

Odkrycie wydajnego procesu pozwalającego na przeprowadzenie sztucznej fotosyntezy wydaje się być kamieniem filozoficznym współczesnej cywilizacji. Opracowanie tak wysoko zaawansowanych technologii bez poprawnego opisu zjawisk zachodzących w skali atomowej wydaje się niemożliwe. Z pomocą przychodzi nam kwantowa teoria układów otwartych, dzięki której możemy zrozumieć w jaki sposób najmniejsze składniki otaczającej nas materii oddziałują ze swoim otoczeniem. W szczególności, pozwala ona opisać układy kwantowe w sposób dynamiczny, czyli przewidzieć zmianę ich stanu w czasie. Jeśli jednak otoczenie jest zbyt złożone, dokładny opis całego układu staje się niemożliwy, a polegać możemy jedynie na opisie statystycznym tj. efektywnym i przybliżonym.

Sama teoria kwantowych układów otwartych pomimo jej wielkich sukcesów do tej pory również obciążona była pewnymi problemami. Jej wiodące równania miały albo ograniczoną stosowalność (równania master w postaci GKLS), lub sposób poprawnej interpretacji ich przewidywań był niejasny (równanie Blocha-Redfielda). Badacze po dzień dzisiejszy toczą ożywioną dyskusję nad tym, który rodzaj równań powinien być stosowany i w jakich sytuacjach. Ostatnio jednak zostało zaproponowane podejście w jaki sposób pozbyć się wspomnianych problemów, w sposób ogólny, poprzez użycie jeszcze innego typu równań dynamicznych (zregulowanych równań kumulantu, *ang. regularized cumulant equations*).

Zadaniem badawczym, które realizowane jest w tym projekcie jest przeprowadzenie analizy skuteczności oraz wiarygodności nowo zaproponowanych równań dynamicznych. By to osiągnąć wykorzystujemy najskuteczniejszą możliwą metodę, tzn. zastosowanie ich do opisu dwóch skrupulatnie wybranych układów fizycznych oraz porównanie otrzymanych rezultatów z innymi metodami przybliżonymi, lub dokładnymi jeśli jest to możliwe.

Pierwszy z wybranych przez nas układów jest to struktura składająca się z trzech poziomów energetycznych. Zamierzamy ją opisać korzystając z "pierwszych zasad" mechaniki kwantowej, tak by odzwierciedlała trzy wybrane poziomy energetyczne w atomie oddziałującym z zewnętrznym polem elektromagnetycznym (np. światłem widzialnym). Warto dodać, że układ ten był już wcześniej badany właśnie w kontekście sztucznej fotosyntezy. Drugi układ jest to dobrze znany w fizyce przypadek kwantowego (tłumionego) oscylatora harmonicznego, oddziałującego z otoczeniem składającym się z licznego zbioru innych podobnych oscylatorów. Przypadek ten został przez nas wybrany ze względu na możliwość porównania nowo zaproponowanej metody z rezultatami dokładnymi.

W postawionej przez nas hipotezie badawczej zasugerowaliśmy, że nowy rodzaj równań dynamicznych może okazać się skutecznym i wydajnym sposobem opisu dynamiki kwantowych układów otwartych, nieobciążonym problemami pojawiającymi się w innych podejściach. Jeśli uda się potwierdzić postawioną przez nas hipotezę badawczą nowe równania dynamiczne mogą zastąpić istniejące dotychczas sposoby opisu kwantowych układów otwartych. Co więcej, mogą posłużyć one innym naukowcom jako nowe, lepsze narzędzia pracy i przyczynić się do odkrycia nieznanych dotąd zjawisk fizycznych, głębszego zbadania zjawisk już znanych i w konsekwencji rozwoju nowych technologii.