

Obliczenia kwantowomechaniczne cząsteczek zawierających ciężkie atomy w rzeczywistych otoczeniach

Popularnonaukowe streszczenie projektu

Małgorzata Olejniczak

Niemal codziennie dowiadujemy się o innowacjach w dziedzinie funkcjonalnych materiałów czy nowych generacji leków. Poszukiwanie materiałów o sprecyzowanych właściwościach jest z jednej strony palącą koniecznością (np. ekologiczne i ekonomiczne źródła energii), z drugiej – drogą do poprawienia warunków życia nowoczesnych społeczeństw (np. responsywne nanomateriały wykorzystywane jako diagnostyki w medycynie bądź jako selektywne czujniki).

Wiele z tych materiałów zawiera tzw. ciężkie atomy, czyli atomy pierwiastków umieszczonych ‘na dole’ układu okresowego. Najcięższe – aktynowce i lantanowce – jako pierwiastki radioaktywne są wykorzystywane w medycynie nuklearnej (jako terapeutyki i diagnostyki) czy w pozyskiwaniu energii jądrowej (paliwo jądrowe), nieco lżejsze są wykorzystywane np. jako katalizatory (np. srebro, platyna, rod) lub tzw. izolatory topologiczne (bizmut, antymon) ważne w badaniach nadprzewodnictwa, a nawet rozważane jako materiał do budowy komputerów kwantowych. Bardzo ważne jest też monitorowanie ciężkich pierwiastków w przyrodzie i organizmach żywych ze względu na ich wysoką toksyczność, którą obecnie wiąże się z chorobami neurodegeneracyjnymi (choroba Parkinsona czy Alzheimer).

Efektywne projektowanie rozwiązań przyszłości zależy od dogłębnego zrozumienia zależności między strukturą, funkcją i właściwościami atomów i cząsteczek w ich rzeczywistych otoczeniach, np. w fazie skondensowanej, na granicach faz, w ustrukturalizowanych środowiskach (kryształy, nanorurki, warstwy molekularne). Badanie procesów w skali pojedynczych atomów i cząsteczek, zmiany w ich właściwościach zachodzące pod wpływem oddziaływań np. z innymi cząsteczkami lub z polem elektromagnetycznym, a następnie odniesienie tych procesów do większej skali (nano, mikro) jest nie tylko ważnym etapem w procesie projektowania i ulepszania funkcjonalnych materiałów, ale też istotnym elementem badań podstawowych w naukach przyrodniczych.

Jedne z podstawowych metod badawczych pozwalających zajrzeć do skali atomowej to spektroskopia i – powiązana z nią – chemia kwantowa. W spektroskopii rejestrowana jest odpowiedź materii na zaburzenie, np. polem elektromagnetycznym o precyzyjnie dobranej energii, zapisana w postaci widma opisanego przez zestaw charakterystycznych parametrów, specyficznych dla badanej materii. Teoretyczne podstawy spektroskopii sięgają do teorii budowy atomów i cząsteczek – czym zajmuje się właśnie chemia kwantowa.

Rozwój nowych metod w chemii kwantowej do obliczeń struktury elektronowej i właściwości (np. powiązanych z obserwacjami w spektroskopii) dla cząsteczek zawierających ciężkie atomy w rzeczywistych otoczeniach stanowi główny cel prezentowanego projektu. Obliczenia z wykorzystaniem tych metod są nie tylko pomocne przy interpretacji danych eksperymentalnych (np. spektroskopowych), ale też często są jedynym źródłem informacji o układach, dla których eksperymenty są albo zbyt kosztowne albo niemożliwe do przeprowadzenia. Najważniejszych równań w chemii kwantowej nie można jednak rozwiązać dokładnie, dlatego główną pracą chemika kwantowego stanowi tworzenie modeli jak najlepiej opisujących badane zjawisko. Obliczenia oparte na tych modelach są zazwyczaj bardzo czasochłonne, dlatego jednym z większych wyzwań w chemii kwantowej jest znalezienie dobrego kompromisu między dokładnością stosowanych przybliżeń i kosztem obliczeniowym. Im bardziej skomplikowany jest układ, tym trudniej taki kompromis osiągnąć. Tak jest w przypadku, gdy w układzie są obecne ciężkie atomy. Ich obecność wymaga stosowania specjalnych metod, które muszą uwzględniać na przykład tzw. efekty relatywistyczne, związane ze wzrostem efektywnej masy elektronów w pobliżu ciężkich jąder atomowych i z wyindukowanymi oddziaływaniami magnetycznymi. Badanie tych efektów jest możliwe tylko w teorii (nie mamy dostępu do ‘nierelatywistycznego’ świata, żeby w nim przeprowadzić eksperymenty bez ich udziału), a jednym z ciekawszych wniosków z tych badań jest wykazanie że to właśnie efekty relatywistyczne są odpowiedzialne za żółty kolor złota (w przeciwieństwie do szarego koloru srebra) czy za ciekły stan rtęci w temperaturze pokojowej. Dodatkową trudność stanowi obecność otoczenia cząsteczki, które ma bardzo duży wpływ na jej geometrię, strukturę elektronową i właściwości. Ciekawym zabiegiem wykorzystywanym w chemii kwantowej jest metoda ‘zanurzania’ cząsteczki w otoczeniu innych cząsteczek (*ang.* ‘embedding’) i opisanie efektu tego otoczenia za pomocą efektywnych potencjałów. Dokładny teoretyczny przepis podaje np. metoda *ang.* frozen density embedding (FDE), która stanowi główny szkielet proponowanego projektu i która zostanie poszerzona w kierunku umożliwiającym uwzględnienie efektów relatywistycznych. Pozwoli to na wykonanie zaawansowanych obliczeń, które przyczynią się do zrozumienia wpływu efektów środowiska np. na obserwowane w spektroskopii właściwości i zrozumienie mechanizmów zachodzących między cząsteczką a jej otoczeniem (i wpływu efektów relatywistycznych na nie). Proponowane badania są badaniami podstawowymi, jednak rozwijana metoda łączy skalę atomową i skalę makroskopową, przez co bezpośrednio ma potencjał aplikacyjny. W projekcie wykonane będą obliczenia dla układów, które mogą mieć zastosowanie jako radiofarmaceutyki, magnetyczne materiały molekularne oraz jako czujniki chemiczne.