

Precyzyjna i dokładna spektroskopia słabych molekularnych linii widmowych wspomagana obliczeniami ab initio

Spektroskopia jest potężnym narzędziem umożliwiającym głęboki wgląd w fizykę mikroświata. Precyzyjne badania struktury cząsteczek oraz podstawowych oddziaływań molekularnych odgrywają ważną rolę w wielu zastosowaniach, takich jak monitorowanie atmosfery ziemskiej w celu identyfikacji źródeł zanieczyszczeń i modelowania zmian klimatu, wykrywanie zanieczyszczeń w produkcji układów półprzewodnikowych, nieinwazyjna diagnostyka medyczna, wykrywanie śladowych ilości materiałów wybuchowych, zrozumienie pochodzenia i ewolucji galaktyk, czy poszukiwanie życia pozaziemskiego. W przypadku badań podstawowych spektroskopia jest wykorzystywana do poszukiwania nowej fizyki poza Modelem Standardowym, do oceny, czy stałe fizyczne ulegają zmianom w czasie, lub do weryfikacji założeń dotyczących dynamiki zderzeń molekularnych. Wiele z tych zastosowań wiąże się z wysokimi wymaganiami dotyczącymi jakości danych spektroskopowych. Satelitarny monitoring stężenia gazów cieplarnianych już obecnie wymaga danych referencyjnych o dokładnościach lepszych niż procent. W przypadku cząsteczkowego wodoru potwierdzenie poprawności teoretycznych obliczeń parametrów kształtu linii oraz przewidywań elektrodynamiki kwantowej (QED) dotyczących częstotliwości przejść wymaga danych eksperymentalnych o dokładnościach na poziomie odpowiednio 10^{-3} i 10^{-10} . W modelowaniu atmosfer egzoplanet istotna jest kompletność teoretycznych modeli parametrów kształtu linii (np. natężeń linii) dla bardziej złożonych cząsteczek, która wymaga uwzględnienia – zwykle bardzo słabych – linii widmowych będących wynikiem przejść do wyższych stanów energetycznych.

W niniejszym projekcie planujemy połączyć wysiłki eksperymentalne i teoretyczne w celu rozwiązania powyższych problemów. Przedmiotem badań będą cząsteczkowy wodór i tlenek węgla, czyli proste układy molekularne ważne w badaniach podstawowych, środowiskowych i astrofizycznych.

W ramach projektu po raz pierwszy zostaną wykonane bardzo dokładne i precyzyjne pomiary wybranych linii widmowych tych cząsteczek położonych w zakresie bliskiej podczerwieni. Osiągnięcie tego celu wiąże się z budową unikalnego spektrometru, który umożliwi przeprowadzenie wysokorozdzielczej spektroskopii molekularnej z osią częstotliwości rejestrowanych widm dowiązaną do pierwotnych wzorców częstotliwości. W ramach niniejszego projektu wykorzystane zostaną najnowsze osiągnięcia w dziedzinie spektroskopii laserowej, która w ciągu ostatnich lat doświadczyła ogromnego wzrostu w odniesieniu do takich parametrów jak czułość, rozdzielczość spektralna i stabilność osi częstotliwości. Zostaną wykorzystane trzy bardzo dokładne techniki spektroskopowe wykorzystujące wnęki optyczne: spektroskopia strat we wnęce (CRDS, *cavity ring-down spectroscopy*), spektroskopia szerokości modów wnęki (CMWS, *cavity mode-width spectroscopy*) oraz spektroskopia dyspersyjna (CMDS, *cavity mode-dispersion spectroscopy*). Ostatnia z nich opiera się wyłącznie na pomiarze częstotliwości, tj. wielkości fizycznej aktualnie mierzonej najdokładniej, i ma potencjał, aby stać się najdokładniejszą ze wszystkich metod spektroskopowych. Zastosowanie tych trzech ultraczułych technik spektroskopowych pozwoli na wyeliminowanie błędów aparaturowych wpływających na wyznaczane parametry kształtu linii oraz zwiększy możliwości metrologiczne spektrometru.

Właściwa analiza danych będzie wymagała modelu uwzględniającego szereg efektów fizycznych wpływających na kształt linii widmowych. Obecnie następuje proces przechodzenia spektroskopowych baz danych na opis linii widmowych wykraczający poza prosty profil Voigta. Niedawno został opracowany nowy profil referencyjny, który jest w stanie odtworzyć widma molekularne w szerokim zakresie ciśnień z pożądaną dokładnością wynoszącą poniżej 0.1%. Analiza kształtu linii z wykorzystaniem tego modelu będzie uzupełniona obliczeniami wychodzącymi z pierwszych zasad mechaniki kwantowej. W ramach projektu planujemy współpracę z wiodącymi na świecie grupami zajmującymi się teoretyczną spektroskopią molekularną w celu obliczenia parametrów kształtu linii, takich jak natężenia linii czy szerokości i przesunięcia zderzeniowe.

Wyniki projektu umożliwią porównanie teorii i eksperymentu na niespotykanym dotychczas poziomie. Wyznaczone położenia linii widmowych cząsteczkowego wodoru, jednego z najważniejszych układów w badaniach podstawowych, pozwolą na testy elektrodynamiki kwantowej dla molekuł na nieosiągalnym dotąd poziomie dokładności. Cząsteczki będące obiektem badań w ramach projektu odgrywają kluczową rolę w badaniach atmosferycznych, środowiskowych i astrofizycznych, zatem wyniki projektu mogą mieć wpływ na te dziedziny. Lista parametrów kształtu linii widmowych wygenerowana w ramach projektu zostanie włączona do najpopularniejszych spektroskopowych baz danych, dzięki czemu wyniki projektu będą dostępne dla szerokiej społeczności naukowej.