



Contribution ID: 84

Type: **Wystąpienie ustne // Talk**

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

Wednesday, 10 September 2025 12:00 (20 minutes)

Tlenek węgla (CO) jest jedną z kluczowych cząsteczek w badaniach atmosfer 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 ($a3\Pi - X1\Sigma^+$), 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).

Primary author: STASIK, Aleksandra (Laboratorium Spektroskopii Materiałów, Instytut Nauk Fizycznych, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska & Szkoła Doktorska Uniwersytetu Rzeszowskiego, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska)

Co-authors: TENNYSON, Jonathan (Wydział Fizyki i Astronomii, University College London, Gower Street, London WC1E 6BT, Wielka Brytania); Ms MALICKA, Marzena I. (Wydział Matematyki i Fizyki Stosowanej, Politechnika Rzeszowska, al. Powstańców Warszawy 12, 35-959 Rzeszów, Polska); Mr ALMEHAIRBI, Mubarak (Wydział Chemii, Uniwersytet Khalifa, Abu Zabi, Zjednoczone Emiraty Arabskie); Mr ABU ELKHER, Nariman (Wydział Chemii, Uniwersytet Khalifa, Abu Zabi, Zjednoczone Emiraty Arabskie); Ms EL-KORK, Nayla (Wydział Fizyki, Uniwersytet Khalifa, Abu Zabi, Zjednoczone Emiraty Arabskie); DE OLIVEIRA, Nelson (Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Départementale 128, 91190 Saint-Aubin, Francja); Ms YURCHENKO, Olga P. (Wydział Fizyki i Astronomii, University College London, Gower Street, London WC1E 6BT, Wielka Brytania); Mr HAKALLA, Rafał (Laboratorium Spektroskopii Materiałów, Instytut Nauk Fizycznych, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska); Ms AL ABDALLAH, Rania (Wydział Inżynierii Mechanicznej i Jądrowej, Uni-

wersytet Khalifa, Abu Zabi, Zjednoczone Emiraty Arabskie); Mr FIELD, Robert (Wydział Chemii, Massachusetts Institute of Technology, 77 Massachusetts Ave, Cambridge, MA 02139, USA); Mr MAHMOUD, Salman (Wydział Fizyki, Uniwersytet Khalifa, Abu Zabi, Zjednoczone Emiraty Arabskie); YURCHENKO, Sergey N. (Wydział Fizyki i Astronomii, University College London, Gower Street, London WC1E 6BT, Wielka Brytania); Mr RYZNER, Stanisław (Laboratorium Spektroskopii Materiałów, Instytut Nauk Fizycznych, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska); FURTENBACHER, Tibor (Complex Chemical Systems Research Group HUN-REN-ELTE, ELTE TTK Kémiai Intézet, Pázmány Péter sétány 1/A, 1117 Budapest, Węgry.); Mr UBACHS, Wim (Wydział Fizyki i Astronomii oraz LaserLaB, Vrije Universiteit, De Boelelaan 1105, 1081 HV Amsterdam, Holandia); SZAJNA, Wojciech (Laboratorium Spektroskopii Materiałów, Instytut Nauk Fizycznych, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska)

Presenter: STASIK, Aleksandra (Laboratorium Spektroskopii Materiałów, Instytut Nauk Fizycznych, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska & Szkoła Doktorska Uniwersytetu Rzeszowskiego, Uniwersytet Rzeszowski, al. Tadeusza Rejtana 16C, 35-959 Rzeszów, Polska)

Session Classification: Fizyka molekularna

Track Classification: Fizyka molekularna // Molecular physics