

Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН

---

# Диодно-лазерный спектрометр для диагностики орто/пара состава водяного пара

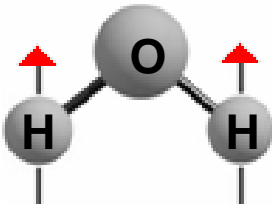
П.О. Капралов, В.Г. Артёмов, А.М. Макуренок,  
В.И. Тихонов, А.А. Волков

октябрь 2008г.

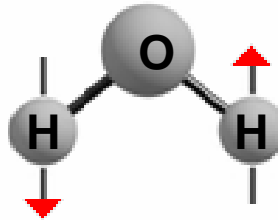


# СПИНОВЫЕ ИЗОМЕРЫ МОЛЕКУЛ ВОДЫ

ОРТО

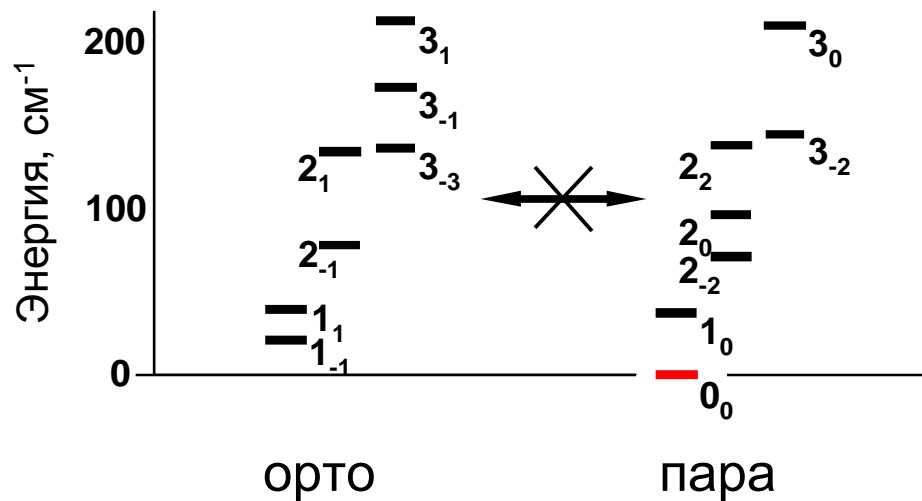


ПАРА



В равновесии: **3:1**

Нижние вращательные энергетические уровни

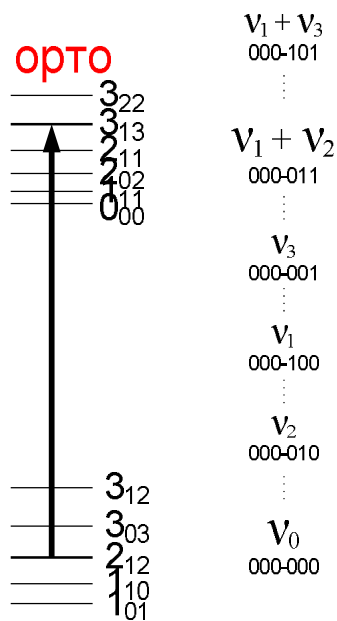


Водяной пар является смесью двух различных газов: орто-воды и пара-воды

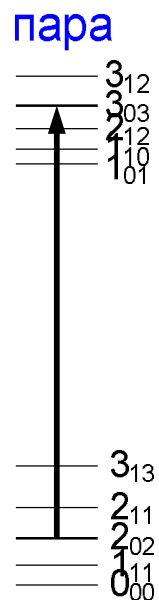
Каждая спектральная линия соответствует переходу между энергетическими уровнями либо только орто, либо только пара-молекул.



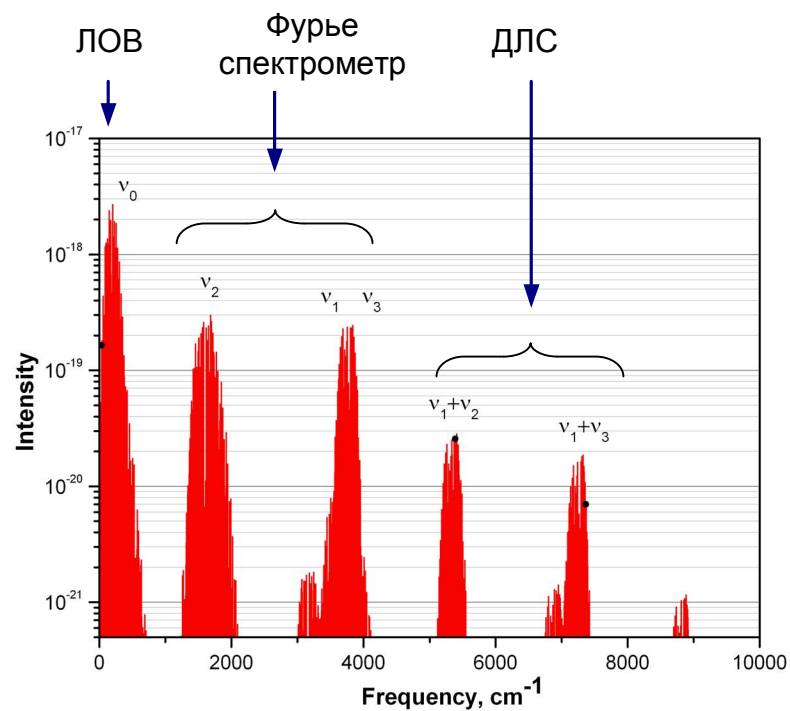
# ДИОДНО-ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ВОДЯНОГО ПАРА



5396.54  $\text{cm}^{-1}$

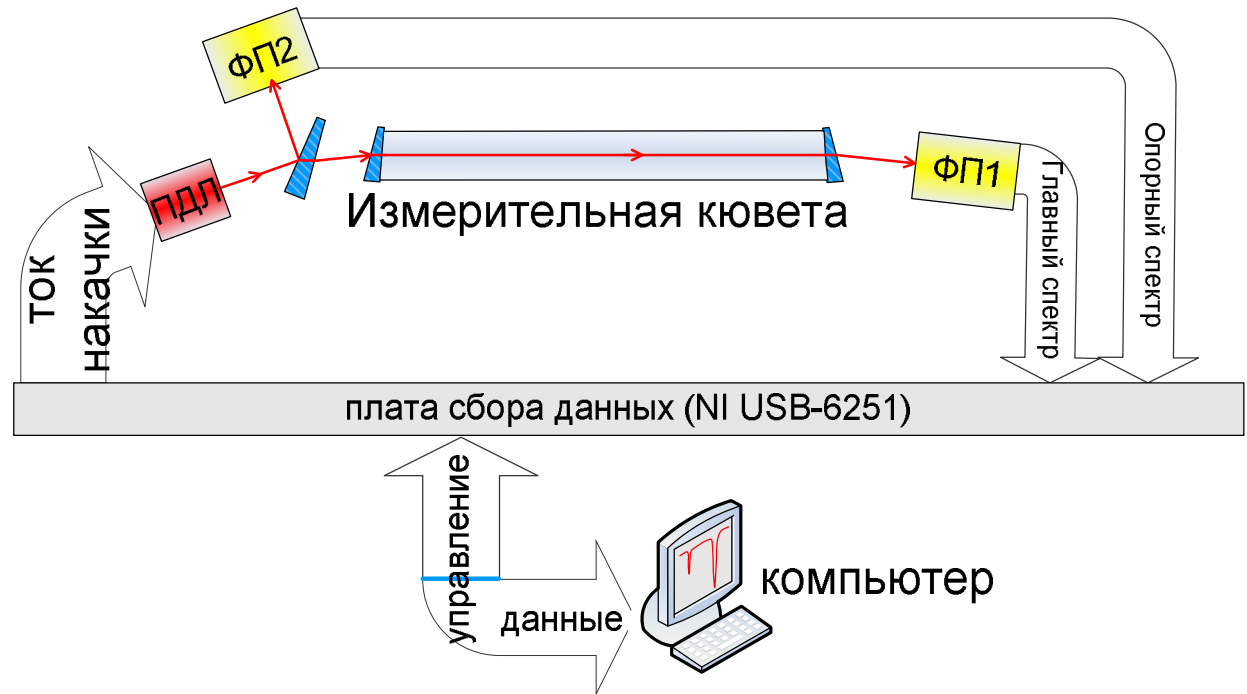
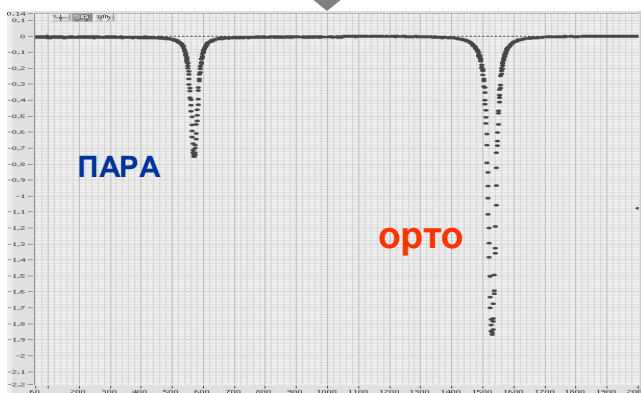
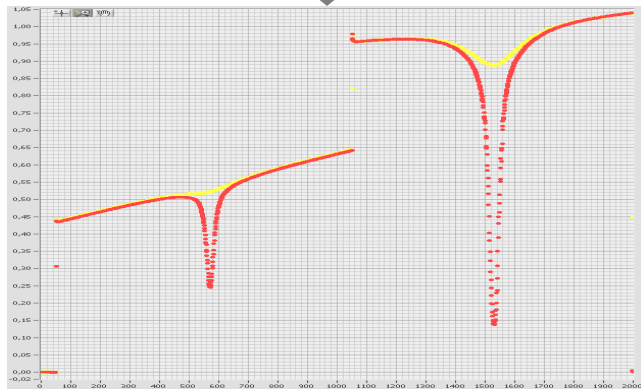
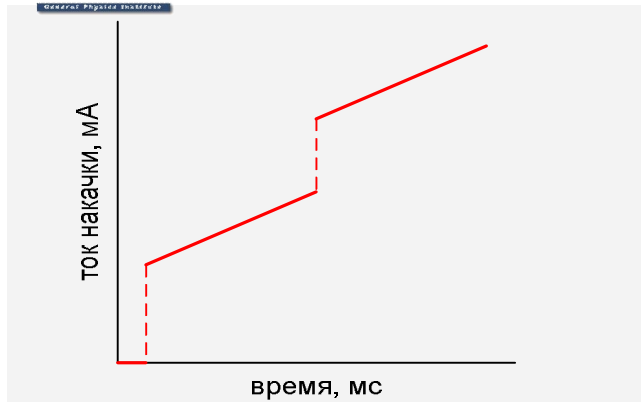


5393.65  $\text{cm}^{-1}$





# ПРИНЦИП РАБОТЫ СПЕКТРОМЕТРА

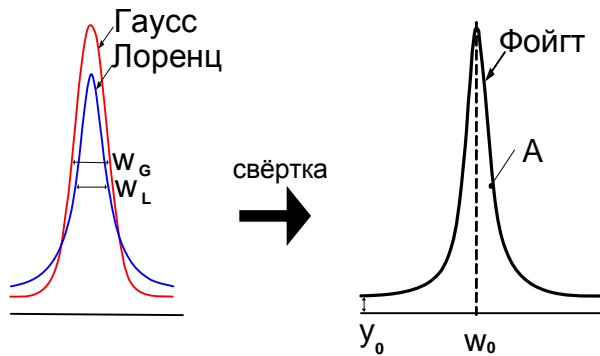
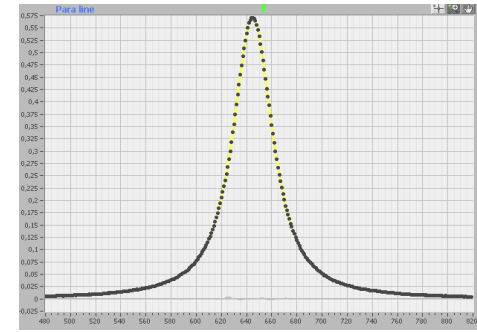
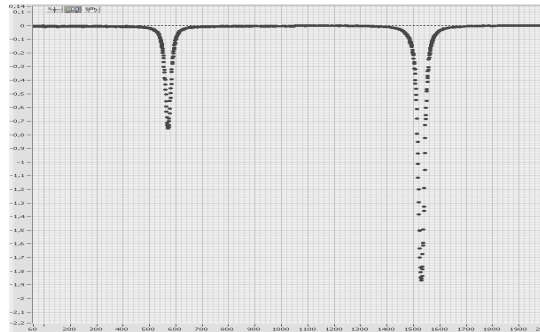
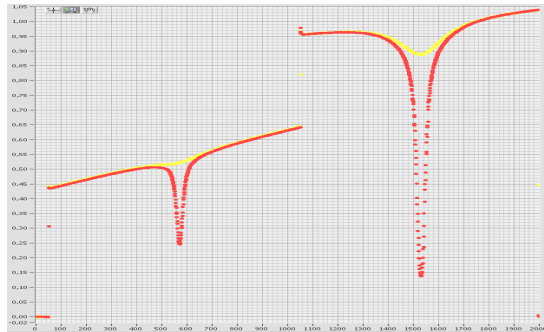


## Получаемая информация:

- Ширина линий поглощения
- Интегральные интенсивности линий
- Орто/пара отношение



# ОБРАБОТКА СПЕКТРОВ



$$V(\omega) = y_0 + A \frac{2\ln 2}{\pi^{3/2}} \frac{w_L}{w_G^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\left(\sqrt{\ln 2} \frac{w_L}{w_G}\right)^2 + \left(\sqrt{4\ln 2} \frac{\omega - \omega_0}{w_G} - t\right)^2} dt.$$



$$V(\nu) = V(\nu_0) \left[ (1 - k_1) \exp(-0.693 \cdot k_2^2) + k_1 / (1 + k_2^2) + 0.016(1 - k_1)k_1 \exp(-0.0841 \cdot k_2^{2.25}) - 1 / (1 + 0.021 \cdot k_2^{2.25}) \right],$$

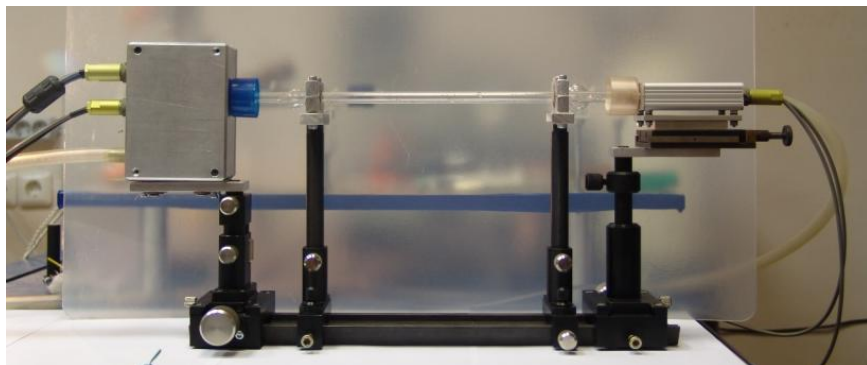
где:  $k_1 = w_L / w_V$ ,  $k_2 = (\nu - \nu_0) / w_V$ ,

$$V(\nu_0) = A / [2w_V (1.065 + 0.447k_1 + 0.058k_2^2)],$$

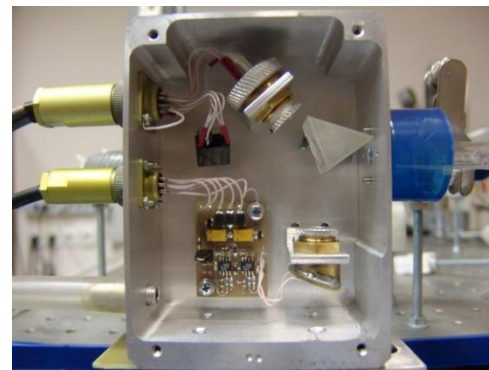
где:  $w_V = 0.5346w_L + \sqrt{0.2166w_L^2 + w_D^2}$ .



# ВНЕШНИЙ ВИД СПЕКТРОМЕТРА



Оптическая часть спектрометра:  
источник излучения на основе ПДЛ,  
измерительная кювета и фотоприёмник.



ПДЛ, светоделительная призма  
и фотоприёмник опорного сигнала  
с усилителем.



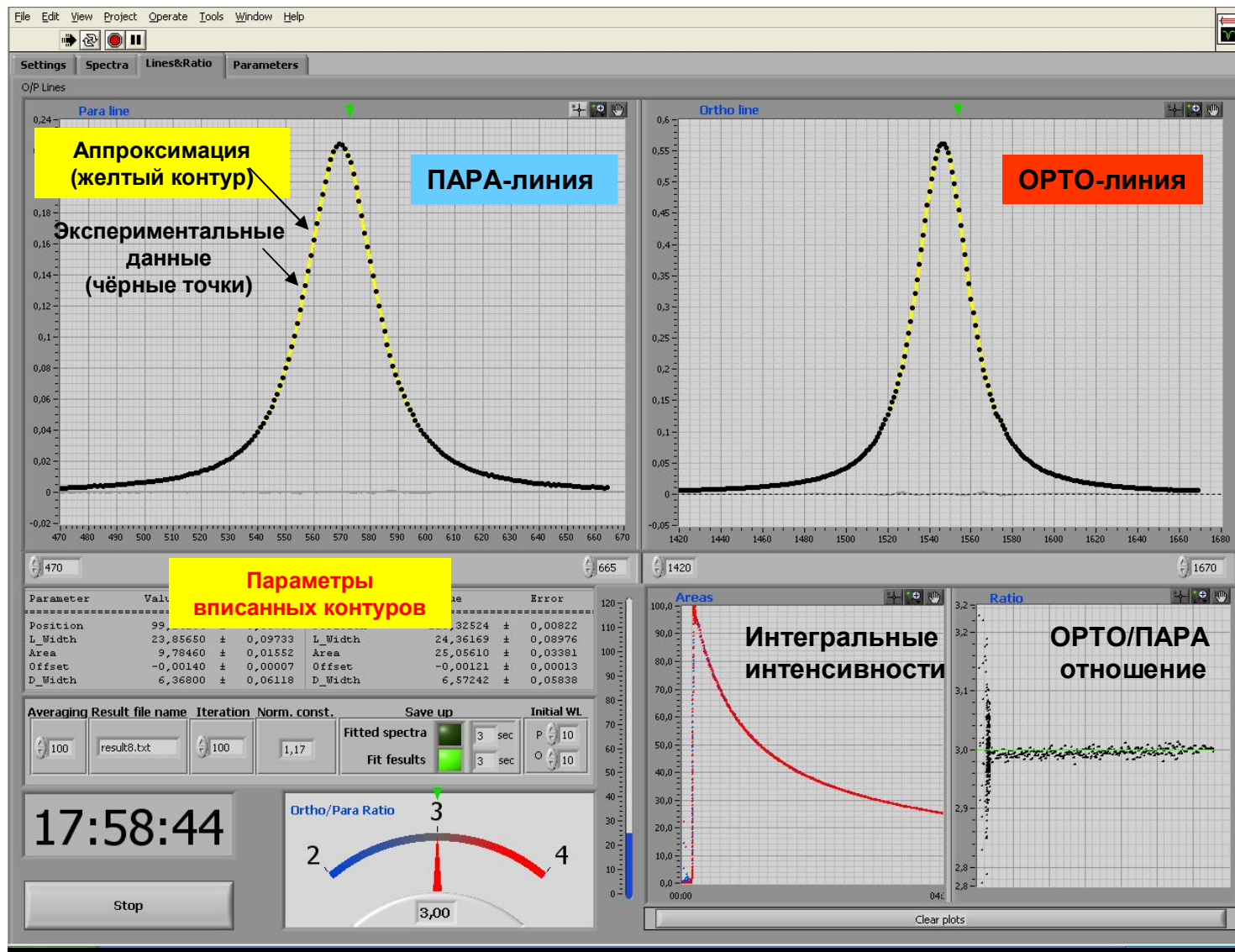
Плата сбора данных National Instruments  
и блок управления и защиты ПДЛ.

## Основные характеристики

- Рабочий диапазон давлений  
водяного пара: 0.01-20 Torr
- Диапазон абсолютного давления измеряемой  
газовой смеси: 0.01 – 1000  
Torr
- Погрешность измерения орто/пара  
отношения ±1%
- Скорость измерения 3 изм./с

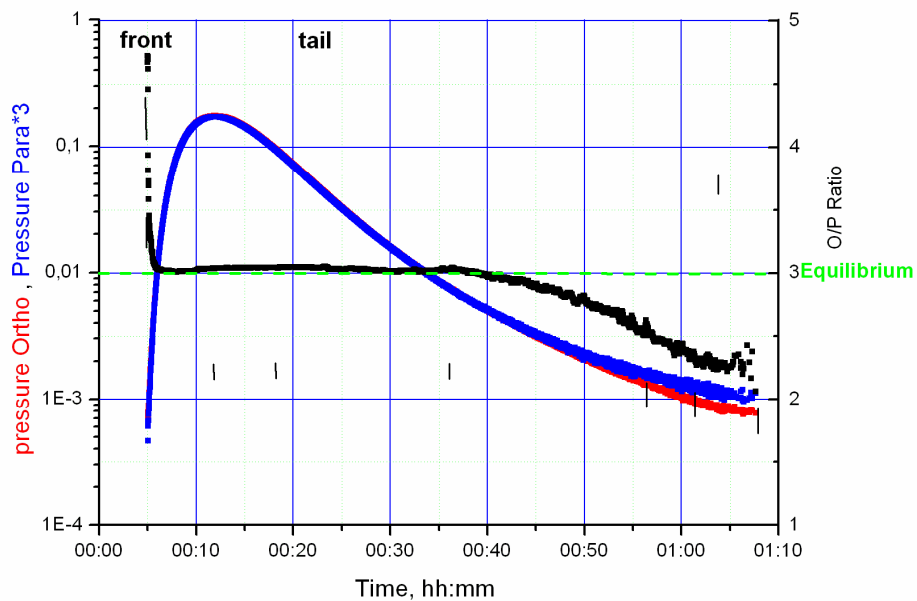
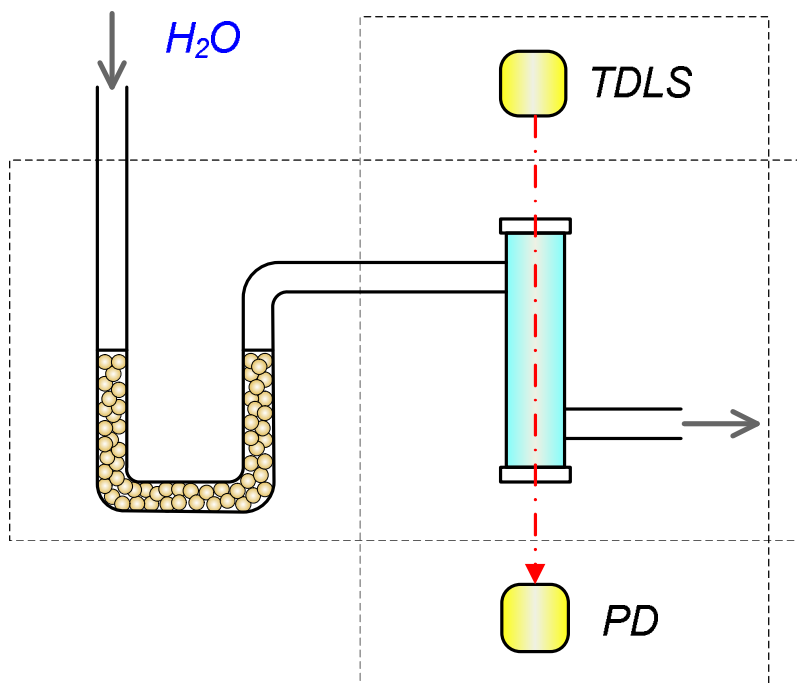


# ПРОГРАММНЫЙ ИНТЕРФЕЙС





# ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ СПИНОВЫХ ИЗОМЕРОВ ВОДЫ

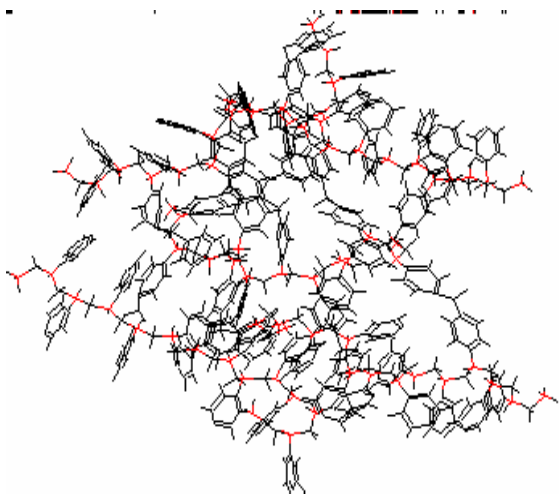
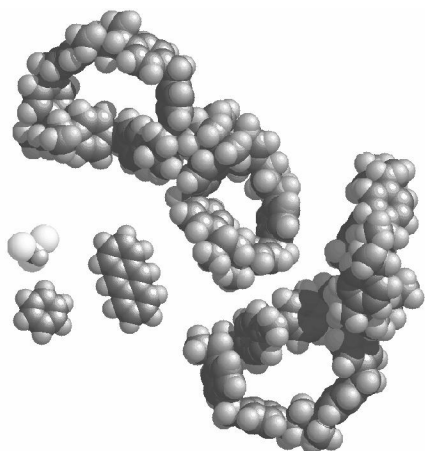




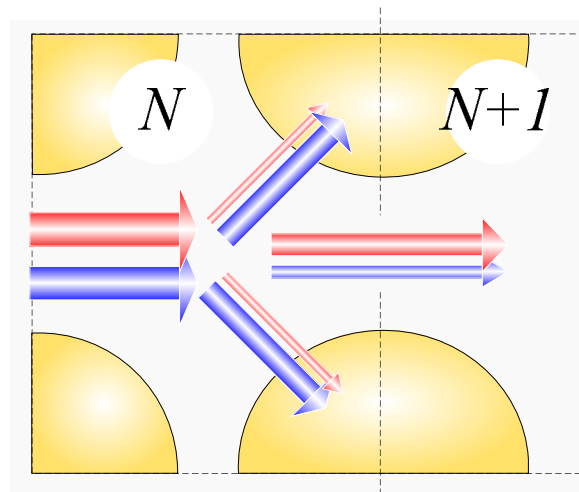


# СЕЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА

## Структура адсорбента MN-200



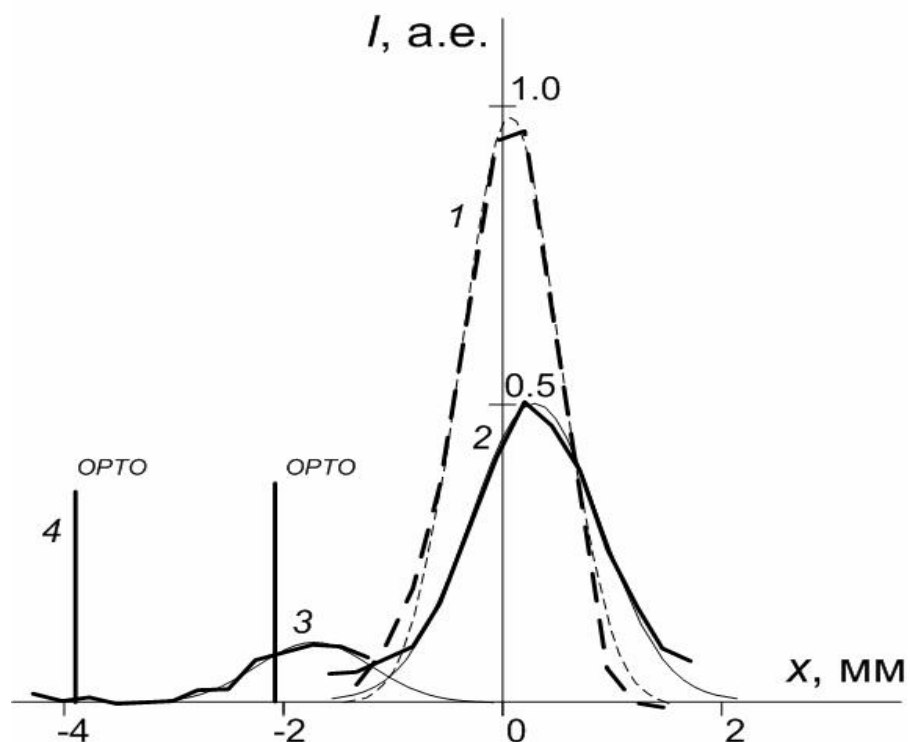
## Взаимодействие с водяным паром



- Фактором спиновой *орто/пара* селективности является паразитный для идеальной хроматографии процесс неодинаковой диффузии спин-изомеров молекул воды внутри адсорбента.



# СПИН-СЕЛЕКТИВНАЯ СОРТИРОВКА МОЛЕКУЛ ВОДЫ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

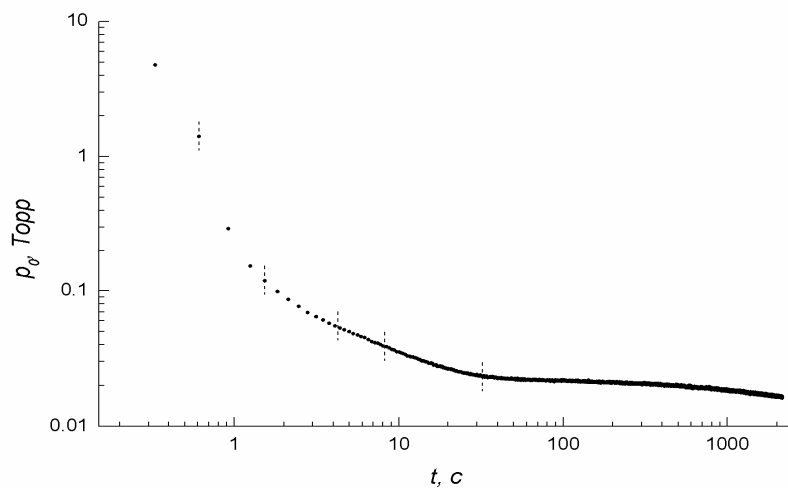
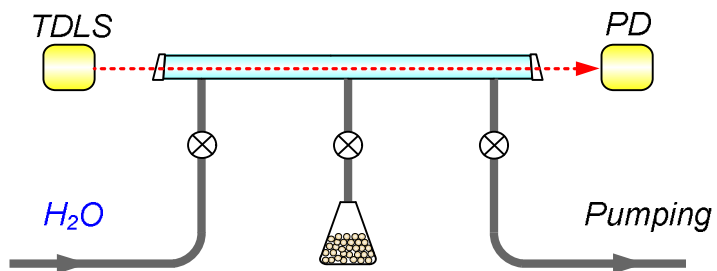


Пучки *орто*- и *пара*- молекул воды, разделенные неоднородным электрическим полем (схематическое изображение данных работы R. Moro, J. Bulthuis, J. Heinrich, and V. V. Kresin, Phys. Rev. A, **75**, 013415 (2007) ).

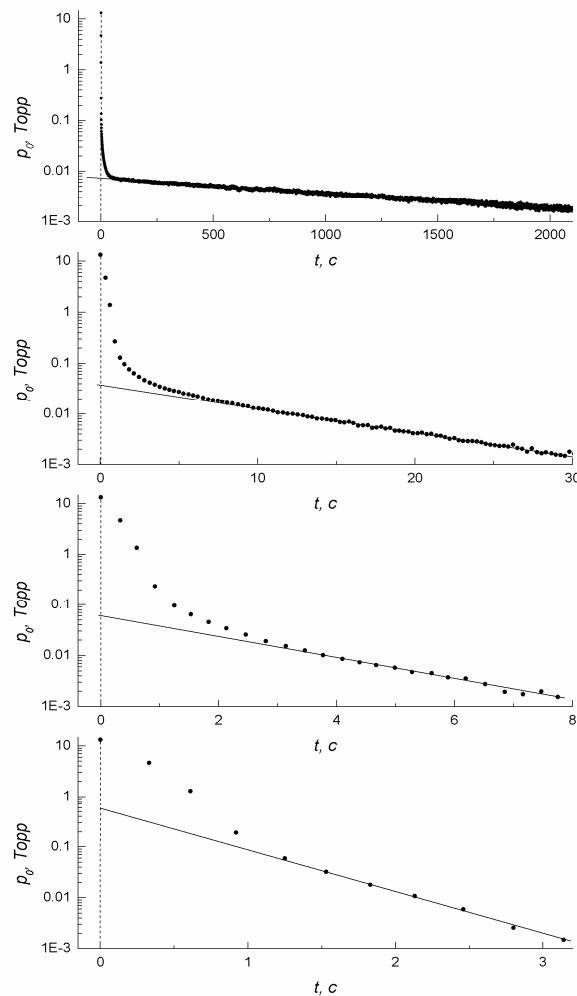
Пики 1-3 – экспериментально измеренные интенсивности потоков молекул воды, пропущенных через квадрупольный конденсатор, на расстоянии 712 мм от выхода. 1 – исходный пучок в нулевом электрическом поле, 2 и 3 – разделенные компоненты при поле на пластинах 20 кВ. Контур 3 – молекулы воды с уровня 1,1,1 (*орто* молекулы), вертикальный штрих – теоретическое ожидание. 4 - теоретическое ожидание для поля 27.5 кВ. Контур 2 – пучок, лишенный молекул  $1, \pm 1, 1$  (*пара* обогащенный до уровня 1.7:1).



# ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФфуЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ



Исходная кривая спада давления над поверхностью адсорбента





# ВЫВОДЫ

---

Данный диодно-лазерный спектрометр используется в экспериментах по разделению орто/пара изомеров водяного пара. Высокая точность и скорость измерений, широкий диапазон рабочих давлений анализируемого водяного пара и полностью автоматическая работа позволяют вести долговременный мониторинг орто/пара состава водяного пара.

• Прибор также может быть использован для исследований широкого круга физических и химических процессов с участием молекул воды:

- сорбционная способность адсорбентов (изотермы сорбции)
- процессы стационарной и нестационарной сорбции (хроматография)
- динамические процессы массопереноса в пористых твердых матрицах и жидкостях (фильтрация)
- фазовые диаграммы водных растворов
- активность воды и влагосодержание в биотканях, продуктах питания, косметике
- процессы растворения, испарения, сублимации кристаллизации
- процессы гидратации, набухания, затвердевания, сушки
- процессы коррозии, окисления, горения
- процессы димеризации, полимеризации, кластерообразования, *смогообразования*
- процессы изотопного (протонного) обмена, спин-конверсии
- *химические, биохимические, каталитические реакции с участием воды*
- газофазные реакции, селективные по спиновым состояниям реагентов
- L-D хиральность биологических молекул
- процессы электрокинетики (осмос, форез) и фотосинтеза
- фрактальность строения веществ и процессов