

Spektroskopia fourierowska molekuł dwuatomowych w rejonie VUV oraz UV-Vis. Precyzyjna analiza oddziaływań wewnątrz-cząsteczkowych

R. Hakalla¹, S. Ryzner¹, M. I. Malicka², A. Stasik¹, A. N. Heays³,
R. W. Field⁴, N. de Oliveira⁵, W. Szajna¹, W. Ubachs⁶

¹*Materials Spectroscopy Laboratory,
Institute of Physics, University of Rzeszów,
Pigonia 1 Street, 35-310 Rzeszów, Poland*

²*The Faculty of Mathematics and Applied Physics,
Rzeszów University of Technology,
Powstańców Warszawy 8 Street, 35-959 Rzeszów, Poland*

³*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry,
Dolejškova 2155/3, 182 23 Prague 8, Czech Republic*

⁴*Department of Chemistry,
Massachusetts Institute of Technology,
Cambridge, MA02139 USA*

⁵*Synchrotron SOLEIL, Orme de Merisiers,
St. Aubin, BP 48, F-91192 Gif sur Yvette Cedex, France*

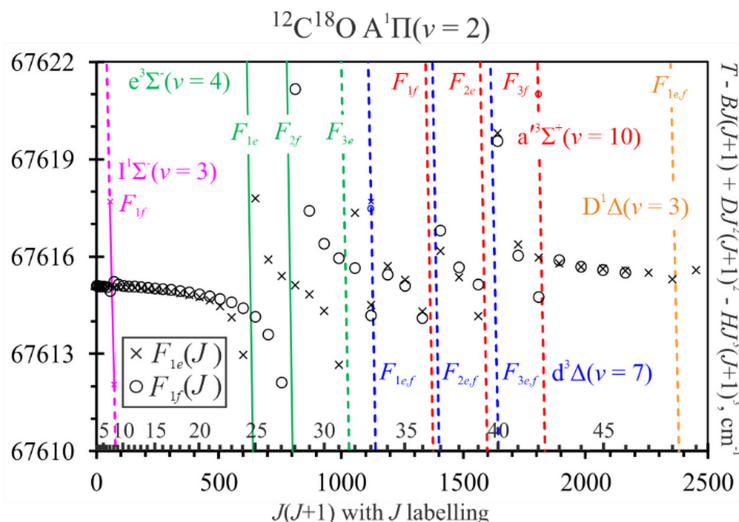
⁶*Department of Physics and Astronomy, and LaserLaB,
Vrije Universiteit, De Boelelaan 1081, 1081 HV Amsterdam, Netherlands
e-mail: rhakalla@ur.edu.pl*

Molekuły dwuatomowe od wielu lat cieszą się niesłabnącym zainteresowaniem różnych dziedzin nauki, a w ostatnich dwóch dekadach znalazły się w centrum badań spektroskopowych ze względu na nowe odkrycia, związane z egzoplanetami [1, 2]. Cząsteczki takie jak CO, CO⁺, CH, CD, AlH czy AlD pełnią ważną rolę w astrofizycznych badaniach kosmosu [3, 4]. Szczególnie znaczenie przywiązuje się do wykrywania i ilościowego określania różnych naturalnych izotopologów tych molekuł w celu modelowania ewolucji kosmosu, chmur międzygwiazdowych i samych gwiazd [5, 6].

Znakomita większość badań astronomicznych opiera się wyłącznie na wynikach precyzyjnej spektroskopii atomowej i molekularnej. W celu zapewnienia wysokiej dokładności pomiarów, do realizacji niniejszego projektu użyto dwie precyzyjne i komplementarne metody spektroskopii fourierowskiej wysokich rozdzielczości:

- a) spektroskopię absorpcyjną w zakresie próżniowego ultrafioletu (VUV) przy wykorzystaniu promieniowania synchrotronowego oraz spektrometru Fouriera ze zwierciadłami Fresnela, znajdującego się w gałęzi DESIRS synchrotronu SOLEIL we Francji [7];
- b) spektroskopię emisyjną w zakresie bliskiego ultrafioletu (UV) oraz rejonu widzialnego (VIS) przy użyciu spektrometru Bruker IFS 125-HR (Uniwersytet Rzeszowski) [8].

Tak pozyskane widma zostały zinterpretowane, a rezultaty poddane wielopoziomowej analizie deperturbacyjnej opartej o Hamiltonian efektywny [9] oraz metodę jednoczesnego wyznaczania stałych molekularnych i termów energetycznych [10]. Pozwoliło to na pełny opis struktury energetycznej stanów elektronowych poprzez uwzględnienie rozległych i wielostanowych perturbacji (Rysunek 1) zarówno homogenicznych, jak i heterogenicznych oddziaływań bezpośrednich, a także pośrednich [8, 11, 12].



Rysunek 1: Termy zredukowane (cm^{-1}) poziomu $A^1\Pi$ ($\nu = 2$) oraz jego perturbentów w molekułe $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ [11]

Podziękowania

R. Hakalla dziękuje konsorcjum LASERLAB-EUROPE za sfinansowanie niniejszych badań (granty EUH2020-RIP-654148 oraz EC's-SPF-284464). Autorzy wyrażają swoją wdzięczność zarządowi oraz obsłudze technicznej synchrotronu SOLEIL (St. Aubin, Francja) za umożliwienie przeprowadzenia pomiarów z wykorzystaniem wiązki DESIRS (projekty 20120653 i 20160118).

Bibliografia

- [1] Tennyson J., Yurchenko S. N., ExoMol: Molecular Line Lists for Exoplanet and Other Atmospheres: ExoMol: Molecular Line Lists, Mon. Notices Royal Astron. Soc. 425, 21 (2012).
- [2] Tennyson J., Yurchenko S., The ExoMol Atlas of Molecular Opacities, Atoms 6, 26 (2018).
- [3] Tinetti G. *et al.*, A Chemical Survey of Exoplanets with ARIEL, Exp. Astron. 46, 135 (2018).
- [4] Wang Y., Tennyson J., Yurchenko S., Empirical Line Lists in the ExoMol Database, Atoms 8, 7 (2020).
- [5] Bally J., Langer W. D., Isotope-Selective Photodestruction of Carbon-Monoxide, Astrophys. J. 255, 143 (1982).
- [6] Bennett C. J., Jamieson C. S., Kaiser R. I., Mechanical Studies on the Formation and Destruction of Carbon Monoxide (CO), Carbon Dioxide (CO₂), and Carbon Trioxide (CO₃) in Interstellar Ice Analog Samples, Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 4032 (2010).
- [7] de Oliveira N., Joyeux D., Roudjane M., Gil J.-F., Pilette B., Archer L., Ito K., Nahon L., The High-Resolution Absorption Spectroscopy Branch on the VUV Beamline DESIRS at SOLEIL, J. Synchrotron Radiat. 23, 887 (2016).

- [8] Hakalla R. *et al.*, Fourier-Transform Spectroscopy of $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$ and Deperturbation Analysis of the $\text{A}^1\Pi$ ($\nu=0-3$) Levels, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 189, 312 (2017).
- [9] Western C. M., PGOPHER: A Program for Simulating Rotational, Vibrational and Electronic Spectra, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 186, 221 (2017).
- [10] Watson J. K. G., On the Use of Term Values in the Least-Squares Fitting of Spectra, *J. Mol. Spectrosc.* 138, 302 (1989).
- [11] Malicka M. I., Ryzner S., Heays A. N., de Oliveira N., Field R. W., Ubachs W., Hakalla R., Deperturbation Analysis of the $\text{A}^1\Pi$ ($\nu=2$) Level in the $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ Isotopologue, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 273, 107837 (2021).
- [12] Ryzner S., Malicka M. I., Heays A. N., Field R. W., de Oliveira N., Szajna W., Ubachs W., Hakalla R., VUV-VIS FT Spectroscopy of the Rare $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ Isotopologue of Carbon Monoxide: Analysis of the $\text{A}^1\Pi$ ($\nu=1$) Multiply-Perturbed Level, *Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc.* 279, 121367 (2022).