

Cel

Obiektem badań niniejszego projektu jest cząsteczka tlenku węgla i jej oddziaływanie z atomami argonu. Z fizycznego punktu widzenia cząsteczka taka jest układem dwóch połączonych ze sobą masywnych cząstek, który może drgać i obracać się. Opisuując zachowanie pojedynczych cząstek nie możemy polegać na prawach fizyki klasycznej, lecz musimy wprowadzić opis kwantowy. W odniesieniu do molekuł oznacza to, że oscylacje i obroty mogą przebiegać tylko na pewne ściśle określone sposoby, z którymi powiązanie są dyskretne stany energetyczne. Najpowszechniejszym sposobem obserwacji tych stanów jest spektroskopia absorpcyjna, polegająca na dostarczaniu molekułom energii w postaci promieniowania elektromagnetycznego i rejestrowaniu jaka jego część jest pochłaniana. Zależność między częstością oscylacji pola a stopniem jego pochłonięcia przez molekułę przyjmuje określony kształt i taką funkcję nazywamy linią widmową. Analizując linie widmowe możemy pozyskać informacje zarówno o wewnętrznej strukturze i dynamice molekuły, jak i jej oddziaływaniu z otoczeniem (w tym przypadku o zderzeniach z atomami argonu). Najbardziej precyzyjne techniki spektroskopowe wykorzystują promieniowanie laserowe, którego częstotliwość może być bardzo precyzyjnie określona. W niniejszym projekcie użyty zostanie laser emitujący ultrakrótkie impulsy, generujący tzw. optyczny grzebień częstotliwości, którego promieniowanie jest równoważne promieniowaniu dziesiątek tysięcy laserów o pojedynczej częstotliwości. Głównym celem projektu jest pozyskanie w wyniku zarówno obliczeń teoretycznych jak i szerokopasmowych pomiarów dokładnych kształtów linii widmowych tlenku węgla zaburzonego argonem. W wyniku niedawnych pomiarów kształtów linii badanego układu, zaobserwowano niespodziewaną postać zależności położenia linii widmowych od ciśnienia argonu. Pobocznym celem projektu jest wyjaśnienie tej nieregularności oraz wykorzystanie pomiarów otrzymanych grzebieniem optycznych do złożonej analizy kształtów linii.

Badania

W części obliczeniowej projektu zostanie rozwiązane równanie Schrödingera opisujące rozpraszanie atomów argonu na cząsteczkach tlenku węgla. Z otrzymanego rozwiązania zostanie następnie wydobyta informacja o tym jak zderzenia wpływają na stan wewnętrzny molekuły i jak zmienia się jej kierunek ruchu oraz szybkość. Te informacje pozwolą nam opisać jak zderzenia wpływają na oddziaływanie światła z cząsteczkami i skonstruować kształty linii widmowych badanych przejść. Pomiary zostaną wykonane przy pomocy jednej z technik wykorzystujących precyzyjną wiedzę na temat energii promieniowania zawartego w widmie optycznego grzebienia częstotliwości do szerokopasmowej rejestracji wielu kształtów linii jednocześnie. Ze względu na bardzo mały stopień pochłaniania przez cząsteczki tlenku węgla energii w badanym zakresie, zostanie wykorzystana wnęka optyczna wzmacniająca absorpcję. Wnęka optyczna składa się z dwóch zwierciadeł o bardzo małym współczynniku transmisji oraz bardzo małych stratach. Fale elektromagnetyczne, których długość pozwala na utworzenie fali stojącej między zwierciadłami, zostają uwięzione we wnęcie na kilka mikrosekund w porównaniu do dwóch nanosekund potrzebnych na przebycie drogi równej długości wnęki w powietrzu. W efekcie droga przebyta przez światło dochodzi do kilkunastu kilometrów. Pozwala to na badanie absorpcji przez bardzo małe ilości tlenku węgla i pozwala na pominięcie efektów zderzeń między różnymi cząsteczkami tlenku węgla.

Motywacja

Wyniki projektu będą pierwszymi teoretycznymi przewidywaniami oraz pierwszymi dokładnymi pomiarami kształtów linii tlenku węgla zaburzonego argonem w badanym zakresie spektralnym. Obliczenia jako jedne z nielicznych zostaną wykonane w zupełności w ramach teorii kwantowej oraz przy uwzględnieniu realistycznego potencjału oddziaływania. Do pomiarów zostanie wykorzystana niedawno powstała technika badawcza, która dotychczas nie była używana do wyznaczania kształtów linii na bardzo wysokim poziomie dokładności. Rozwój tej techniki będzie bezpośrednim wkładem w powiększenie zasobu narzędzi dzięki, którym możemy z dużą precyzją badać naturę. Wykonanie w ramach tego samego projektu obliczeń oraz eksperymentu pozwoli na bieżące weryfikowanie otrzymywanych wyników i pozwoli na szybkie zbadanie ewentualnych niespodziewanych efektów. Planowane przewidywania teoretyczne będą niezbędne do wyjaśnienia zagadki nieliniowej zależności między położeniem linii a ciśnieniem, której wyjaśnienie wzbogaci wiedzę naukową. Wyniki znajdą zastosowanie w badaniach atmosfery, które m. in. próbują wyjaśnić globalne zmiany klimatu, oraz w badaniach planet poza Układem Słonecznym. Projekt pozwoli zweryfikować dokładność nowo otrzymanej powierzchni energii potencjalnej oddziaływania molekuły tlenku węgla z argonem. Ta sama powierzchnia znajdzie zastosowanie w badaniach nad zimnym związkiem Ar-CO i siłami międzycząsteczkowymi, decydującymi o trwałości tego związku.