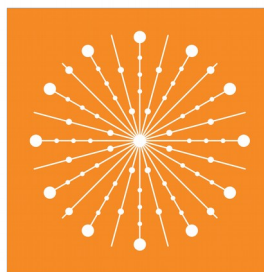


2019
6-7 KWIETNIA

SYMPOZJUM
MŁODYCH
NAUKOWCÓW
WYDZIAŁU FIZYKI UW



Modelowanie kształtu linii widmowych w układzie CO-N₂ metodami *ab initio*

Hubert Józwiak¹, H. Cybulski¹, N. Stolarczyk¹, P. Wcisło¹, F. Thibault²

¹*Instytut Fizyki, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Toruń, Polska*

²*Institut de Physique de Rennes, Université de Rennes 1, Rennes, Francja*

Modelowanie kształtu linii widmowych metodami *ab initio* stanowi wyzwanie dla współczesnej spektroskopii molekularnej. Metody te zostały już z powodzeniem wykorzystane przy badaniu układu H₂-He, dla którego zgodność obliczeń z wynikami eksperymentalnymi uzyskano na poziomie ok. 1% [1,2,3]. Stanowi to silną motywację do badań nad bardziej złożonymi układami, takimi jak słabo oddziałujące kompleksy molekularne występujące w atmosferze ziemskiej: CO-N₂, O₂-N₂ lub HF-N₂.

Celem pracy było zastosowanie w pełni kwantowego podejścia do wyznaczenia parametrów kształtu czystorotacyjnej linii R(0) w układzie CO-N₂. W pracy wykorzystano trzy dostępne powierzchnie energii potencjalnej [4,5,6], zapewniające wyznaczone najdokładniejszymi metodami współczesnej chemii kwantowej. W każdym przypadku rozwiązano tzw. równania close-coupling dla układu molekula-molekuła i uzyskano macierze rozproszenia dla energii kinetycznych zderzających się molekuł z zakresu 0.1 – 400 cm⁻¹. Ze względu na złożoność numeryczną problemu, skorzystano z tzw. przybliżenia stanów sprzężonych (coupled-states approximation) dla energii kinetycznych powyżej 170 cm⁻¹. Z wyznaczonych macierzy gęstości uzyskano wartości tzw. uogólnionego przekroju czynnego, związanego z poszerzeniem i przesunięciem linii widmowych, oraz tzw. parametru Dickego. Są to pierwsze tego typu obliczenia dla układu CO-N₂, wykorzystujące kwantowomechaniczne obliczenia rozproszeniowe.

Uzyskane wartości przekrojów czynnych są bardzo podobne dla wszystkich trzech powierzchni energii potencjalnej. Linia R(0) charakteryzuje się względnie dużym poszerzeniem – przekrój czynny opisujący poszerzenie linii jest aż o trzy rzędy wielkości większy od przekroju odpowiadającego za przesunięcie linii. Umożliwi to dość precyzyjne odtworzenie kształtu linii, pomimo względnie sporych niepewności związanych z określeniem jej przesunięcia. Ponadto, obliczenia dla tej linii stanowiły dopiero wstęp do badań nad kolejnymi liniami, także nad tymi, odpowiadającymi przejściom pomiędzy różnymi poziomami wibracyjnymi.