

Ultradokładne obliczenia kształtów molekularnych linii widmowych z zasad pierwszych

Nikodem Stolarczyk

Instytut Fizyki, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

Większość wiedzy na temat Wszechświata, ludzkość zawdzięcza spektroskopii. Dzięki tej technice pozyskujemy kluczowe informacje o egzoplanetach, gwiazdach i przestrzeni międzygwiazdowej. Zderzenia molekuł mają istotny wpływ na widma, powodując zaburzenia kształtów linii pod wpływem oddziaływań międzymolekularnych.

Podczas mojego referatu zaprezentuję metodologię, która łączy teorię kwantowego rozpraszania molekuł z teorią kształtu linii widmowych. Nasze podejście pozwala na obliczenia widma w pełni z zasad pierwszych, dzięki czemu możemy symulować syntetyczne kształty linii widmowych bez dopasowywania parametrów do danych eksperymentalnych.

Ponieważ nasze obliczenia wynikają w pełni z zasad pierwszych, możemy zweryfikować ich dokładność poprzez bezpośrednie porównanie syntetycznych linii widmowych z tymi zmierzonymi w laboratorium. Przedstawię wyniki walidacji naszej metodologii na przykładzie kilku układów molekularnych, takich jak H_2 -He, HD-He, D_2 - H_2 , H_2 -Ar i CO-Ar. Te testy potwierdzają dokładność naszych obliczeń na poziomie poniżej 1%.

Na zakończenie pokażę, jak wykorzystujemy naszą metodologię do generowania obszernych zestawów danych parametrów kształtów linii widmowych dla bazy danych HITRAN. Jak dotąd, w pełni opracowaliśmy dane dotyczące molekuly wodoru, zapewniając łącznie listy kilkudziesięciu tysięcy przejść w molekułach H_2 oraz HD zaburzonych H_2 oraz helem.