

## ИССЛЕДОВАНИЕ СИЛ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ HCN В АСТРОНОМИЧЕСКИХ СРЕДАХ

М. Э. Ожиганов, Г. С. Федосеев, М. Г. Медведев, В. М. Картеева,  
Р. С. Накибов, А. С. Трясцина, У. А. Сапунова, А. И. Васюнин  
*Уральский федеральный университет*

Запуск в космос орбитальных телескопов значительно упростил поиск молекул в конденсированной фазе, колебания которых активны в инфракрасном (ИК) диапазоне. Среди данных молекул особый интерес представляет циановодород (HCN). Это вещество присутствует во многих астрономических средах и представляет собой возможный прекурсор биологических соединений. В данной работе получены спектры конденсированного HCN в среднем ИК-диапазоне в смесях с H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>3</sub>OH и в смеси H<sub>2</sub>O:NH<sub>3</sub> при различных концентрациях HCN; измерены силы полос поглощения HCN в данных средах, необходимые для количественного определения лучевой концентрации HCN по данным астрономических наблюдений.

## HCN BAND STRENGTHS STUDY IN THE INTERSTELLAR ICE ANALOGUES

M. E. Ozhiganov, G. S. Fedoseev, M. G. Medvedev, V. M. Karteeva,  
R. S. Nakibov, A. S. Tryastsina, U. A. Sapunova, A. I. Vasyunin  
*Ural Federal University*

The orbital telescopes have significantly simplified searching of the molecules in the condensed phase with active vibrations in the infrared, particularly hydrogen cyanide (HCN). This compound is found in numerous astronomical environments and can be a precursor to biological species. In this study, we acquired spectra of condensed HCN in the mid-IR range into mixtures of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>3</sub>OH and a mixture of H<sub>2</sub>O:NH<sub>3</sub> at varying concentrations of HCN. We measured the band strengths of HCN in these mediums, which are crucial for quantitatively determining column density of HCN based on astronomical observations.

## Введение

HCN обнаружен в газовой фазе в разнообразных вземных средах внутри Солнечной системы и за ее пределами в межзвездной среде [1]. Интерес к HCN в астрохимии и астробиологии обусловлен возможностью протекания химических реакций с участием HCN, в результате которых образуются такие биологические молекулы, как аденин [2]. Сейчас достоверно известно, что в молекулярных облаках основную массу молекул, отличных от водорода, составляют H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, N<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> и CH<sub>4</sub>, находящиеся в основном в конденсированной фазе на поверхности силикатных и углеродистых частиц [3]. В свете этого необходимо изучение спектров HCN в окружении данных молекул.

В данной работе получены спектры конденсированного HCN в смесях с H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>3</sub>OH и в смеси H<sub>2</sub>O : NH<sub>3</sub> при различных концентрациях HCN. В ходе выполнения работы измерены силы полос поглощения HCN в данных смесях. Под силой полосы поглощения

понимается интегральная интенсивность полосы в единицах оптической глубины в пересчете на одну поглощающую молекулу, находящуюся на луче зрения. Силы полос необходимы для количественной оценки HCN в межзвездной среде. Насколько нам известно, ранее были исследованы инфракрасные спектры конденсированного HCN в смеси с  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O} : \text{NH}_3$  [4] и  $\text{H}_2\text{O}$  [1].

## Эксперимент

Все эксперименты были выполнены на установке для спектральных астрономических исследований УрФУ. Установка состоит из нескольких узлов, расположенных следующим образом. Камера из нержавеющей стали подключается к турбомолекулярному насосу для достижения сверхвысокого вакуума. В центре основной камеры расположена химически инертная германиевая подложка, просвечиваемая ИК-пучком. Подложка устанавливается на криогенный палец, температура которого регулируется гелиевым криостатом. Перед экспериментами остаточное давление в основной камере поддерживается на уровне  $5 \cdot 10^{-10}$  мбар. Давление измеряется с помощью датчика с холодным катодом. Газы подаются в камеру сверхвысокого вакуума через два независимых натекаателя из цельнометаллической части линии дозировки.

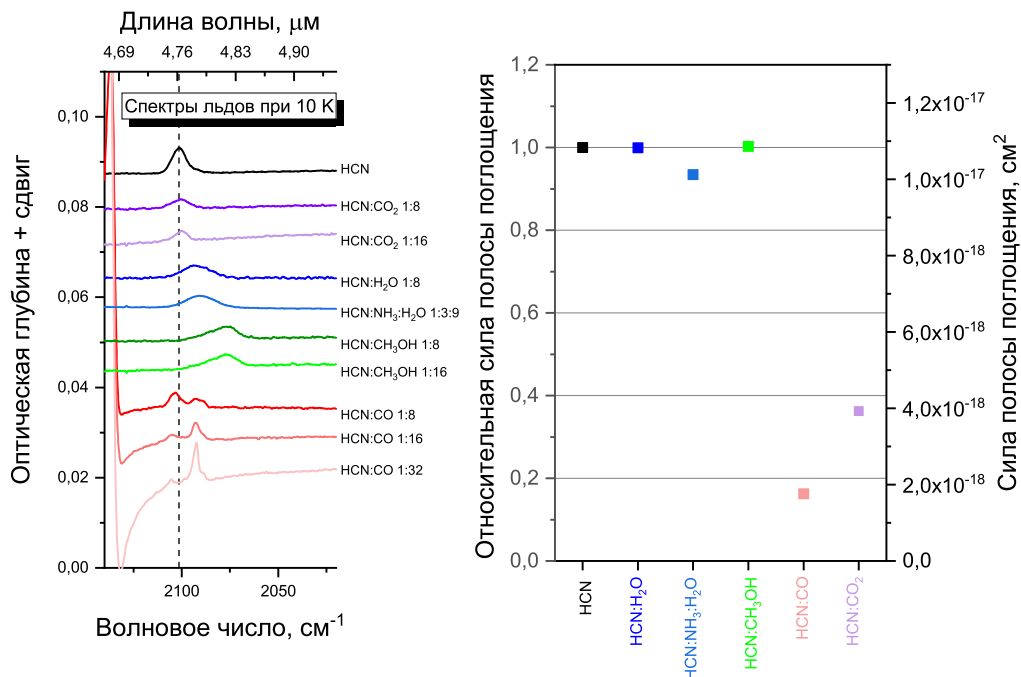
После того как подложка охлаждена криостатом до необходимой температуры, проводят напыление веществ по следующей методике. Переводят масс-спектрометр в режим съемки ионных токов в зависимости от времени (PvsT) и запускают съемку. В данном режиме масс-спектрометр непрерывно анализирует до 10 выбранных отношений масс ионов к их заряду ( $m/z$ ) в течение неограниченного времени. Отслеживают характерные  $m/z$  депозитируемых веществ. Далее снимают базовую линию для ИК-спектра и затем открывают высокоточные натекаатели для подачи газов в камеру до необходимых давлений и ионных токов. Через соотношение ионных токов компонентов контролируется состав напыляемых льдов. Съемку ИК-спектров запускают одновременно с открыванием натекаателей. В процессе депозиции осуществляют контроль за постоянством ионных токов. Их интенсивность контролируется путем регулирования положения вентиля. Депозиция в данном режиме проводится 60 мин. По истечении времени натекаатель закрывают.

Спектры HCN в смесях были получены при температуре 10 К в интервале волновых чисел  $4000\text{--}630\text{ см}^{-1}$  ( $2.5\text{--}15.87\text{ мкм}$ ). Количество HCN во всех экспериментах было приблизительно одинаково ( $9.5 \cdot 10^{15}$  молекул/ $\text{см}^2$ ).

## Результаты и обсуждение

Поскольку полоса  $2100\text{ см}^{-1}$  ( $4.762\text{ мкм}$ ), соответствующая валентным колебаниям  $\text{C}\equiv\text{N}$  связи, находится в области спектра, которая не содержит полос поглощения наиболее распространенных в межзвездной среде молекул, то именно через данную полосу представляется наиболее вероятным обнаружение HCN на наблюдательных данных. Этот факт обуславливает анализ только данной полосы поглощения в настоящей работе. На рисунке изображены ИК-спектры HCN в исследованных смесях в диапазоне волновых чисел  $2120\text{--}2040\text{ см}^{-1}$  ( $4.717\text{--}4.901\text{ мкм}$ ). Из графика видно резкое уменьшение силы полосы колебаний (в 5–6 раз)  $\text{C}\equiv\text{N}$  в среде CO по сравнению с чистым HCN. В остальных средах изменения силы полосы колебаний  $\text{C}\equiv\text{N}$  оказались менее существенными. В среде  $\text{CO}_2$  сила полосы уменьшается в 2–3 раза. В полярных средах сила исследуемой полосы практически не изменяется. Также в полярных льдах происходит существенный сдвиг пика полосы поглощения в сторону меньших волновых чисел.

В случае льдов HCN в неполярных средах CO и CO<sub>2</sub> вклад в изменение силы полосы и ее смещение вносит образование кластеров HCN во льду в процессе депозиции, доля которых снижается при увеличении разбавления, специфическое взаимодействие HCN с данными молекулами и диэлектрические свойства молекулы-среды. При рассмотрении спектров льдов HCN в полярных средах CH<sub>3</sub>OH, H<sub>2</sub>O : NH<sub>3</sub> и H<sub>2</sub>O смещение полосы в сторону меньших значений волновых чисел обусловлено участием молекул HCN в сети водородных связей.



Сравнение ИК-полосы поглощения C≡N валентных колебаний (слева) и ее сил (справа) молекулы HCN в различных астрономических средах. Относительные силы полос рассчитаны относительно абсолютной силы полосы C≡N колебаний льда чистого HCN. Абсолютное значение заимствовано из работы [1]

## Заключение

В данной работе впервые в одной лаборатории и на одной лабораторной установке выполнено сравнение спектров льдов HCN в окружении с такими астрономически значимыми молекулами, как H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>3</sub>OH и смесь H<sub>2</sub>O : NH<sub>3</sub>. Рассчитаны силы полос поглощения HCN в данных астрономических средах. Полученные результаты в перспективе облегчат идентификацию полос поглощения HCN по ИК-спектрам космических объектов, полученным с телескопа Джеймс Уэбб. При их анализе необходимо учесть, что полоса поглощения C≡N может сдвигаться в сторону меньших волновых чисел. Помимо этого результаты измерений сил полос поглощения HCN, полученные в данной работе, позволят более точно определить количество HCN в межзвездных льдах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, тема FEUZ-2020-0038.

## Библиографические ссылки

- [1] *Gerakines P. A., Yarnall Y. Y., Hudson R. L.* Direct measurements of infrared intensities of HCN and H<sub>2</sub>O + HCN ices for laboratory and observational astrochemistry // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 2021. — Vol. 509, № 3. — P. 3515–3522. <https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/509/3/3515/41394174/stab2992.pdf>.
- [2] *Glaser R., Hodgen B., Farrelly D., McKee E.* Adenine Synthesis in Interstellar Space: Mechanisms of Prebiotic Pyrimidine-Ring Formation of Monocyclic HCN-Pentamers // Astrobiology. — 2007. — Vol. 7, № 3. — P. 455–470. — PMID: 17630841. <https://doi.org/10.1089/ast.2006.0112>.
- [3] *van Dishoeck E. F.* Astrochemistry of dust, ice and gas: introduction and overview // Faraday Discuss. — 2014. — Vol. 168, iss. 0. — P. 9–47.
- [4] *Noble J. A., Theule P., Borget F. et al.* The thermal reactivity of HCN and NH<sub>3</sub> in interstellar ice analogues // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 2012. — Vol. 428, № 4. — P. 3262–3273. <https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/428/4/3262/18463989/sts272.pdf>.