

Popularnonaukowe streszczenie projektu

Nasze udokumentowane wcześniejsze badania nad dynamiką izolowanych aromatycznych układów molekularnych, pozostawiły szereg pytań bez odpowiedzi, a dodatkowe pytania stawiane są również przez autorów różnych prac, jak przez profesora Dunitz'a. Profesor Dunitz w swojej pracy z 2009, badając kryształ benzenu (protonowany i deuterowany) w różnych temperaturach zauważył, iż w przypadku układów krystalicznych efekt izotopowy manifestuje się poprzez różną rozszerzalnością temperaturową komórek elementarnych kryształów zawierających odmienne izotopy tego samego pierwiastka (tu wodoru lub deuteru), a różnice te tłumaczy się zmianami efektywnego rozmiaru izotopów. Autor pokazał, iż od pewnej temperatury tj. około 170K w przypadku kryształu benzenu atom deuter staje się większy od atomu wodoru, co ma daleko idące implikacje i może być podstawą do wytłumaczenia odwrotnego kinetycznego efektu izotopowego.

Tak więc na podstawie zaawansowanych symulacji komputerowych pragniemy wytłumaczyć obserwowany eksperymentalnie efekt i pójść kilka kroków naprzód, by odpowiedzieć na frustrujące w tej dziedzinie od lat pytania, takie jak: czy efekt da się ekonomicznie komputerowo przewidzieć i w jaki sposób efektywnie wyznaczać objętości atomów? Jaki wpływ mają efekty kwantowe? Jaki wpływ ma podstawienie izotopowe na dynamikę atomów węgla w pierścieniu aromatycznym? Czy efekt jest obserwowalny tylko dla układu krystalicznego czy może zaobserwujemy go również dla izolowanej molekuly? Jaki jest rozkład populacji poszczególnych konformacji pierścienia benzenu w fazie krystalicznej – czy jest podobny do zaobserwowanego dla układu izolowanego, a może nie? I kluczowe pytanie brzmi, jaki wpływ na wszystkie te efekty ma temperatura?

Jako że efekt izotopowy jest podstawowym pojęciem w chemii zrozumienie tego zjawiska jest bardzo ważne i jako takie uzyskane wyniki mogą znacząco wpływać i stymulować wiele innych dziedzin badawczych.