

Kontrolowane ultrazimne zderzenia i reakcje chemiczne atomów i molekuł ze złożoną strukturą

Streszczenie popularnonaukowe w języku polskim

Celem chemii jako nauki jest zrozumienie mechanizmów reakcji chemicznych i ich optymalne zaprojektowanie. Z tego powodu zrozumienie reakcji na poziomie mikroskopowym, niejako "z zasad pierwszych" ma fundamentalne znaczenie. Dowodem na to są przyznane w tej dziedzinie nagrody Nobla – dla Herschbacha, Polanyi i Lee w 1986, Zewaila w 1999 i Karplusa i Warshela w 2013. Idealnych warunków dla badań mechanizmów reakcji chemicznych dostarcza od niedawna tzw. chemia ultrazimna, w której możliwe jest niemal doskonała kontrola warunków reakcji chemicznej. Możliwe jest utrzymywanie reaktantów w zewnętrznych polach, zderzanie ich przy zadanej energii kinetycznej i dokładne badanie produktów reakcji.

Celem naszego projektu badawczego jest zaproponowanie narzędzi kontroli zderzeń i reakcji chemicznych w układach będących obecnie na froncie badań chemii ultrazimnej. W szczególności będą nas interesowały możliwości kontroli oddziaływań między zderzającymi się atomami lub cząsteczkami i przekrojów czynnych na zderzenia (co wpływa na szybkość reakcji chemicznej) oraz produkcji molekuł. Będziemy badali możliwości takiej kontroli za pomocą pól magnetycznych, jak i promieniowania laserowego, a także obliczymy dokładnie

Nasze badania będą miały charakter teoretyczny i będą polegały na wykonywaniu tzw. obliczeń numerycznych, czyli, w pewnym uproszczeniu, symulacji komputerowych badanych przez nas układów. W tym celu będziemy rozwiązywać różne formy tzw. równania Schrödingera, które pozwala na opisywanie ruchu cząstek w mikroświecie. Efekty kwantowe będziemy uwzględniać tak w obliczeniach struktury interesujących nas cząsteczek, tj. ruch elektronów wokół jąder atomowych, jak również w symulacjach zderzeń cząsteczek i ich reakcji chemicznych. Warto tutaj zwrócić uwagę, że obliczenia takie wymagają ogromnej mocy obliczeniowej i w związku z tym niezbędne będzie wykorzystanie odpowiedniego superkomputera – w naszym przypadku będzie to infrastruktura PLGrid. Projekt ten jest także wyzwaniem od strony oprogramowania – w celu wykonania obliczeń zaprogramujemy specjalne modułowe środowisko obliczeniowe, które będzie wymiernym efektem tego projektu.