

## **Kwantowe rozpraszanie optycznie wzbudzonych molekuł tlenu Od fizyki fundamentalnej do badań atmosferycznych**

W ramach tego projektu wykorzystamy podstawowe prawa teorii kwantowej do obliczenia, jak cząsteczka tlenu zderza się z cząsteczkami azotu. Cząsteczki azotu i tlenu są głównymi składnikami atmosfery ziemskiej (azot stanowi 78% objętości, a tlen 21%), dlatego ważne jest zbadanie efektów zderzeniowych dla tych dwóch molekuł. Najskuteczniejszym sposobem zbierania danych badawczych o atmosferze ziemskiej jest zastosowanie zdalnych metod opartych na spektroskopii molekularnej, albo za pomocą misji satelitarnych, albo platform naziemnych zbierających światło przechodzące przez atmosferę i dokonujących szczegółowej analizy rejestrowanego światła i jego składowych które zostały pochłonięte przez cząsteczki tworzące atmosferę. Problem polega na tym, że sygnał spektroskopowy jest w dużej mierze zaburzony przez fakt, że w warunkach atmosferycznych cząsteczki zderzają się ze sobą bardzo często. Dlatego, aby dokładnie wywnioskować właściwości atmosfery (temperatura, stężenie i ciśnienie zależne od położenia) z sygnałów spektroskopowych, należy bardzo dobrze zrozumieć procesy zderzeniowe. Ten projekt ma na celu rozwiązanie tego problemu w przypadku tlenu cząsteczkowego. Podejmiemy się szczegółowych obliczeń kwantowych, które pozwolą nam zrozumieć różne zjawiska zderzeniowe i dostarczyć danych referencyjnych do badań atmosferycznych. Rozważymy przejścia w paśmie A tlenu – pasmo to dobrze nadaje się do badań atmosfery, ponieważ przejścia z tego pasma są wystarczająco silne, aby można je było dokładnie zarejestrować, ale nie za silne, aby nie nasycić sygnału.

Drugim celem projektu jest wykorzystanie tych obliczeń do badań podstawowych. Będziemy nad nim współpracować z grupą eksperymentalną z National Institute of Standards & Technology (NIST), Gaithersburg, USA. Połączenie naszych w pełni kwantowych obliczeń *ab initio* efektów zderzeniowych dla tlenu cząsteczkowego (zaplanowanych w tym projekcie) i komplementarnych ultra-dokładnych widm eksperymentalnych od partnera z NIST (zmierzonych przy użyciu najnowocześniejsze technik opartych na wnękach optycznych o bardzo wysokiej finezji) dadzą nam unikalną szansę do badania fizyki zderzeń w skali molekularnej.

Badania te będą polegały głównie na wykorzystaniu zaawansowanych metod numerycznych do rozwiązywania równań teorii kwantowej do opisu zderzeń molekularnych. W skali molekularnej zderzenia nie mogą być już traktowane klasycznie, tak jak to intuicyjnie postrzegamy w codziennym doświadczeniu makroskopowym, ale raczej należy je postrzegać jako w pełni kwantowe zjawisko rozpraszania fal materii. Do obliczeń wykorzystamy klastry komputerowe (zlokalizowane w naszym Instytucie, instytutach naszych partnerów z innych grup badawczych oraz powszechnie dostępnych ośrodkach obliczeniowych).