



## Информация за изпълнение на етап на проект

<b>Наименование на конкурса:</b>
Финансиране на научни изследвания 2017
<b>Основна научна област:</b>
Физически науки
<b>№ на договор:</b>
ДН18/12 от 11.12.2017 г.
<b>Начална и крайна дата на проекта:</b>
11.12.2017 – 11.12.2020
<b>Заглавие на проекта:</b>
<b>Лазерна спектроскопия на метални хидриди с приложение в астрофизиката</b>
<b>Базова организация:</b>
СУ „Св. Климент Охридски“
<b>Партньорски организации:</b>
<b>Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):</b>
Проф. дфзн Асен Енев Пашов
<b>Общ размер на отпуснатото финансиране за първи етап:</b>
60000 лв.
<b>Интернет страница на проекта (ако има такава):</b>
<b>Научни публикации по проекта:</b>
<u>I. Navaluyova, and A. Pashov; Modeling spectra of diatomic molecules, <i>AIP Conf. Proc.</i> <b>2075</b>, 050006 (2019); <a href="https://doi.org/10.1063/1.5091174">https://doi.org/10.1063/1.5091174</a></u>
<u>Ts. Tolev, G. Dobrev, I. Bozhinova, A. Avramova-Boncheva, S. Iordanova, and A. Pashov; Laser absorption spectroscopy of NiH Molecules, <i>AIP Conf. Proc.</i> <b>2075</b>, 050009 (2019); <a href="https://doi.org/10.1063/1.5091177">https://doi.org/10.1063/1.5091177</a></u>
<u>A. Georgiev, A. Blagoev, and A. Pashov; Detection of neutral tungsten by laser-induced fluorescence, <i>AIP Conf. Proc.</i> <b>2075</b>, 050005 (2019); <a href="https://doi.org/10.1063/1.5091173">https://doi.org/10.1063/1.5091173</a></u>
<u>A. Pashov, P. Kowalczyk, W. Jastrebski; Double minimum <math>3^1\Sigma^+_u</math> state in Rb2: spectroscopic study and possible applications for cold physics experiments, <i>Phys.Rev. A</i> <b>100</b>, 012507 (2019) <a href="https://doi.org/10.1103/PhysRevA.100.012507">https://doi.org/10.1103/PhysRevA.100.012507</a></u>



**Описание на очакваните резултати по проекта (до 1 стр. в рамките на полето по-долу):**

Предвижда се създаването на ефективен източник за производство на метални хидриди и експериментална постановка за свръхчувствителна лазерна спектроскопия, позволяваща регистрацията на честотите и определяне на сеченията за поглъщане на слаби преходи в молекули от интерес в астрофизиката. Апаратурата ще бъде използвана, за да се запълни липсващата информация за молекулите FeH и CrH. Това ще бъде направено по следния начин:

1. Създаване на нов източник за МН;
2. Разработване на експериментална постановка за високочувствителна спектроскопия;
3. Разработване на теоретичен модел за предсказване на честоти и интензивности на ненаблюдавани спектрални линии.

Източникът ще бъде проектиран и изработен в София. Той ще бъде тестван с червените ивици на NiH, където разполагаме с диоден лазер, с абсорбционна спектроскопия и CRDS. Успоредно с това в София ще бъде изработен честотностабилизиран диоден лазер, за стабилизация на честотния гребен в Лион. Успешното решаване на тези задачи ще позволи прилагането на CRDS, PS и Vernier спектроскопия в ИЧ ивици на FeH и CrH в Лион. Очакваните резултати са получаването на нови знания за честоти на преходи и сечения на преходи, които ще доведат до създаването на **синтетични спектри на ИЧ ивици** на тези молекули, които да бъдат сравнени със спектрите от звездни обекти. Това ще позволи на астрофизиците да разберат по-добре експерименталните си наблюдения от студени звезди и слънчеви петна и да извлекат максимална информация за тях, включително температура и магнитни полета.

Освен приложението в астрофизиката, резултатите от проекта ще имат фундаментално значение за физиката на двуатомните молекули и квантовата химия. Събирането на богата и прецизна експериментална информация ще позволи да се доразвият теоретичните модели за нейното описание. Нека припомним, че хидридите на преходните метали имат сложна електронна структура, където описанието на електронните състояния като отделни канали е твърде грубо. Пертурбациите, които свързват електронните състояния ще бъдат отчетени посредством модел със свързани канали. Параметрите на моделите ще бъдат напаснати чрез глобален нелинеен фит така, че да възпроизведат експерименталните данни в рамките на тяхната експериментална грешка. Успехът на този подход ще демонстрира способността на съвременната физика и квантова химия да моделират структурата дори на такива сложни молекули. Предимствата на тези модели, базирани на потенциални криви и радиални функции на пренебрегнатите оператори, е тяхната компактност и много добра предсказателна способност. В контекста на МН това свойство е важно, защото част от линиите не могат да се наблюдават лесно в лабораторни условия и тяхното предсказване от един физичен модел може да е единственият източник на информация.



## Членове на научния колектив

<i>Организации/участници<sup>1</sup></i>	<i>Бележка<sup>2</sup></i>
<b><i>Базова организация:</i></b>	
СУ „Св. Климент Охридски“	
<b><i>Ръководител на научния колектив</i></b>	
Проф. дфзн Асен Пашов	
<b><i>Участници:</i></b>	
Доц. д-р Снежана Йорданова	
Д-р Георги Добрев	ПД
Д-р Ивайла Божинова	ПД
Александър Георгиев	ДО
Илвие Хавальова	ДО
Dr. Amanda Ross	УЧ
Dr. Patrick Crozet	УЧ
<b><i>Партньорска организация:</i></b>	
<b><i>Участници:</i></b>	
<b><i>Партньорска организация:</i></b>	
<b><i>Участници:</i></b>	
<b><i>Партньорска организация:</i></b>	
<b><i>Участници:</i></b>	

<sup>1</sup> Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник като включите и участниците, които са работили по проекта не през целия период за изпълнение на проекта

<sup>2</sup> Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), или учен от чужбина (УЧ).



**Постигнати резултати от изпълнението на проекта и кратък анализ на тяхната приложимост (до 1 стр. в рамките на полето по-долу)**

В рамките на първия етап бяха предвидени три задачи:

- РП 1 Нов газоразряден източник
- РП 2 Честотностабилизиран лазер
- РП 3 Депертурбация в NiH

**РП 1 Нов газоразряден източник**

Усъвършенстване на съществуващата експериментална постановка, включително нов, импулсен режим на работа, нова детектираща система с времева разделителна способност. Измерени коефициенти на дифузия на NiH във H<sub>2</sub> и NH<sub>2</sub> във H<sub>2</sub>. И двете молекули са от интерес в астрофизиката, а измерените параметри са от съществено значение при моделиране на процеси в газова фаза (публикация се подготвя). Тези резултати са нови и значително разширяват полето на приложение на резултатите от този етап на проекта.

**РП 2 Честотностабилизиран лазер**

Лазерната система бе изработена в София и пренесена в Лион. Тя се състои от диоден лазер с оптична обратна връзка и необходимите контролери за управление на тока, температурата и дифракционната решетка. Постигната е ширина на линията под 500 kHz. Работата временно бе прекратена поради ремонт на лабораториите в Лион през 2018 – 2019 г.

**РП 3 Депертурбация в NiH**

Бяха разработени два програмни кода, за депетурбационен анализ, основаващи се на метода Fourier Grid Hamiltonian като средство за решаване на система от свързани уравнения на Шрьодингер. След това в програмата се напасват параметри на функциите, влизащи в операторите на взаимодействие така, че пресметнатите енергии да са в съгласие с експерименталните. Освен за работа по задачата с NiH, те бяха тествани и приложени при редица други задачи в молекулите Rb<sub>2</sub>, LiK, LiRb, KCs. В две от задачите резултатите са оформени в публикации с благодарности към ФНИ. Работата по останалите продължава като се очакват поне две нови публикации.

Работата по NiH тече в момента. Качеството на фита е около 0,1 cm<sup>-1</sup> (стандартно отклонение), което е много в сравнение с точността на експерименталните данни (0,005 cm<sup>-1</sup>), но е огромен напредък като се отчете факта, че само спин-орбиталното взаимодействие е около 600 cm<sup>-1</sup>! Това е една от най-сложните задачи по депертурбация, решавани някога, и затова постигнатите резултати вече са впечатляващи.

Предвидените през първия етап задачи като цяло са решени успешно. Част от тях са разширени и обогатени с нови получени резултати. За повече подробности виж приложения отчет.



ФОНД  
НАУЧНИ  
ИЗСЛЕДВАНИЯ

Министерство на образованието и науката

