

<https://doi.org/10.15407/dopovidi2024.02.015>
УДК 539.188

Г.Г. Богачьов, <https://orcid.org/0000-0002-3770-6803>

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна
E-mail: bogach.gen@gmail.com

Збудження ВУФ емісій в області коротше 130 нм при зіткненнях електронів з молекулами гліцину

Представлено членом-кореспондентом НАН України А.М. Гомонай

На автоматизованій установці з електронним пучком та пучком молекул гліцину, що перетиналися, за допомогою ВУФ спектрометра досліджено спектр емісій в області 80—130 нм при енергіях електронів в межах 25—300 еВ. Знайдено, що спектр складається переважно з ліній атома водню — серії Лаймана. Для найбільш інтенсивної лінії при 121,6 нм (резонансної лінії атома водню) в межах енергій електронів від порогу збудження до 250 еВ вперше одержана функція збудження. Визначено поріг збудження цієї лінії, який складає $20 \pm 1,5$ еВ. Присутність в емісійному спектрі ліній атома водню пов'язується з процесом іонізації / фрагментації з вивільненням збуджених атомів водню.

Ключові слова: амінокислота гліцин, молекулярний пучок, електронний удар, вакуумне ультрафіолетове випромінювання.

Вступ. Біомолекули, з яких складаються живі організми, вже досить давно є предметом широкого всебічного дослідження. Важливість таких досліджень стимулюється в першу чергу через вплив іонізуючої радіації на живі клітини та організми, що може викликати їх шкідливі модифікації [1]. Малі біомолекули, серед яких амінокислоти та азотисті основи нуклеїнових кислот мають базове значення для живих організмів, досліджуються якнайширше мас-спектрометричним методом [1]. Метод оптичної (ВУФ) емісійної спектроскопії при збудженні малих біомолекул електронним ударом був застосований переважно до молекул азотистих основ нуклеїнових кислот [2—4]. Нами розпочато експериментальне дослідження спектрів випромінювання у ВУФ області, яке виникає при зіткненнях електронів з молекулами найпростіших амінокислот у газовій фазі. Про перші результати, одержані для гліцину (область спектра понад 112 нм), повідомлялося в [5]. Завдання даної роботи — продовжити такі дослідження з молекулою гліцину в більш короткохвильову ВУФ область.

Цит у в а н н я: Богачьов Г.Г. Збудження ВУФ емісій в області коротше 130 нм при зіткненнях електронів з молекулами гліцину. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2024. № 2. С. 15—24. <https://doi.org/10.15407/dopovidi2024.02.015>

© Видавець ВД «Академперіодика» НАН України, 2024. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>)

Короткі дані про об'єкт дослідження [6]: α -гліцин (системна назва аміноетанова кислота, масова формула $C_2H_5NO_2$, молярна маса 75,1 г/моль, температура плавлення з розкладанням 292 °С) має позначення Gly, структурна формула NH_2-CH_2-COOH , не має оптичних ізомерів. У вигляді *L*-форми ця амінокислота входить до складу більшості білків і є заміною. Гліцин — це дрібнокристалічна речовина без кольору, добре розчинна у воді. При температурах, значно вищих за температуру розкладання, молекули гліцину дуже швидко повністю фрагментуються.

Нині відомо досить багато робіт, де досліджувалися процеси іонізації, збудження, фрагментації та дисоціативного збудження молекул гліцину під дією повільних електронів і фотонів. В [7] фрагментація молекули гліцину при електронному ударі вивчалася як експериментально так і теоретично. Головний акцент було зроблено на механізмах утворення фрагментів вихідної молекули, включаючи утворення двозарядного фрагменту CH_2NHCO^{2+} . Особлива увага приділялася енергетичним характеристикам виходу іонних фрагментів. Також були проаналізовані геометричні параметри перебудови вихідної молекули.

В [8] експериментально вивчали спектри люмінесценції порошку гліцину у плазмі поздовжнього періодично пульсуючого розряду в сумішах аргон-гліцин та гелій-гліцин. Ідентифіковані основні фрагменти молекули гліцину, що емітували в області 200—1000 нм. Встановлено, що емітуючими молекулами внаслідок фрагментації гліцину і дисоціації карбоксильної ($-COOH$) та аміно ($-NH_2$) груп є молекули азоту, моноокису вуглецю та циану.

За допомогою часопротітного мас-спектрометра досліджували іонну фрагментацію сублімованої амінокислоти гліцину під дією ВУФ випромінювання He I лампи ($h\nu = 21,21$ eВ) [9]. Були визначені парціальні іонні виходи (коефіцієнти розгалуження) та кінетичні енергії для фрагментів, що утворювалися. Порівняння спектрів з наявними мас-спектрами, отриманими в результаті електронного удару (70 eВ), демонструє, що в обох випадках домінують процеси, які включають низькоенергетичні орбіталі валентної оболонки.

В [10] вивчали конформери неіонізованого гліцину. З використанням методики ізоляції молекулярних об'єктів у низькотемпературних аргонових матрицях виміряно ІЧ-спектри молекул гліцину, з яких вперше визначено спектральні характеристики для трьох найбільш стабільних конформерів. На базі теорії функціоналу густини розраховані ІЧ-частоти та інтенсивності, а ці результати використані для розділення смуг гліцинових конформерів в експериментальних спектрах та їх ототожнення.

В теоретичній роботі [11], що виконана також з використанням методів теорії функціоналу густини, вивчали електронні та оптичні властивості трьох конформерів молекули гліцину. Досліджували одночастинкові та двочастинкові збудження — для найнижчих з них за енергією не спостерігали залежності від конформації геометрії молекул, тоді як у спектрах поглинання така залежність була помітною.

Динаміку однофотонної іонізації гліцину розглядали теоретично шляхом класичного моделювання траєкторій в розрахунках “на льоту” [12]. Вважалося, що перед іонізацією конформер гліцину знаходиться в коливальному основному стані. Моделювання відбувалося протягом перших 10 пс. Знайдено, що переважним каналом дисоціації є розрив зв'язку C—C.

Мета даної роботи — експериментальне дослідження спектрів емісій у ВУФ області до 130 нм, що ініціюються електронним ударом з молекулами гліцину при енергіях електронів до 300 eВ, а також дослідження енергетичних залежностей інтенсивностей цих емісій.

Експериментальна установка складалася з джерела випромінювання, ВУФ монохроматора з детектором випромінювання та автоматизованої системи накопичування даних (АСНД). Джерело випромінювання — електронний та молекулярний пучки, що перетиналися під прямим кутом, які знаходились у вакуумній камері зіткнень циліндричної форми. Ця установка загалом подібна до використаної в [7] для досліджень з атомами лужних та лужноземельних металів і значно модернізованої в [14].

Пучок молекул одержували за допомогою ефузійної камери (ЕК) циліндричної форми з торцевою заглушкою, виготовлених з нержавіючої сталі. Для утворення пучка використовували ефузійний канал \varnothing 0,8 мм довжиною 3 мм, просвердлений аксіально в заглушці камери. ЕК прогрівали двома відкритими спіралями з молібденового дроту \varnothing 0,2 мм, розміщеними симетрично відносно осі ЕК поблизу заглушки, які живили стабілізованим струмом. Температуру ЕК вимірювали в її найхолоднішому місці (дно) платиновим термометром опору, надійно зафіксованим у спеціальному каналі. Робочі температури становили 130—140 °С, тобто значно нижче за температуру розкладання гліцину. ЕК разом з нагрівачами знаходилась всередині системи теплових екранів. Вихід ефузійного каналу був максимально наближений до осі електронного пучка (на 7,5 мм).

Як джерело електронного пучка застосовано трианодну електронну гармату (ЕГ) зі стрічковим оксидним катодом. Аноди виконано з ретельно відполірованого листового ніхрому товщиною 0,4 мм у вигляді прямокутних пластин з прямокутними щілинами розміром $0,8 \times 8$ мм². Для вимірювання струму електронного пучка використовували циліндр Фарадея (ЦФ), коаксіально розміщений в охоронному циліндрі (ОЦ), який запобігав попаданню розсіяних електронів в ЦФ. Для уникнення впливу вторинної емісії з поверхонь ЦФ на ОЦ подавали невелику від'ємну напругу відносно ЦФ. Зауважимо, що “стрічка” катоду ЕГ була зорієнтована паралельно до осі молекулярного пучка, орієнтованого вертикально вздовж осі камери зіткнень.

Прискорюючий анод ЕГ, потенціалом якого відносно катоду задавали енергію електронів, живився напругою від високостабільного джерела регульованої напруги постійного струму. Керування його напругою могло здійснюватися як вручну, так і з персонального комп'ютера (ПК).

При енергіях електронів 10—300 еВ ЕГ працювала з величиною струму, достатньою для впевненої реєстрації випромінювання збуджених молекул, і з постійною в межах 10 % формою електронного пучка. Густина струму пучка становила $\sim 10^{-3}$ А/см² при неоднорідності електронів по енергії $\sim 1,5$ — $2,5$ еВ, що визначалася методом затримуючого потенціалу.

Робочий вакуум в установці підтримували двома магніторозрядними насосами, приєднаними до камер джерела випромінювання та ВУФ монохроматора. Попередню відкачку вакуумної системи здійснювали приєднаним до камери джерела високовакуумним паромасляним агрегатом разом з форвакуумним насосом. Вакуумна система дозволяла одержувати і підтримувати робочий вакуум не гірше $5 \cdot 10^{-7}$ Тор.

В цій роботі (подібно до [13, 14]) використано ВУФ монохроматор, побудований за оптичною схемою Сейя—Наміока з врахуванням специфіки досліджень з пучками, що перетинаються. В ньому була встановлена копія ввігнутої сферичної дифракційної ґратки (радіус кривизни 500 мм, густина нарізки 1200 штр/мм), вкрита шаром алюмінію, захищеного шаром вольфраму.

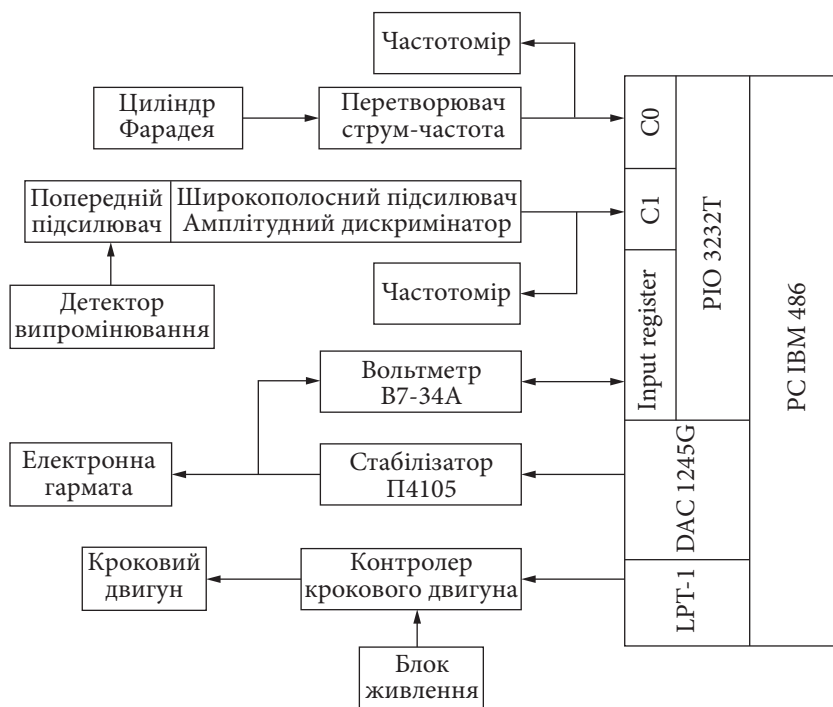


Рис. 1. Блок-схема апаратної частини АСНД

Нерегульована вхідна щілина монохроматора розміром $0,2 \times 10 \text{ мм}^2$ була розташована поблизу зони перетину пучків — 15 мм від осі електронного пучка та перпендикулярно до неї. Ширина вихідної щілини могла регулюватися в межах 0—1 мм без порушення вакууму.

Як детектор випромінювання було використано вторинно-електронний помножувач з коритовидними динодами (типу Аллена). Матеріал поверхні першого диноду, який відіграв роль фотокатода, має достатньо високу роботу виходу, що дозволяло реєструвати лише випромінювання ВУФ діапазону з довжиною хвилі коротше 130 нм.

Завдання нашого експерименту — одержання двох видів даних: по-перше, спектрів випромінювання досліджуваних молекул при фіксованих значеннях енергії збуджуючих електронів; по-друге, функцій збудження (ФЗ) окремих спектральних ліній (СЛ), тобто залежності інтенсивності від енергії електронів у розрахунку на одиницю струму. В обох випадках процес вимірювання здійснювали за допомогою спеціально зібраної АСНД.

АСНД була побудована на базі IBM-сумісного ПК з використанням двох плат розширення фірми HOLT Data Systems — PIO 3232T (плата цифрового вводу—виводу) та DAC 1245G (плата цифро-аналогового перетворювача). Блок-схема апаратної частини АСНД наведена на рис. 1.

При вимірюванні спектрів АСНД забезпечувала керування кроковим двигуном, що приводив у рух дифракційну ґратку монохроматора для розгортки спектра по довжинах хвиль та вимірювання сигналу з детектора випромінювання. При вимірюванні ФЗ вона забезпечувала розгортку прискорюючої напруги ЕГ, вимірювання цієї напруги та струму електронного пучка, а також вимірювання сигналу з детектора випромінювання. Зауважимо, що плату DAC 1245G використовували разом з промисловим стабілізатором напруги П4105.

Вихідні дані та режими вимірювання задавали у початковому діалозі: задавали початок та кінець вимірюваного інтервалу довжин хвиль або енергій електронів, крок та

експозицію вимірювання, кількість проходів вибраного інтервалу. Процес накопичування інформації можна було спостерігати в реальному часі на моніторі ПК. Після закінчення вимірювань накопичену інформацію разом з даними про умови експерименту зберігали на жорсткому диску. Подальшу обробку даних та кінцеве представлення їх у графічному вигляді здійснювали за допомогою більш потужного комп'ютера.

Основною вимогою до умов експерименту зі збудження молекул електронами є вимога однократності зіткнень. Робочі концентрації молекул та струми електронного пучка вибирали такими, щоб її забезпечити — це перевіряли за лінійністю залежностей інтенсивностей СЛ від величин струмів та концентрацій. Також приділяли особливу увагу тому, щоб за час вимірювань забезпечити незмінність концентрації молекул у зоні зіткнень та підтримувати на прийнятно низькому рівні концентрацію домішкових атомів або молекул.

Прив'язку ФЗ до шкали енергій здійснювали за спектроскопічним порогом спектральної лінії 158,9 нм головної серії Zn I шляхом лінійної екстраполяції її біляпорогової ділянки до нуля. Для цього в тигель джерела пучка молекул гліцину завантажували також невелику кількість металевого цинку.

Результати експерименту та їх обговорення. Для гліцину були ретельно вивчені спектри випромінювання в області 80—130 нм. Спектри записували при фіксованих значеннях енергії електронів у діапазоні 25—300 еВ при робочому вакуумі не гірше $5 \cdot 10^{-7}$ мм рт. ст.

Спектр випромінювання, записаний для енергії електронів 100 еВ, показано на рис. 2 в довільних одиницях. Як видно, цей спектр за своїм характером є лінійчастим, до того ж він небагатий на емісії (їх довжини хвиль див. в таблиці). За допомогою компіляції [15], де зібрано експериментальні дані з фотоемісійних поперечних перерізів у ВУФ діапазоні для атомарних переходів, викликаних електронними зіткненнями з атомами та молекулами атмосферних газів, вдається легко ототожнити п'ять більш інтенсивних емісій з лініями серії Лаймана атома водню. Члени серії Лаймана з головними квантовими числами понад $n = 6$ (L_ϵ) не могли бути розділені у спектрі через недостатньо високу роздільну здатність

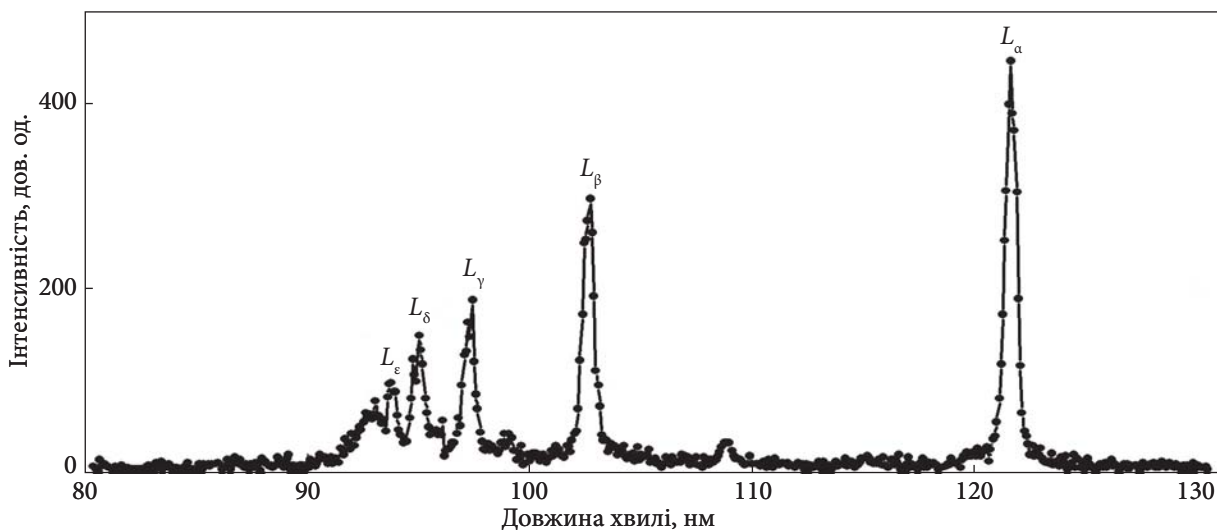


Рис. 2. Емісійний спектр в діапазоні 80—130 нм, збуджуваний при зіткненнях електронів з енергією 100 еВ та молекул гліцину

спектрометра. На нашу думку, саме їм і відповідає широка смуга поблизу 93 нм (для серії Лаймана границя становить 91,18 нм).

Решта інших помітних у спектрі емісій за інтенсивністю значно слабкіші за лінії водню і це ускладнює їх ототожнення. Серед цих емісій дещо виділяються чотири — при 95,9, 99,0, 109,0 та 120,0 нм. Емісія при 109,0 нм може бути віднесена до спектра монооксиду вуглецю [16], а емісія при 99,0 нм — до атомарного спектра кисню O I [15, 17]. Перша з них належить молекулі азоту N₂ (домінуючий коливальний перехід системи смуг Керрола—Йошино) [16], тоді як остання — атому азоту N I [15]. Ототожнення для малоінтенсивної емісії при 115,2 нм дещо неоднозначне. Можливо вона належить до спектра молекули CO [16], на який накладається слабкий мультиплет атома кисню [17] (див. таблицю). Зауважимо, що і друга за інтенсивністю емісія при 102,8 нм, приналежна до серії Лаймана атома водню, також є результатом спектрального накладення з мультиплетами атома кисню [17], як відмічено в таблиці.

Для спостережуваних у спектрі емісій в таблиці наведено також значення їх інтенсивностей у довільних та відносних одиницях. Останні були визначені з урахуванням даних про криву спектральної чутливості нашого ВУФ спектрометра [13], одержаних з використанням синхротронного випромінювання.

Через те, що досліджувані амінокислоти містять у своєму складі ті ж атоми, що й залишковий газ у камері зіткнень (H, C, N, O), потрібно було в'яснити, як присутність цього газу може спотворити одержуваний спектр. Тому записували і спектри залишкового газу при робочому вакуумі, тих самих енергіях електронів та експозиції, що за реєстрації спектрів для гліцину. Оскільки при робочому вакуумі свічення залишкового газу було надто слабким, ми штучно погіршували вакуум майже на порядок, підтримуючи вакуум у системі лише насосом ВУФ спектрометра. Порівняння спектра одержаного за таких умов, зі спектром для гліцину, переконує, що вкладом залишкового газу цілком можна знехтувати.

Таблиця 1. Дані про емісії (лінії), спостережувані в спектрах для гліцину (область 80—130 нм) при енергії електронів 100 еВ

Довжина хвилі, нм	I ₁₀₀		Ототожнення
	дов. од.	відн. од.	
93,7	100	0,016	H I L _ε
95,0	150	0,026	H I L _δ
95,9	50	0,010	N ₂ (0,0) c' ₄ ¹ Σ _u ⁺ — X ¹ Σ _g ⁺
97,3	190	0,037	H I L _γ
99,0	43	0,009	O I 2p ⁴ 3P — 2p ³ 3s 3D ^o
102,8	295	0,083	H I L _β ; O I 2p ⁴ 3P — 2p ³ 3d 3D ^o
109,0	36	0,017	CO (0,0) C ¹ Σ ⁺ — X ¹ Σ ⁺
115,2	23	0,022	O I 2p ⁴ 1D — 2p ³ 3s 1D ^o ; CO (0,0) B ¹ Σ ⁺ — X ¹ Σ ⁺
120,0	26	0,048	N I 2p ³ 4S ^o — 3s 4P
121,6	450	1	H I L _α

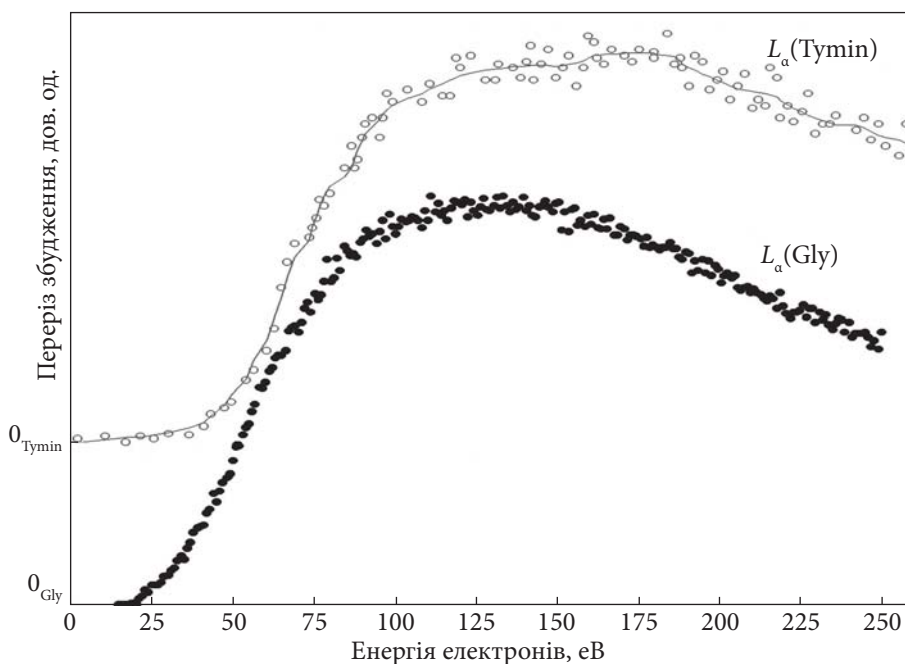


Рис. 3. ФЗ резонансної лінії атома водню 121,6 нм при зіткненнях електронів з молекулами гліцину. Порівняння її з ФЗ цієї ж лінії при зіткненнях електронів з молекулами тиміну [4]

До речі, найінтенсивнішими в такому спектрі виявилися емісія молекули N_2 при 95,9 нм та резонансна лінія атома водню 121,6 нм.

Зауважимо, що спектр для гліцину записували при температурах 130—140 °С і він залишався практично однаковим, тобто складався головним чином з ліній серії Лаймана атома водню.

Тут варто зауважити, що подібні за характером спектри спостерігали в [4]. Там при зіткненнях електронів з молекулами тиміну (азотистої основи ДНК) при енергії електронів 100 еВ досліджували спектри емісій у ВУФ діапазоні (50—150 нм). Було з'ясовано, що вони також складаються практично тільки з ліній атома водню. В [4] наводили співвідношення інтенсивностей для ліній серії Лаймана, одержаних з урахуванням залежності чутливості спектрометра від довжини хвилі: $\alpha : \beta : \gamma : \delta = 1 : 0,16 : 0,08 : 0,05$ (з похибкою $\pm 0,01$). Аналогічне співвідношення з наших даних (див. таблицю) дещо відрізняється: $\alpha : \beta : \gamma : \delta = 1 : 0,083 : 0,037 : 0,026$. Однак і оцінка похибки у нашому випадку дає більше значення — приблизно $\pm 0,05$. До того ж варто врахувати значну відмінність у структурах молекул-мішеней.

Для найінтенсивнішої лінії атома водню при 121,6 нм була виміряна ФЗ, яка наведена на рис. 3. Поріг збудження її за нашими даними становить $20 \pm 1,5$ еВ. Як видно з рис. 3, ФЗ демонструє доволі плавне початкове зростання, яке досягає максимуму при 120—130 еВ і після цього повільно спадає. Певна помітна структура має місце в припороговій ділянці. Так, зразу за порогом на ФЗ присутній незначний уступ, який переходить в дещо крутіший підйом. Не виключено, що ці структури пов'язані з додатковими механізмами утворення збуджених атомів водню. Взагалі ж за формою ФЗ можна зробити висновок, що в утворенні збудженого атома водню при зіткненнях електронів з молекулами гліцину не беруть участі обмінні процеси.

На рис. 3 для порівняння наведена нещодавно виміряна ФЗ для лінії 121,6 нм при електронних зіткненнях з відомою біологічно важливою молекулою тиміну [4]. Можна кон-

статувати недвозначну схожість між ними за формою та близькість порогів збудження за величиною (23 ± 1 eV [4]). В [4] походження цієї емісії атома водню пов'язується зі складним процесом, що відбувається з молекулою мішені під дією електронного удару — процесом іонізації / фрагментації з вивільненням збудженого атома водню. На нашу думку, не виключено, що подібний механізм появи резонансної лінії водню має місце і в нашому випадку — тобто при зіткненнях електронів з молекулами гліцину.

Щодо природи появи у спектрах випромінювання таких збуджених фрагментів, як атоми кисню та молекули CO, логічно припустити причетність до цього карбоксильної групи —COOH. Проте здається малоімовірним, що збуджується водень саме з неї, беручи до уваги надто велику різницю між сумарною інтенсивністю лінії атома водню та усіх інших емісій.

Висновки. Вперше досліджено емісійні спектри в області 80—130 нм, що виникають при зіткненнях електронів з енергією до 300 eV та молекул гліцину в газовій фазі. Знайдено, що в цих спектрах спостерігаються переважно лінії серії Лаймана атома водню. В них домінує резонансна лінія H I при 121,6 нм, для якої виміряно функцію збудження при зіткненнях електронів з молекулами гліцину і визначено поріг збудження — він складає $20 \pm 1,5$ eV. Поява в спектрі принаймі резонансної лінії H I пов'язується з процесом іонізації / фрагментації з вивільненням збуджених атомів водню.

Автор висловлює вдячність О.В. Снігурському за цікаву ідею досліджень. Автор також глибоко вдячний колегам А.М. Милимко та Р.В. Тимчику, завдяки яким такі дослідження стали можливими.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Sanche L. Low energy electron-driven damage in biomolecules. *Eur. Phys. J. D.* 2005. **35**. P. 367—390. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2005-00206-6>
2. Шафраньош И.И., Суховия М.И. Возбуждение молекул тимина в газовой фазе электронным ударом. *Оптика и спектроскопия.* 2007. **102**, № 4. С. 553—555.
3. Shpenik O.B., Erdevdy N.M., Zvenigorodsky V.V., Romanova L.G. Luminescence of cytosine vapor excited by slow electrons. *J. Appl. Spectrosc.* 2013. **80**, No. 1. P. 43—46. <https://doi.org/10.1007/s10812-013-9718-3>
4. Tiessen C.J., Trocchi J.A., Hein J.D., Dech J., Kedzierski W., McConkey J.W. VUV study of electron impact dissociative excitation of thymine. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2016. **49**. 125204 (4 pp). <https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/12/125204>
5. Bohachov H.G., Tymchyk R.V. On the VUV emission spectrum excited by electron impact on the gas-phase glycine. 3rd XLIC (XUV/UV-ray light and fast ions for ultrafast chemistry), Programme and Book of Abstracts, Debrecen, Hungary, 2-4 november, 2015. P. 82.
6. Чичибабин А.Е. Основные начала органической химии. I. Москва: Госхимиздат, 1963. 912 с.
7. Tamulienė J., Romanova L.G., Vukstich V.S., Snegursky A.V. Mechanisms of the electron-impact-induced glycine molecule fragmentation. *Chemical Physics.* 2012. **404**. P. 36—41. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2012.01.019>
8. General A.A., Migovich M.I., Kelman V.A., Zhmenyak Yu.V., Zvenigorodsky V.V. Spectral luminescent properties of the glycine molecule in a gas discharge. *J. Appl. Spectroscopy.* 2016. **82**. P. 970—974. <https://doi.org/10.1007/s10812-016-0213-5>
9. Lago A.F., Coutinho L.H., Marinho R.R.T., Naves de Brito A., de Souza G.G.B. Ionic dissociation of glycine, alanine, valine and proline as induced by VUV (21.21 eV) photons. *Chem. Phys.* 2004. **307**. P. 9—14. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2004.06.052>
10. Stepanian S.G., Reva I.D., Radchenko E.D., Rosado M.T.S., Duarte M.L.T.S., Fausto R., Adamowicz L. Matrix-Isolation Infrared and Theoretical Studies of the Glycine Conformers. *J. Phys. Chem.* 1998. **A102**. P. 1041—1054. <https://doi.org/10.1021/jp973397a>

11. Maul R., Preuss M., Ortmann F., Hannewald K., Bechstedt F. Electronic Excitations of Glycine, Alanine, and Cysteine Conformers from First-Principles Calculations. *J. Phys. Chem.* 2007. **A111**. P. 4370—4377. <https://doi.org/10.1021/jp068294>
12. Shemesh D., Chaban G.M., Gerber R.B. Photoionization Dynamics of Glycine: The First 10 Picoseconds. *J. Phys. Chem.* 2004. **A108**. P. 11477—11484. <https://doi.org/10.1021/jp040331o>
13. Алексахин И.С., Богачев Г.Г., Запесочный И.П., Угрин С.Ю. Экспериментальные исследования радиационного распада автоионизационных состояний щелочных и щелочноземельных атомов. *ЖЭТФ*. 1981. **80**, № 6. С. 2187—2197.
14. Богачов Г.Г. Дослідження ВУФ випромінювання, що збуджується при зіткненнях електронів з атомами цинку. *Укр. фіз. журн.* 2001. **46**, № 3. С. 289—295.
15. Van der Burgt P.J.M., Westerveld W.B., Risley J.S. Photoemission cross sections for atomic transitions in the extreme ultraviolet due to electron collisions with atoms and molecules. *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1989. **18**, No. 4. P. 1757—1805. <https://doi.org/10.1063/1.555844>
16. Krupenie P.H. The band spectrum of carbon monoxide. NSRDS — NBS 5, (US). 1966. 86 p.
17. Li W., Jönsson P., Amarsi A.M., Li M.C., Grumer J. Extended atomic data for oxygen abundance analyses. *Astronomy & Astrophysics.* 2023. **674**. P. A54 (11 pp). <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202245645>
18. Ajello J.M., James G.K., Franklin B.O., Shemansky D.E. Medium-resolution studies of extreme ultraviolet emission from N₂ by electron impact: Vibrational perturbations and cross sections of the $c'_4 \ ^1\Sigma^+_u$ and $b' \ ^1\Sigma^+_u$ states. *Phys. Rev. A.* 1989. **40**. No. 7. P. 3524—3556. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.40.3524>

Надійшло до редакції 18.12.2023

REFERENCES

1. Sanche, L. (2005). Low energy electron-driven damage in biomolecules. *Eur. Phys. J. D* 35, pp. 367-390. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2005-00206-6>
2. Shafranyosh, I. I. & Sukhoviya, M. I. (2007). Electron impact excitation of gas-phase thymine molecules. *Opt. Spectr.* 102, No. 4, pp. 500-502. <https://doi.org/10.1134/S0030400X07040042>
3. Shpenik, O. B., Erdevdy, N. M., Zvenigorodsky, V. V. & Romanova, L. G. (2013). Luminescence of cytosine vapor excited by slow electrons. *J. Appl. Spectrosc.* 80, No. 1, pp. 43-46. <https://doi.org/10.1007/s10812-013-9718-3>
4. Tiessen, C. J., Trocchi, J. A., Hein, J. D., Dech, J., Kedzierski, W. & McConkey, J. W. (2016). VUV study of electron impact dissociative excitation of thymine. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 49, 125204 (4 pp). <https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/12/125204>
5. Bohachov, H. G. & Tymchuk, R. V. (2015). On the VUV emission spectrum excited by electron impact on the gas-phase glycine. 3rd XLIC (XUV/UV-ray light and fast ions for ultrafast chemistry). Programme and Book of Abstracts, Debrecen, Hungary, 2-4 november, 2015. p. 82.
6. Chichibabin, A. E. (1963). Fundamentals of organic chemistry. I. Moscow: Goskhimizdat (in Russian).
7. Tamuliene, J., Romanova, L. G., Vukstich, V. S. & Snegursky, A. V. (2012). Mechanisms of the electron-impact-induced glycine molecule fragmentation. *Chem. Phys.*, 404, pp. 36-41. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2012.01.019>
8. General, A. A., Migovich, M. I., Kelman, V. A., Zhmenyak, Yu. V. & Zvenigorodsky, V. V. (2016). Spectral luminescent properties of the glycine molecule in a gas discharge. *J. Appl. Spectroscopy*, 82, pp. 970-974. <https://doi.org/10.1007/s10812-016-0213-5>
9. Lago, A. F., Coutinho, L. H., Marinho, R. R. T., Naves de Brito, A. & de Souza, G. G. B. (2004). Ionic dissociation of glycine, alanine, valine and proline as induced by VUV (21.21 eV) photons., *Chem. Phys.* 307, pp. 9-14. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2004.06.052>
10. Stepanian, S. G., Reva, I. D., Radchenko, E. D., Rosado, M. T. S., Duarte, M. L. T. S., Fausto, R. & Adamowicz, L. (1998). Matrix-Isolation Infrared and Theoretical Studies of the Glycine Conformers. *J. Phys. Chem.*, A102, pp. 1041-1054. <https://doi.org/10.1021/jp973397a>
11. Maul, R., Preuss, M., Ortmann, F., Hannewald, K. & Bechstedt, F. (2007) Electronic Excitations of Glycine, Alanine, and Cysteine Conformers from First-Principles Calculations. *J. Phys. Chem.*, A111, pp. 4370-4377. <https://doi.org/10.1021/jp068294j>
12. Shemesh, D., Chaban, G. M. & Gerber, R. B. (2004). Photoionization Dynamics of Glycine: The First 10 Picoseconds, *J. Phys. Chem.*, A108, pp. 11477-11484. <https://doi.org/10.1021/jp040331o>

13. Aleksakhin, I. S., Bogachev, G. G., Zapesochnyi, I. P. & Ugrin, S. Yu. (1981). Experimental investigations of radiative decay of autoionizing states of alkali and alkaline earth elements. *Sov. Phys. JETP*, 53, No. 6, pp. 1140-1145. https://www.jetp.ras.ru/cgi-bin/dn/e_053_06_1140.pdf
14. Bogachev, G. G. (2001). Investigation of VUV radiation excited by electron-zinc atom collisions. *Ukr. Phys. Zhurn.*, 46, No. 3, pp. 289-295 (in Ukrainian).
15. Van der Burgt, P. J. M., Westerveld, W. B. & Risley, J. S. (1989). Photoemission cross sections for atomic transitions in the extreme ultraviolet due to electron collisions with atoms and molecules. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 18, No. 4, pp. 1757-1805. <https://doi.org/10.1063/1.555844>
16. Krupenie, P. H. (1966). The band spectrum of carbon monoxide. NSRDS — NBS 5, (US), 86 p.
17. Li, W., Jönsson, P., Amarsi, A. M., Li, M. C. & Grumer, J. (2023). Extended atomic data for oxygen abundance analyses. *Astronomy & Astrophysics*, 674, pp. A54 (11 pp). <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202245645>
18. Ajello, J. M., James, G. K., Franklin, B. O. & Shemansky, D. E. (1989). Medium-resolution studies of extreme ultraviolet emission from N_2 by electron impact: Vibrational perturbations and cross sections of the $c' \ ^1\Sigma_u^+$ and $b' \ ^1\Sigma_u^+$ states. *Phys. Rev. A*, 40, pp. 3524-3556. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.40.3524>

Received 18.12.2023

H.G. Bohachov, <https://orcid.org/0000-0002-3770-6803>

Institute of Electronic Physics of the NAS of Ukraine, Uzhgorod, Ukraine

E-mail: bogach.gen@gmail.com

EXCITATION OF VUV EMISSIONS IN THE REGION SHORTER THAN 130 NM BY ELECTRON COLLISIONS WITH GLYCINE MOLECULES

An experimental setup modernized for the study of VUV radiation arising from the interaction of slow electrons with amino acid molecules is described. A three-anode electron gun with a ribbon oxide cathode was used to produce a rectangular electron beam. The beam current density in the energy range of 10–300 eV was $\sim 10^{-3}$ A/cm² with electron energy inhomogeneity of ~ 1.5 –2.5 eV. A beam of molecules was obtained by the effusion method by resistive heating of the substance under investigation in a chamber with an effusion channel \varnothing 0.8 mm long by 3 mm. The beams were intersected at right angle and the emission from the area of beam intersection in the mutually perpendicular direction was analysed by a VUV monochromator assembled according to the Seiya-Namioka scheme based on a concave spherical grating ($R_m = 500$ mm, 1200 line/mm). A secondary electron multiplier with trough-shaped dynodes was used as a detector of VUV radiation. The sensitivity range of the monochromator-detector system was limited to the range 80–130 nm. The experiment provided two types of data: first, the spectral composition of radiation from the collision zone of beams at fixed values of electron energy; second, the excitation functions of individual emissions, that is, the dependence of intensity on electron energy per unit current. In both cases, the measurement process was carried out with using an automated data collection acquisition system based on an IBM-compatible PC with the use of HOLIT Data Systems expansion boards — digital input-output and digital-to-analog converter. The described setup investigated the emission spectrum in the 80–130 nm region induced by collisions of electrons with glycine molecules at electron energies in the 25–300 eV region. It was found that the spectrum consists mainly of the lines of the hydrogen atom - the Lyman series. For the most intense line at 121.6 nm, the H I resonance line, the excitation function was measured for the first time and the excitation threshold was determined to be 20 ± 1.5 eV. The presence of hydrogen atom lines in the emission spectrum is associated with the process of ionization/fragmentation with the release of excited hydrogen atoms.

Keywords: aminoacid glycine, molecular beam, electron impact, vacuum ultraviolet radiation.