

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Ze względu na dużą toksyczność lub radiotoksyczność materiałów zawierających aktynowce, badania doświadczalne związane z odpadami radioaktywnymi jakie wytwarzane są na skutek działania reaktora jądrowego są bardzo skomplikowane. Stanowi to motywację do badań nad reaktywnością i właściwościami molekularnymi związków aktynowców przy użyciu metod teoretycznej chemii obliczeniowej. Niestety, zasoby obliczeniowe wymagane przez standardowe metody chemii kwantowej rosną wykładniczo wraz ze wzrostem rozmiaru układu, efekt znany jest jako klątwa wymiaru. Ponieważ związki aktynowców ważne z punktu widzenia separacji i segregacji odpadów radioaktywnych zawierają dużą liczbę elektronów, zwykle setki albo tysiące, chemia kwantowa musi rozwijać nowe, a zarazem innowacyjne podejścia aby przełamać istniejące ograniczenia rozmiarowe. Jednym z podejść tego typu jest rodzina metod wykorzystująca wydajną i kompaktową parametryzację skorelowanej elektronowej funkcji falowej. Przykładem jest tutaj algorytm Renormalizacji Grupy DMRG (ang. Density Matrix Renormalization Group), który pozwala na tani, a zarazem wiarygodny kwantowo-mechaniczny opis dużej liczby elektronów, napotykanym w pierwiastkach i związkach aktynowców. Ponadto, w celu wiarygodnego modelowania chemii aktynowców, w obliczeniach kwantowo-chemicznych musimy uwzględnić efekty relatywistyczne, wynikające ze szczególnej teorii względności. Wówczas równanie Schrödingera, które jest punktem wyjściowym do modelowania pierwiastków lekkich, zastępuje się rozwiązaniami cztero-komponentowego równania Diraca. W proponowanym projekcie badawczym użyty zostanie relatywistyczny algorytm DMRG do kwantowo-chemicznego modelowania struktur elektronowych i właściwości pierwiastków aktynowców, dimerów aktynowców, a także modelowych kompleksów tlenków aktynowców powstałych na skutek oddziaływań typu kation-kation, obecnych w odpadach radioaktywnych. Relatywistyczne obliczenia DMRG będą pierwszymi, systematycznymi, a zarazem jakościowymi badaniami teoretycznymi mającymi na celu głębsze zrozumienie aktynowców, w tym podstawowych składników budulcowych kompleksów powstałych podczas utylizacji odpadów radioaktywnych. Ponadto, proponowany projekt badawczy pozwoli na pogłębienie wiedzy z zakresu fizyko-chemicznych właściwości atomów i związków aktynowców, sposobu wiązania i reaktywność kompleksów aktynowców, a także na to w jaki sposób można kontrolować tworzenie się klastrów aktynowców na skutek oddziaływań typu kation-kation. Podsumowując, proponowany projekt badawczy umożliwi dostarczenie niezbędnych informacji do wydajnego modelowania materiałów aktynowców na dużą skalę, co ma przyczynić się do głębszego zrozumienia procesu separacji plutonu i uranu od pozostałych komponentów znajdujących się w odpadach radioaktywnych.