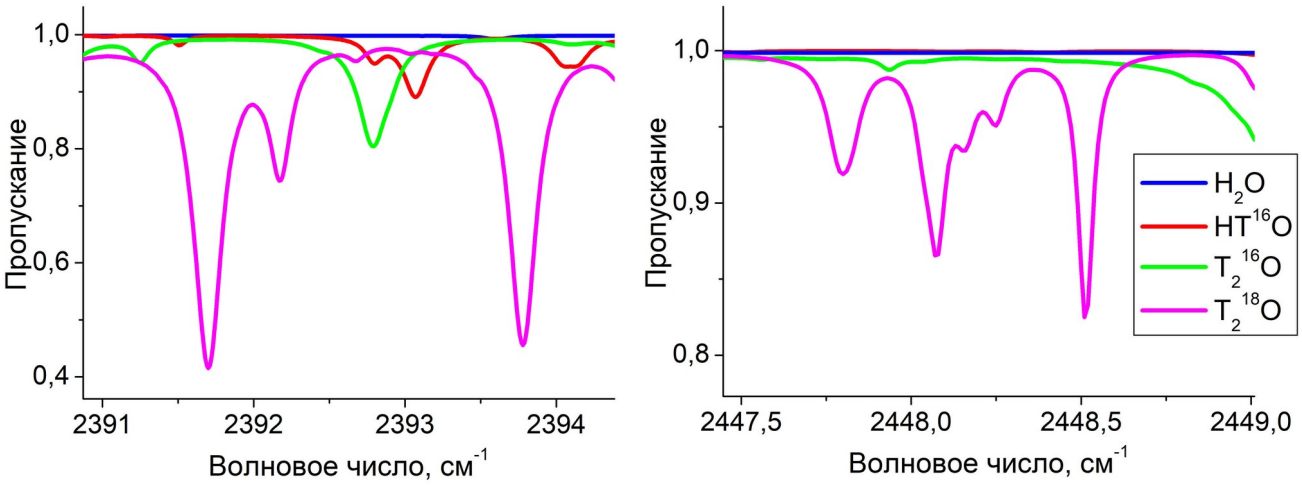


Рис. 4 Спектральные диапазоны, перспективные для детектирования $T_2{}^{18}O$. Отношение содержания $HT^{16}O$, $T_2{}^{16}O$ и $T_2{}^{18}O$ к содержанию $H_2{}^{16}O$ 0,05%.

С учетом перекрывания линий поглощения изотопологов H_2O и достаточной величины поглощения $T_2{}^{18}O$ были найдены узкие спектральные интервалы, которые наибольше подходят для обнаружения $T_2{}^{18}O$. Примеры таких интервалов показаны на рис. 3 и 4.

Выявлено, что наиболее перспективные интервалы для детектирования $T_2{}^{18}O$ расположены в спектральном окне прозрачности атмосферы 8-12 мкм: 911-913 $см^{-1}$, 1026-1028 $см^{-1}$, 1078-1081 $см^{-1}$ (рис. 3). Также имеются эффективные интервалы в другой области: 2240-2242 $см^{-1}$, 2276-2278 $см^{-1}$, 2391-2394 $см^{-1}$, 2447-2449 $см^{-1}$.

Измерения спектров для определения содержания $T_2{}^{18}O$ могут быть выполнены на Фурье-спектрометрах, лазерных диодных спектрометрах или с использованием высокоточной CRDS спектроскопии.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИОА СО РАН.

1. *Thomas D. W., Brigham R. M., Lapierre H.* Field metabolic rates and body mass changes in common poorwills (Phalaenoptilus nuttallii: Caprimulgidae) // Écoscience. 1996. V.3 №1. P.70–74.
2. *Green B., Dryden G., Dryden K.* Field energetics of a large carnivorous lizard, Varanus rosenbergi // Oecologia. 1991. V.88. P. 547–551.
3. *Robinson M.D.* Summer field energetics of the Namib desert dune lizard Aporosaura anchietae (Lacertidae), and its relation to reproduction //Journal of Arid Environments. 1990. №18. P.207-215.
4. *Kanesaka I., Tsuchida M., Kawai K., Takeuchi T.* The IR spectrum of $T_2{}^{18}O$ // J. Mol. Spectrosc. 1984. V.104. №2. P.405-413.
5. *Михайленко С.Н., Бабиков Ю.Л., Головко В.Ф.* Информационно-вычислительная система "Спектроскопия атмосферных газов". Структура и основные функции // Оптика атмосферы и океана. 2005. Т.18. №9. С. 765-776.
6. https://spectra.iao.ru/molecules

7. *Voronin B.A., Lavrentieva N.N., Mishina T.P., Chesnokova T.Yu., Barber M.J., Tennyson J.* Estimate of the *J'J"* dependence of water vapor line broadening parameters // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2010. V.111. Iss. 15. P.2308–2314.
8. *Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., et al* The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2005. V.96. Iss.2. P.139–204.
9. *Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J. et al.* The HITRAN2024 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2026. V.353. P.109807.