



30 января 2018 г.

Пресс-релиз

Сибирские учёные разработали эффективный метод для изучения молекул воды

Структура воды, несмотря на многочисленные исследования, продолжает вызывать интерес учёных. Сотрудники [Института автоматики и электрометрии СО РАН](#) (г. Новосибирск) и [Института сильноточной электроники СО РАН](#) (г. Томск) решили изучить молекулы воды методами широкополосной терагерцовой спектроскопии. [Статья об этом](#) вышла в журнале *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*.

Вода — один из самых важных элементов на Земле. В молекулу воды входит два атома водорода. Ядро каждого из атомов — протон — имеет специфическое физическое свойство, которое называется спин. Молекула воды, в которой спины двух протонов сонаправлены, называется ортоизомером. Если же они направлены навстречу друг другу, то мы имеем дело с параизомером.

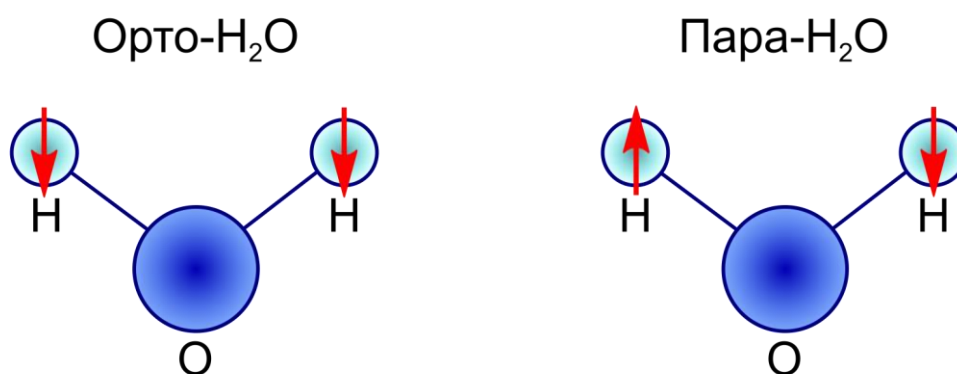


Рис. 1. Молекула воды в двух спиновых состояниях

«Наше знание о свойствах спиновых изомеров воды ещё не полно, — поясняет один из авторов статьи кандидат технических наук Александр Анатольевич Мамрашев. — Эти два вида молекул имеют почти идентичные физические и химические свойства, поэтому их трудно отделить друг от друга. Также трудно осуществить превращение одного изомера в другой. В нормальных условиях концентрации изомеров молекул воды относятся как 3:1. Основная задача в рамках гранта Российского научного фонда № 17-12-01418, который мы сейчас выполняем, — изменить это отношение в ту или другую сторону, создав тем самым обогащение одного из изомеров. Далее можно будет исследовать свойства и применения спиновых изомеров воды».

Чтобы следить за концентрацией каждого из изомеров, необходим эффективный метод их детектирования.

Учёные ИАиЭ СО РАН и ИСЭ СО РАН разработали эффективный метод измерения содержания орто- и параизомеров паров воды, присутствующих в воздухе. Дело в том, что спектры поглощения этих видов молекул отличаются друг от друга: следуя законам квантовой статистики, два изомера воды находятся в различных вращательных состояниях, и это проявляется в инфракрасных и терагерцовых спектрах поглощения.



Для измерения спектров поглощения на вещество направляется поток излучения, часть которого проходит практически без взаимодействия с субстанцией, а часть поглощается ею. В данном исследовании специалисты использовали импульсное терагерцовое излучение и спектрометр, который позволяет измерять поглощение в широком диапазоне частот от 0,1 до 2,7 ТГц. Измеряя величину поглощения отдельных линий, принадлежащих орто- и пара-Н₂О, в терагерцовом диапазоне, можно определить концентрацию молекул каждого из изомеров.

Преимуществом разработанного метода по сравнению с методами классической узкополосной спектроскопии является возможность одновременного измерения нескольких линий поглощения молекул воды в одинаковых физических условиях без перестройки частоты излучения.

Процедура измерения отношения орто- и параизомеров молекул воды включала следующие этапы. С помощью созданного в [лаборатории информационной оптики ИАиЭ СО РАН](#) широкополосного спектрометра измерялись терагерцовые спектры в двух средах: в чистом азоте при атмосферном давлении и в воздухе, содержащем пары воды. Их сопоставление давало экспериментальный спектр поглощения паров воды, который сравнивался с теоретическим, рассчитанным с использованием данных из международной базы HITRAN.

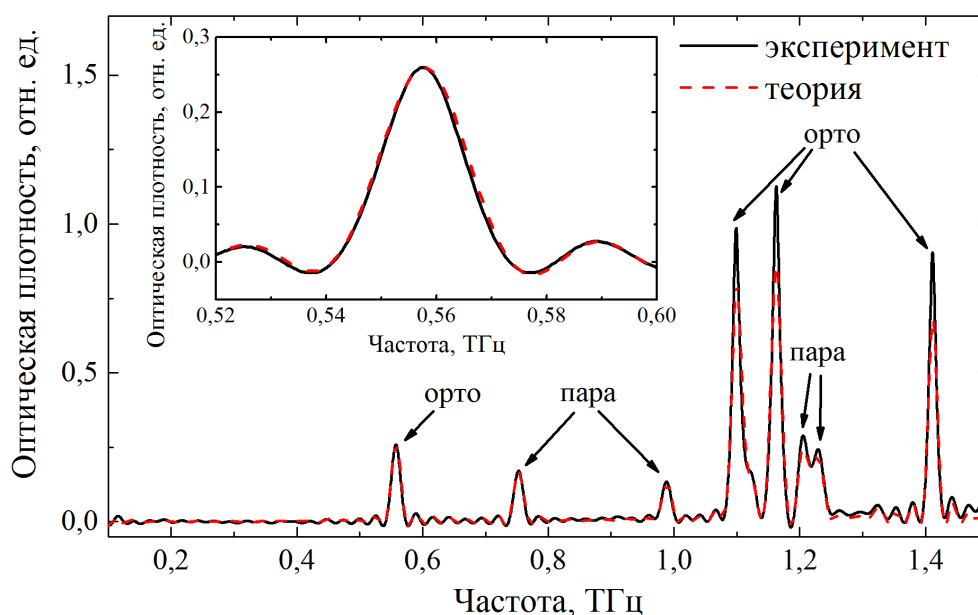


Рис. 2. Сравнение экспериментального и теоретического спектров поглощения паров воды в атмосфере

Сопоставление теоретических спектров с экспериментальными позволило определить отношение концентраций орто- и параизомеров молекул воды. По измерениям в диапазоне 0,15—1,05 ТГц их отношение составило $3,03 \pm 0,03$. Полученное значение согласуется с теоретическим значением, равным 3 в равновесных условиях.

Результат доказывает работоспособность предложенного метода и открывает перспективы его использования для исследования обогащения ядерных спиновых изомеров молекул воды в газовой фазе. Обогащённые изомеры могут найти применение в задачах магнитной томографии и для исследования процессов с участием молекул воды в космосе.