**Колебательно-вращательный анализ и моделирование полосы n4 основного изотополога фреона-22 (CHClF2)**

***Добролюбов Е.О.1,2, Ефремов И.М.1,3, Краснощеков С.В.1, Науменко О.В.4***

*Аспирант, 3 год обучения*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*2Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия*

*3Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

*4Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, Томск, Россия*

*E-mail: dobroljubov@phys.chem.msu.ru*

Фреон-22 (CHClF2) является важным атмосферным загрязнителем и обладает выраженными озоноразрушающими свойствами, в связи с чем его производство и потребление регулируются рядом международных соглашений. Несмотря на это его атмосферное содержание продолжает расти, на что указывают данные недавнего исследования [1]. В связи с этим мониторинг содержания данного соединения остаётся актуальной задачей, для решения которой активно используются спектры поглощения солнечного излучения в инфракрасном (ИК) диапазоне, регистрируемые на наземных станциях. Совершенствование методик количественного определения содержания Фреона-22 сопряжено с доступностью высокоточных эмпирических данных, в первую очередь данных наиболее интенсивных полос поглощения. В случае полосы n4 в литературе ранее опубликован анализ спектра с разрешением 0.005 см-1 [2], что не позволило корректно определить точные значения частот колебательно-вращательных переходов.

В настоящей работе был выполнен колебательно-вращательный анализ ИК спектра высокого разрешения (0.001 см-1) смеси изотопологов Фреона-22, обогащенной 13C до 29.8%. Спектр был зарегистрирован при комнатной температуре на Фурье-спектрометре Bruker IFS-125HR. Исследованный спектральный диапазон соответствовал полосе поглощения n4. Решение обратной задачи было выполнено с использованием эффективного гамильтониана уотсоновского типа. При моделировании спектра поглощения были использованы эмпирически определённые центры линий вместе с интерполяцией по подогнанному эффективному гамильтониану верхнего колебательного состояния. Интенсивности колебательно-вращательных переходов были рассчитаны неэмпирически при помощи операторной теории возмущений Ван-Флека.

**Литература**

1. M. Zhou, B. Langerock, C. Vigoroux, et. al. Recent Decreases in the Growth Rate of Atmospheric HCFC-22 Column Derived From the Ground-Based FTIR Harmonized Retrievals at 16 NDACC Sites // Geophys. Res. Lett., Vol. 51, e2024GL112470, 2024.

2. A. J. Ross, A. Amrein, D. Luckhaus, et. al. The rotational structure of the -band of CH35ClF2 // Mol. Phys., Vol. 66, p. 1273 – 1277, 1989.