

Naukowcy dążą do lepszego zrozumienia budowy różnych cząsteczek, ich oddziaływań oraz wpływu różnych czynników zewnętrznych na ich właściwości. Badania prowadzone w ultraniskich temperaturach to nowe podejście do badania egzotycznych zjawisk w układach atomowych i molekularnych. W temperaturach 1 K i niższych falowa natura materii jest nabiera na znaczeniu, a opis kwantowy staje się konieczny. Do tej pory już kilka nagród Nobla zostało wręczonych za badania nad ultrazimną materią, w tym produkcję atomowego kondensatu Bosego-Einsteina oraz opracowanie technik chłodzenia laserowego i pułapkowania. Cząsteczki wieloatomowe stanowią większe wyzwanie w skutecznym chłodzeniu i uwięzieniu niż atomy lub cząsteczki dwuatomowe, ponieważ posiadają dodatkowe rotacyjne i wibracyjne stopnie swobody. Jednocześnie złożoność ich budowy i wzajemnych oddziaływań sprawił, że świat nauki dostrzegł zawarty w nich potencjał badawczy. Zdolność do precyzyjnego kontroli kwantowej cząsteczek wieloatomowych jest narzędziem wielu interdyscyplinarnych projektów badawczych z zakresu symulacji i obliczeń kwantowych, badania mechanizmów reakcji chemicznych czy ultraprecyzyjnej spektroskopii.

W ramach projektu będziemy wykorzystywać i rozwijać metody chemii kwantowej i fizyki molekularnej. Dokładnie zbadamy budowę elektronową wybranych układów molekularnych składających się z atomów metali alkalicznych, ziem alkalicznych, lantanowców i aktynowców układu okresowego pierwiastków. W ramach obliczeń kwantowo-chemicznych określimy potencjały oddziaływań oraz właściwości fizykochemiczne różnych stanów elektronowych wybranych molekuł. Pomoże to ustalić, czy dana układ może być schłodzony reżimu miliKelwinów. W kolejnym kroku zbadamy teoretycznie wrażliwość na bardzo nieoczywiste efekty zachodzące w cząsteczkach związane z procesem łamania podstawowych symetrii natury. Jednym z nich jest naruszenie tzw. symetrii CP. W efekcie, cząstki elementarne takie jak na przykład naładowane ujemnie elektrony mogą wykazywać istnienie dipolowego momentu elektrycznego. Dogłębne zrozumienie natury tych zjawisk będzie miało fundamentalne znacznie dla poznawania natury Wszechświata i pełniejszego zrozumienie procesu jego ewolucji.

Wielość kombinacji połączeń między atomami jest źródłem bogactwa w układach wieloatomowych. Daje to solidne podstawy do twierdzenia, że istnieje wciąż wiele fascynujących zjawisk do odkrycia w tych układach. Mogą one przyczynić do lepszego zrozumienia otaczającego nas świata, ale także rozwoju wielu nowoczesnych technologii opartych na teorii kwantowej. Zrealizowany projekt będzie stanowił istotny wkład w zrozumienie chemii oraz fizyki na najbardziej fundamentalnym poziomie. Ponadto będzie mógł być źródłem naukowej inspiracji do dalszych poszukiwań z zakresu fizyki poza Modelem Standardowym np. wyjaśnienia asymetrii stosunku materii do antymaterii we Wszechświecie.