

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

W ostatnich latach obserwujemy ogromny postęp w teoretycznym opisie oddziaływań międzymolekularnych. Aby móc wykonać jakiegokolwiek teoretyczne przewidywania własności klastrów, w których zachodzą oddziaływania międzycząsteczkowe, musimy znać powierzchnie energii oddziaływania, czyli zależność energii oddziaływania od geometrii rozważanego kompleksu. Dzięki rozwojowi algorytmów i ciągłemu wzrostowi zasobów komputerowych jesteśmy w stanie obliczać powierzchnie dla kompleksów zawierających nawet tuzin atomów z dokładnością, która jeszcze 10-15 lat temu była osiągalna tylko dla obliczeń wzorcowych dla pojedynczych geometrii układu. Celem ogólnym naszego projektu jest osiągnięcie spektroskopowej dokładności w opisie niewielkich kompleksów molekularnych, tzn. otrzymywanie powierzchni energii oddziaływania tak dokładnych, aby umożliwiały one z kolei otrzymanie dokładnych widm teoretycznych, pozwalających na interpretację precyzyjnych eksperymentów spektroskopowych. Można przyjąć, że takie powierzchnie *ab initio* będą sprawdzały się również w innych zastosowaniach, na przykład w obliczeniach rozproszonych czy własności termodynamicznych. Większość powierzchni energii oddziaływania obliczonych do tej pory używa przybliżenia zakładającego, że oddziałujące cząsteczki są sztywne. Dzieje się tak dlatego, że otrzymanie powierzchni uwzględniających wszystkie stopnie swobody kompleksu jest bardzo kosztowne, a w dodatku pełne ich wykorzystanie w obliczeniach właściwości jest trudne. Jednakże założenie sztywnych cząsteczek wprowadza pewne niedokładności, które później przekładają się na, niekiedy znaczące, błędy obliczanych właściwości materii.

W niniejszym projekcie badawczym opracujemy nową metodę generowania powierzchni energii oddziaływania o zmniejszonym wymiarze, która będzie zawierała efektywną informację o wpływie nieszywności cząsteczek na energię oddziaływania. W tym celu energia oddziaływania będzie uśredniona po wewnętrznych drganiach cząsteczek, ale odbywających się w kompleksie. Energia oddziaływania będzie obliczana na najwyższym dostępnym poziomie teorii. Ostatecznie otrzymane powierzchnie mogą być używane dokładnie tak samo jak powierzchnie obliczone w ramach przybliżenia sztywnych cząsteczek, ale obliczone właściwości powinny być bardziej wiarygodne. Nowa metoda zostanie sprawdzona dla szeregu słabo związanych układów, w tym dla niesłychanie ważnego kompleksu dwóch cząsteczek wody. Zaproponowana metoda powinna zwiększyć dokładność powierzchni energii oddziaływania i doprowadzić do powstania nowej generacji powierzchni o zredukowanym wymiarze, które będzie można stosować w wielu działach fizyki i chemii. Na przykład istnieją niesłychanie precyzyjne metody spektroskopowe, które wymagają jednak pewnego teoretycznego wsparcia, możliwego tylko wtedy, gdy są dostępne bardzo dokładne powierzchnie. Przy tym obliczenia *ab initio* nie mają ograniczeń charakterystycznych dla niektórych eksperymentów spektroskopowych, gdzie fragmenty widm są niedostępne z powodów technicznych. Warto też wspomnieć że w obliczeniach można relatywnie łatwo ustalać pożądane warunki, jak np. temperaturę, podczas gdy kontrola tych parametrów w eksperymencie nie zawsze jest prosta. Możemy więc, na przykład, symulować warunki specyficzne dla różnych części wszechświata i obliczać właściwości ważne dla astrofizyków. Co więcej, ostatnio pokazano, że np. przewidywania niektórych właściwości termodynamicznych, oparte na najwyższej jakości powierzchniach mogą być niekiedy dokładniejsze i bardziej wiarygodne od wyników eksperymentów.