

STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE

Z cząsteczkami schłodzonymi do temperatur poniżej $T = 10^{-3}$ K związane są problemy badawcze sięgające fundamentów mechaniki kwantowej. Cząsteczki takie są obiecującymi kandydatami w potencjalnych nowatorskich zastosowaniach, od ultrazimnej chemii i dokładnych pomiarów, do obliczeń kwantowych. Dlatego zimne i ultrazimne cząsteczki otwierają nowe i obiecujące dziedziny badawcze w fizyce i chemii ze względu na ich kwantową naturę.

Położenia i intensywności linii w widmie cząsteczkowym w ultraniskich temperaturach mogą być zmierzone z niezwykle dokładnością ze względu na prawie zupełną nieobecność poszerzenia dopplerowskiego. Tak dokładne pomiary to wielkie wyzwanie dla teorii, które z pewnością będzie prowadzić do nowych teoretycznych i obliczeniowych odkryć. Dokładne pomiary własności molekularnych i oddziaływań może też wpłynąć na fundamenty współczesnej fizyki, takie jak doświadczalna weryfikacja modeli wychodzących poza model standardowy. Zmiana w czasie stałych fundamentalnych jest dobrym przykładem zagadnień, w których metody fizyki molekularnej w ultrazimnych temperaturach mogą być stosowane w podstawowych działach fizyki. Ultrazimne cząsteczki mogą być też stosowane w wysoko rozdzielczej spektroskopii jako pośrednia próbka oddziaływań międzyatomowych dla bardzo dużych odległości między atomami, uwzględniając efekty relatywistyczne i QED.

Zadania chemika kwantowego w dziedzinie fizyki molekularnej w ultraniskich temperaturach to (i) dostarczenie eksperymentatorom przewidywań dla zróżnicowanych możliwych procesów fizycznych, które prowadziłyby do efektywnego otrzymywania ultrazimnych cząsteczek, (ii) przewidywanie danych opisujących spektroskopowe i rozproszeniowe własności kompleksów cząsteczkowych i zderzeniowych, oraz (iii) interpretacja dostępnych danych eksperymentalnych. Dlatego jeden kierunek proponowanych badań skoncentruje się na przewidywaniach teoretycznych dla stanowo selektywnej produkcji jonów molekularnych.

Poprawne wykonanie tego celu będzie wymagało postępu w teorii struktury elektronowej. Postęp ten planujemy w trzech kierunkach: zwiększenie dokładności metod przybliżonych używanych do obliczeń powierzchni energii potencjalnej, elementów macierzowych sprzężenia spin-orbita i nieadiabatyicznego, jedno- i wielofotonowych momentów przejścia oraz dynamicznego przesunięcia Starka, aby w pełni ilościowo interpretować wyniki eksperymentalne uzyskane spektroskopią wysokiej rozdzielczości oraz przedstawi wiarygodne przewidywania dla przyszłych eksperymentów.