**NUMER IDENTYFIKACYJNY // CONTRIBUTION ID**

**Spektroskopia Fourierowska izotopologu 13C18O oraz analiza deperturbacyjna poziomów A1Π(*v* = 0 - 5)**

**Autor // Author:** Stanisław Ryzner1

1 *Laboratorium Spektroskopii Materiałów, Instytut Nauk Fizycznych, Uniwersytet Rzeszowski*

**Korespondujący autor // Corresponding Author:** sryzner@ur.edu.pl

Celem pracy jest dokładny opis poziomów energetycznych A1Π(*v* = 0 – 5) w izotopologu 13C18O. Do realizacji zadania wykorzystano dwie uzupełniające się techniki spektroskopii fourierowskiej: *(i)* spektroskopię emisyjną w zakresie światła widzialnego przy użyciu spektrometru Bruker IFS 125 HR (Uniwersytet Rzeszowski) oraz *(ii)* spektroskopię absorpcyjną w zakresie próżniowego ultrafioletu z wykorzystaniem spektrometru ze zwierciadłami Fresnela, działającego jako końcowa stacja wiązki DESIRS (Synchrotron SOLEIL, Francja). Schemat blokowy układów doświadczalnych zaprezentowano na Rys. 1.

Na podstawie danych uzyskanych powyższymi metodami, przeprowadzono analizę deperturbacyjną poziomów *v* = 1, 2, oraz 4. W analizie zastosowano efektywny Hamiltonian Browna oraz podejście *term-value fitting approach*, dzięki czemu wyeliminowano wpływ nieopisanych dotąd perturbacji w obrębie poziomów B1Σ+ oraz C1Σ+. Analizę wykonano przy użyciu programu PGOPHER [1]. W rezultacie otrzymano precyzyjne parametry molekularne badanych poziomów, w tym: zdeperturbowane stałe molekularne, parametry oddziaływań międzystanowych oraz dodatkowo, termy oscylacyjno-rotacyjne badanych poziomów elektronowych.

Po przeanalizowaniu wszystkich założonych poziomów, zostanie wykonana globalna analiza uwzględniająca poziomy A1Π(*v* = 0 - 5), dostarczając pełnego opisu oddziałujących ze sobą stanów w  rejonie 64 500 – 72 000 cm–1. Dodatkowo użyte zostaną dane z analizy wykonanej przez Hakalla i in. [2] dotyczącej poziomu A1Π(*v* = 0). Dzięki takiemu podejściu spodziewamy się uzyskać znaczne udoskonalenie znanych do tej pory danych molekularnych dla izotopologu 13C18O, który ze względu na większą masę zredukowaną w stosunku do standardowej cząsteczki CO, charakteryzuje się znacznie większym zagęszczeniem poziomów ro-wibronowych. Fakt ten pozwala na obserwację nieznanych dotąd interakcji między stanami wzbudzonymi, których nie wykrywa się w lżejszych izotopologach.

Obraz zawierający tekst, zrzut ekranu, Reklama internetowa, Strona internetowa

Zawartość wygenerowana przez AI może być niepoprawna.

Rys. 1 Schemat blokowy zastosowanej metodologii

**References**

[1] C.M. Western, *PGOPHER: A program for simulating rotational, vibrational and electronic spectra*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 186 (2017) 221–242

[2] R. Hakalla et al., *Precision spectroscopy and comprehensive analysis of perturbations in the A1Π(v = 0) state of 13C18O*, Mol. Phys. 117 (2019) 79–96