

# Dimery van der waalsowskie w wiązce molekularnej – od wytwarzania do nowych metod wyznaczania potencjałów stanów elektronowych

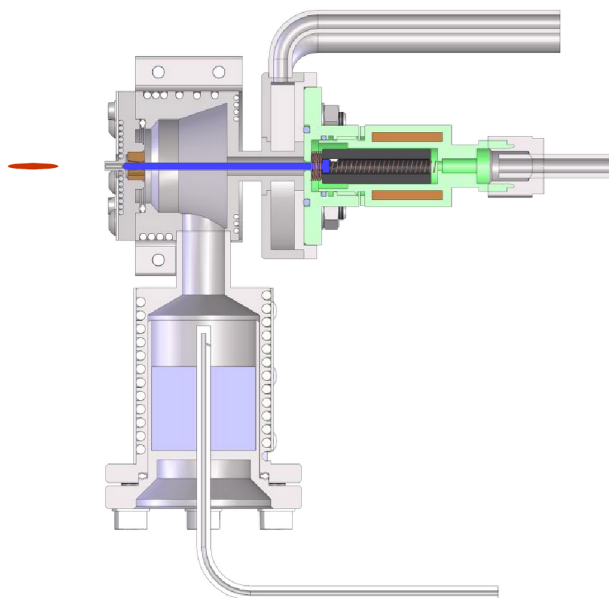
T. Urbańczyk<sup>1</sup>, J. Koperski<sup>1</sup>, M. Krośnicki<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego,  
Uniwersytet Jagielloński,  
ul. prof. St. Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków*

<sup>2</sup>*Institut Fizyki Teoretycznej i Astrofizyki,  
Uniwersytet Gdański,  
ul. Wita Stwosza 57, 80-308 Gdańsk  
e-mail: tomek.urbanczyk@uj.edu.pl*

W wykładzie zostaną omówione dwa zagadnienia, będące przedmiotem badań prowadzonych w Grupie Molekularnej Spektroskopii Laserowej w Instytucie Fizyki UJ. Pierwsze z omawianych zagadnień dotyczy rozwoju metod eksperymentalnych, związanych z techniką naddźwiękowej wiązki molekularnej. Zostaną zaprezentowane dwa źródła wiązki: wysokotemperaturowe źródło o pracy impulsowej do wytwarzania dimerów van der waalsowskich, zawierających atom kadmu [1] (przekrój modułu źródła pokazano na Rysunku 1) oraz źródło o pracy ciągłej [2], które dzięki unikatowej konstrukcji umożliwi pracę z cynkiem, który w wysokich temperaturach powoduje szybką degradację tradycyjnych materiałów, stosowanych w konstrukcji tego typu urządzeń (tzn. różnych gatunków stali). Ponadto, zaprezentuję nowobudowany moduł źródła, który może pracować w temperaturach przekraczających 1000°C, dzięki czemu możliwe będzie wytwarzanie dimerów, zawierających atom iterbu.

Jednym z głównych celów prowadzenia badań spektroskopowych dimerów van der waalsowskich jest wyznaczenie potencjałów badanych molekularnych stanów elektronowych na podstawie obserwowanych widm. Tradycyjnie stosuje się w tym celu metody takie jak np. RKR lub IPA (metoda odwróconego podejścia perturbacyjnego). W wystąpieniu przedstawię alternatywne metody wyznaczania potencjałów stanów elektronowych dimerów, wykorzystujące zarejestrowane widma, a bazujące na technikach sztucznej inteligencji i uczenia maszynowego. Metody te są rozwijane w Grupie Molekularnej Spektroskopii Laserowej we współpracy z grupą prof. Marka Krośnickiego z Uniwersytetu Gdańskiego. W swoim działaniu wykorzystują one sztuczne sieci neuronowe [3] (w tym tzw. sieci głębokie [4]) oraz algorytmy genetyczne [5] i mogą być stosowane zarówno w przypadku analizy widm wzbudzenia (przejścia *bound* ← *bound*), jak i widm fluorescencji (przejścia *bound* → *free*).



Rysunek 1: Przekrój wysokotemperaturowego modułu źródła o pracy impulsowej, umożliwiającego wytwarzanie dimerów zawierających atom kadmu

## Bibliografia

- [1] Urbańczyk T., Koperski J., High-temperature high-pressure all-metal pulsed source of van der Waals dimers: Towards the Einstein-Podolsky-Rosen experiment, *Rev. Sci. Instrum.* 83, 083114 (2012).
- [2] Dudek J., Puczka K., Urbańczyk T., Koperski J., High-temperature continuous molecular beam source for aggressive elements: An example of zinc, *Rev. Sci. Instrum.* 90, 115109 (2019).
- [3] Urbańczyk T., Koperski J., Neural networks and determination of diatomic molecule interatomic potential of cadmium dimer, *Spectrochim. Acta. A* 189, 502 (2018).
- [4] Horwat D., Krośnicki M., Urbańczyk T., Koperski J., Deep neural network for fitting analytical potential energy curve of diatomic molecules from ro-vibrational spectra, *Mol. Simul.* 47, 650 (2021).
- [5] Urbańczyk T., Koperski J., Genetic Algorithm for quick finding of diatomic molecule potential parameters, *Mol. Simul.* 46, 1073 (2020).