

Tytuł:

Rozwój badań nad zderzeniami molekularnymi do granic metod obliczeniowych fizyki kwantowej i ultradokładnej spektroskopii laserowej; nowe podejście do generowania referencyjnych danych spektroskopowych dla badań atmosfer planet

Informacje o atmosferach Ziemi, innych planet, ich księżyców i egzoplanet są na ogół pozyskiwane zdalnie poprzez analizę światła przechodzącego przez atmosferę danego obiektu. Cząsteczki tworzące różne warstwy atmosferyczne pochłaniają światło o określonych częstotliwościach, pozostawiając swoisty 'odcisk palca' charakterystyczny dla danej molekuly. Problem można odwrócić i z analizy struktury spektralnej całkowitej absorpcji można wywnioskować skład atmosfery oraz właściwości takie jak ciśnienie czy temperatura. Ważnym czynnikiem w tej metodologii jest zaburzenie struktury obserwowanego widma (ściśle zaburzenie kształtów optycznych rezonansów molekularnych) przez zderzenia między cząsteczkami. Konieczne jest dokładne opisanie tego typu efektów zderzeniowych, aby właściwie badać atmosfery za pomocą zdalnych technik spektroskopowych.

Celem tego projektu jest całkowicie nowe podejście do dostarczania referencyjnych danych spektroskopowych o kształtach linii molekularnych, opartych na eksperymentalnie potwierdzonych obliczeniach ab initio rozpraszania kwantowego. Z jednej strony wykonamy najnowocześniejsze obliczenia numeryczne efektów zderzeniowych dla cząsteczek molekularnych istotnych dla badań atmosferycznych (takich jak CO, O₂ czy halogenowodory zaburzone zderzeniami z O₂ lub N₂). Z drugiej strony wykonamy komplementarne pomiary w oparciu o ultradokładne spektrometry laserowe z wnękami optycznymi o wysokiej finezji. Wnęka optyczna o wysokiej finezji ma wyjątkową zdolność do utrzymania w swoim wnętrzu wiązki laserowej przez długi czas, co zapewnia wyjątkowo długą drogę oddziaływania światła z cząsteczką, a co za tym idzie dużą czułość, co ma kluczowe znaczenie dla naszych badań. Wreszcie, poza motywacją atmosferyczną, odwrócimy logikę problemu i zamiast wykorzystywać teorię kwantową do dostarczania przydatnych referencyjnych danych spektroskopowych do różnych eksperymentów, użyjemy naszych ultradokładnych pomiarów do walidacji samych obliczeń kwantowych.