

## **POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU**

### **Cel**

Obiektem badań niniejszego projektu jest najprostsza cząsteczka, tzn. molekularny wodór. Z fizycznego punktu widzenia cząsteczka taka jest układem dwóch połączonych ze sobą masywnych cząstek, które można wprawiać w oscylacje oraz nadawać im pewną rotację. Należy jednak pamiętać, że układ taki jest obiektem mikroskopowym i podlega prawom mechaniki kwantowej, a nie mechaniki klasycznej. Zatem zamiast mówić o klasycznych obrotach i wibracjach mówimy o kwantowych stanach rotacyjno-wibracyjnych (lub w skrócie stanach rowibracyjnych). Zasadniczą różnicą między opisem klasycznym i kwantowym jest to, że kwantowe stany związane mogą przyjmować tylko ściśle określone dyskretne wartości energii. Najbardziej powszechną metodą badania takich stanów jest spektroskopia molekularna, która polega na umieszczeniu molekuł w polu fali elektromagnetycznej i obserwowaniu jakie częstości są absorbowane. Wartości tych częstości (nazywane położeniami linii spektralnych) dają informację o wewnętrznej strukturze i dynamice molekuly. Dużo bogatszą informację można uzyskać badając nie tylko położenia linii, ale też ich kształt. W niniejszym projekcie badany będzie molekularny wodór zaburzony przez atomy helu (użyjemy mieszaniny wodoru i helu zdominowanej przez hel). Analiza kształtów linii spektralnych pozwoli nam badać nie tylko strukturę wewnętrzną cząsteczki wodoru, ale też fizykę zderzeń między cząsteczkami wodoru a atomami helu. W ramach mechaniki kwantowej zderzenie jest w istocie rozpraszaniem fali materii, a stan całego układu (w naszym wypadku molekula wodoru + atomom helu) nazywany jest stanem rozproszeniowym. Pierwszym celem projektu jest porównanie, na niespotykanym dotąd poziomie dokładności, eksperymentalnych kształtów linii wodoru zaburzonego helem z przewidywaniami teoretycznymi wychodzącymi z zasad pierwszych. Drugim celem projektu jest wykorzystanie opracowanego i eksperymentalnie zweryfikowany przez nas modelu do stworzenia kompletnej bazy danych parametrów opisujących kształty linii molekuly  $H_2$  zaburzonej atomami He.

### **Badania**

W ramach niniejszego projektu zostanie wykonany zarówno ultradokładny pomiar kształtów linii jak i obliczenia wychodzące z zasad pierwszych. W eksperymencie będzie wykorzystana wnęka optyczna o bardzo wysokiej finezji (układ dwóch zwierciadeł o niezwykle wysokim współczynniku odbicia i bardzo małych stratach). Wnęka taka pozwala uwięzić światło na długi czas co sprawia, że droga przebyta przez światło sięga kilku lub nawet kilkunastu kilometrów. W efekcie sygnał pochodzący z oddziaływania światła z molekułami jest istotnie wzmocniony, co umożliwi dokładne badanie kształtów linii spektralnych. Źródłem światła jest spektralnie wąski i niezwykle stabilny laser dowiązany do grzebień częstości optycznych (grzebień częstości optycznych to układ laserowy umożliwiający pomiar częstotliwości światła z dokładnością sięgającą kilkunastu miejsc znaczących), co z kolei przekłada się na zanedbywalny wpływ aparatury na kształt mierzonych widm i bardzo wysoką powtarzalność pomiarów. W części teoretycznej projektu rozpraszanie molekuł wodoru na atomach helu zostanie ujęte poprzez rozwiązanie odpowiedniego równania Schrödingera. Rozwiązanie to pozwoli opisać jak zderzenia zaburzają stan wewnętrzny molekuly oraz jej ruch postępowy, co w efekcie umożliwi badanie wpływu zderzeń na oddziaływanie światła z molekułami i tym samym na modelowanie kształtów linii widmowych.

### **Motywacja**

Wyniki projektu będą pierwszym porównaniem kształtu molekularnego rezonansu optycznego wyznaczonego z kwantowych obliczeń wychodzących z zasad pierwszych z ultradokładnym widmem eksperymentalnym. Sama wartość poznawcza projektu, jaką jest porównanie teorii z eksperymentem na niespotykanym dotychczas poziomie dokładności stanowić będzie bezpośredni wkład w rozwój nauki. Ponadto, poprawny opis kształtów linii widmowych jest kluczowy dla wielu gałęzi metrologii optycznej opartej na spektroskopii molekularnej. W szczególności jest on niezbędny w badaniach atmosfer Ziemi i innych planet. Wyniki dla, rozważanego w niniejszym projekcie, układu  $H_2$ -He znajdą zastosowanie w badaniach atmosfer gazowych olbrzymów (tzn. planet takich Jowisz) a w dłuższej perspektywie będą mogły być również zastosowane w badaniach planet pozasłonecznych. Ponadto, wyniki niniejszego projektu będą stanowiły pomost między obliczeniową chemią kwantową a ultradokładną spektroskopią molekularną, co umożliwi eksperymentalne testowanie teoretycznych powierzchni energii oddziaływania. W końcu zbiór danych wygenerowany w ramach tego projektu zostanie wdrożony do najbardziej popularnej bazy danych widm molekularnych HITRAN jako modelowy przykład uwzględniania efektów zderzeniowych.