

Analiza MARVEL wysokorozdzielczych widm rowibronicznych $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$

S. Mahmoud¹, N. El-Kork¹, N. A. Elkher¹, M. Almehairbi², R. Al Abdallah³, **Aleksandra Stasik**^{4,5†}, R. Hakalla⁴, W. Ubachs⁶, R. W. Field⁷, N. de Oliveira⁸, W. Szajna⁴, S. Ryzner^{4,5}, M. I. Malicka⁹, T. Furtenbacher¹⁰, O. P. Yurchenko¹¹, S. N. Yurchenko¹¹, J. Tennyson¹¹

¹Wydział Fizyki, Uniwersytet Khalifa, Abu Zabi, Zjednoczone Emiraty Arabskie

²Wydział Chemii, Uniwersytet Khalifa, Abu Zabi, Zjednoczone Emiraty Arabskie

³Wydział Inżynierii Mechanicznej i Jądrowej, Uniwersytet Khalifa, Abu Zabi, Zjednoczone Emiraty Arabskie

⁴Laboratorium Spektroskopii Materiałów, Instytut Nauk Fizycznych, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska

⁵Szkoła Doktorska Uniwersytetu Rzeszowskiego, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska

⁶Wydział Fizyki i Astronomii oraz LaserLaB, Vrije Universiteit, De Boelelaan 1105, 1081 HV Amsterdam, Holandia

⁷Wydział Chemii, Massachusetts Institute of Technology, 77 Massachusetts Ave, Cambridge, MA 02139, USA

⁸Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Départementale 128, 91190 Saint-Aubin, Francja

⁹Wydział Matematyki i Fizyki Stosowanej, Politechnika Rzeszowska, al. Powstańców Warszawy 12, 35-959 Rzeszów, Polska

¹⁰Complex Chemical Systems Research Group HUN-REN-ELTE, ELTE TTK Kémiai Intézet, Pázmány Péter sétány 1/A, 1117 Budapest, Węgry,

¹¹ Wydział Fizyki i Astronomii, University College London, Gower Street, London WC1E 6BT, Wielka Brytania

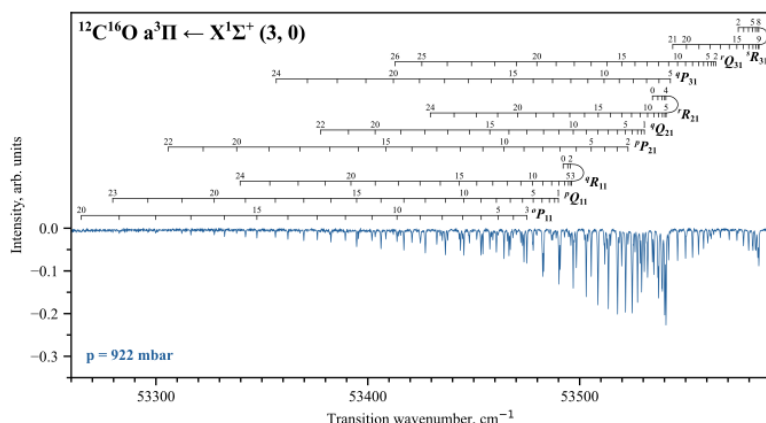
†email: aleksandrast@dokt.ur.edu.pl

Tlenek węgla (CO) jest jedną z kluczowych cząsteczek w badaniach atmosfery planet i egzoplanet oraz procesów zachodzących w przestrzeni kosmicznej. Precyzyjne wyznaczenie energii jego poziomów energetycznych oraz opisanie procesów nimi zarządzających ma fundamentalne znaczenie dla modelowania zjawisk i dynamiki obiektów astrofizycznych.

Badania prowadzone w Laboratorium Spektroskopii Materiałów (LSM) Instytutu Nauk Fizycznych są ukierunkowane na precyzyjne pomiary częstotliwości molekuł wykorzystywanych m.in. przez globalną bazę danych ExoMol. Wyniki naszych badań, 806 linii spektralnych progresji ($v' - 0$) systemu Camerona ($a^3\Pi - X^1\Sigma^+$), istotnie rozszerzyły te zasoby i dostarczyły informacji na temat struktury elektronowej i dynamiki molekuly tlenku węgla w zakresie systemów zabronionych regułami wyboru. Otrzymane widma otrzymano za pomocą spektroskopii absorpcyjnej w zakresie próżniowego ultrafioletu (VUV-FT) z wykorzystaniem spektrometru Fouriera zainstalowanego na linii DESIRS synchrotronu SOLEIL pod Paryżem.

W celu zbudowania bazy ExoMol dla molekuly CO zastosowano algorytm MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels), który umożliwia dokładne określenie poziomów energetycznych CO poprzez systematyczną analizę szerokiego zbioru danych eksperymentalnych. Wykorzystanie MARVEL pozwoliło na integrację wyników z 17 wcześniejszych badań, prowadząc do weryfikacji 5213 przejść ro-wibronicznych oraz wyznaczenia energii 2586 poziomów energetycznych obejmujących sześć najniższych położonych stanów elektronowych cząsteczki CO. Algorytm ten stanowi zaawansowane narzędzie umożliwiające unifikację danych spektroskopowych i ich spójną interpretację. Dzięki niemu będzie można wygenerować nieznane dotąd linie o wysokich rotacjach dla systemów będących przedmiotem obecnej pracy.

Przedstawione badania są wynikiem współpracy grupy fizyków molekularnych Uniwersytetu Rzeszowskiego z University College London (Wielka Brytania), Vrije Universiteit (Holandia), Massachusetts Institute of Technology (USA), Khalifa University (Zjednoczone Emiraty Arabskie), Synchrotron SOLEIL (Francja), Politechnika Rzeszowska, oraz HUN-REN-ELTE Complex Chemical Systems Research Group (Węgry).



Rys. 1. Widmo wysokiej rozdzielczości pasma ($3 - 0$) systemu Camerona ($a^3\Pi - X^1\Sigma^+$) molekuly $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$.