

Rozpraszanie kwantowe optycznie wzbudzonych molekuł obliczenia z zasad pierwszych i ultradokładne pomiary dla układów molekularnych istotnych w badaniach atmosfer Ziemi, planet i egzoplanet

Głównym celem projektu jest użycie niezwykle precyzyjnie kontrolowanych układów laserowych do obserwowania molekuł. W szczególności wykorzystamy te techniki do badania ich fundamentalnych własności chemicznych i fizycznych takich jak struktura molekuł, oddziaływania między molekułami i atomami oraz przede wszystkim do badania zderzeń molekuł. Należy zaznaczyć, że w skali molekularnej zderzeń nie można już traktować klasycznie tylko należy na nie patrzeć czysto kwantowo, tj. jako rozpraszanie fal materii. W praktyce, używając naszego podejścia, tego typu efekty zderzeniowe można obserwować jako zaburzenia kształtów molekularnych rezonansów optycznych (generalnie oddziaływanie światła laserowego z molekułami manifestuje się jako seria wąskich rezonansów; obecność zderzeń powoduje, że rezonanse te stają się szersze i charakteryzują się skomplikowanym i nietypowym kształtem). W ramach tego projektu przeprowadzimy zarówno obliczenia teoretyczne wychodzące z zasad pierwszych jak i przeprowadzimy eksperymenty wykorzystując nowe niezwykle precyzyjne i dokładne techniki laserowe. Celem projektu jest wykorzystanie ultradokładnych eksperymentalnych widm molekularnych do testowania obliczeń kwantowych.

Badania zderzeniowego zaburzenia kształtów rezonansów optycznych odgrywają dużą rolę w fizyce atomowej i molekularnej. Jak opisano powyżej, z jednej strony otwierają one drogę do badania oddziaływań i dynamiki molekularnej. Jednak z drugiej strony, ograniczają one możliwości metrologii optycznej opartej na spektroskopii molekularnej. W szczególności efekty te mogą ograniczać dokładność pomiarów atmosfer Ziemi oraz innych planet i egzoplanet. Powodem podjęcia tej tematyki badawczej jest to, że możemy wykorzystać nasze obliczenia kwantowe oraz techniki eksperymentalne do rozwiązania tego problemu. W tym projekcie wykorzystamy nasze eksperymentalnie przetestowane obliczenia kwantowe do stworzenia kompletnego zbioru danych parametrów kształtów linii molekularnych, które później będą mogły być wykorzystane do zwiększenia dokładności badań atmosfer Ziemi oraz innych planet i egzoplanet.

Teoretyczna część tego projektu będzie głównie bazowała na numerycznym rozwiązywaniu odpowiednich równań mechaniki kwantowej dla układów molekularnych które są ważne dla badań atmosferycznych. W obliczeniach tych wykorzystamy klastry obliczeniowe znajdujące się zarówno w naszym Instytucie jak i w Instytutach naszych partnerów zagranicznych. Część eksperymentalna będzie bazowała na wykorzystaniu wnęk optycznych o bardzo wysokiej finezji. Oznacza to, że fotony z wiązki laserowej mogą być uwięzione we wnęce na długi czas co dramatycznie zwiększa czułość i dokładność tej metody. Ponadto wykorzystamy nowe podejście polegające na szybkim przestrajaniu lasera. Umożliwi to zwiększenie dokładności pomiaru o kolejny rząd wielkości, co jest kluczowe dla badań efektów zderzeniowych.