

## AstroDySp

### Dynamika i spektroskopia małych i średnich cząsteczek astrofizycznych

#### Streszczenie

Jeśli chcemy nadać sens miejscu, jakie zajmujemy we wszechświecie, musimy cofnąć się do jego początków i zrozumieć mechanizmy i procesy formowania się gwiazd, planet i egzoplanet w ośrodku międzygwiazdowym (ISM). W medium międzygwiazdowym naszej Drogi Mlecznej (medium między gwiazdami) przestrzeń nie jest tak naprawdę pusta, ale wypełniona gazem i pyłem, jest rezerwuarem przyszłych gwiazd. W obłokach międzygwiazdowych lista wykrytych molekuł, atomów i jonów, w których panują szczególne warunki, od tamtej pory nie przestała się powiększać. W istocie, zrozumienie sposobu, w jaki molekuły tworzą się i stają się bardziej złożone, zapewnia obszerny wgląd w to, jak kończymy z formowaniem się planety takiej jak Ziemia -planety niosącej życie. To medium jest często poza równowagą termodynamiczną, z powodu niezwykle niskich gęstości (rozproszona chmura  $n \sim 10^1$  do  $10^2$  na  $\text{cm}^3$  i gęsta chmura  $n \sim 10^4$  do  $10^8$  na  $\text{cm}^3$ ) w porównaniu z gęstością ziemskiej atmosfery ( $n \sim 10^{19}$  na  $\text{cm}^3$ ). Aby móc dokładnie rozszyfrować to środowisko, interesujące jest określenie populacji molekularnych poziomów energetycznych w MIS. Wymaga to szczegółowej znajomości molekularnych widm spinowo-rowibracyjnych oraz szybkości zderzeń w częściej występujących procesach osiadania nieelastycznego.

W pierwszej części projektu scharakteryzujemy ważne spektroskopowo astrofizyczne molekuły, jakimi są cząsteczki łańcuchów węglowych i ich jony, które stanowią  $\sim 40\%$  wykrytych do tej pory międzygwiazdowych gatunków molekularnych. Podczas tego projektu powierzchnie energii potencjalnej tych cząsteczek zostaną wykorzystane do badań ruchu jąder, aby wyznaczyć ich dokładne widma.

W ISM populacje molekularnych poziomów wibracyjnych są kontrolowane nie tylko przez temperaturę gazu międzygwiazdowego i procesy radiacyjne, ale także przez procesy kolizyjne rządzące wzbudzeniami i deekscytacjami molekuł na inne poziomy energetyczne. Ośrodek międzygwiazdowy, który zajmuje około 10% masy naszej galaktyki, składa się zasadniczo z 90% wodoru w postaci atomowej lub cząsteczkowej i 10% helu, pozostałe pierwiastki występują jedynie w śladowych ilościach. Dlatego badania dynamiki zderzeń obfitych cząsteczek w ISM z  $\text{H}_2$  i He są niezwykle interesujące dla charakterystyki astrofizycznej. W przeciwieństwie do zjawisk radiacyjnych, zjawiska wzbudzeń kolizyjnych nie są łatwe do zmierzenia w laboratorium. Dlatego, aby zrozumieć warunki fizyko-chemiczne środowisk astrofizycznych, które chcemy badać, konieczna jest wystarczająco dokładna znajomość tych procesów kolizyjnych, które charakteryzują się prawdopodobieństwem przejścia z jednego stanu energetycznego do drugiego dla danej temperatury: szybkości zderzeń. Druga część projektu dotyczy więc wyznaczenia szybkości zderzeń małych i średnich układów molekularnych badanych spektroskopowo w zderzeniach z He i  $\text{H}_2$ , gdzie wygenerujemy ich powierzchnie energii potencjalnej, a następnie przeprowadzimy pełne kwantowe obliczenia rozproszeniowe.

Proponowane badania polegają na dostarczeniu społeczności astrofizycznej bardzo dokładnych własności spektroskopowych i szybkości zderzeń niezbędnych do modelowania obserwowanych linii, zwłaszcza po wdrożeniu nowych narzędzi obserwacyjnych, takich jak interferometr ALMA czy JWST. To pomoże odpowiedzieć na szereg pyta związanych z obecnością złożonych molekuł organicznych we wszechświecie. Projekt ten pokaże również wpływ zastosowania bardzo precyzyjnych metod kwantowej i dynamiki jądrowej oraz wielowymiarowych powierzchni energii potencjalnej obliczonych najnowszymi metodami chemii kwantowej na częstości zderzeń i własności spektroskopowe.