

Najbardziej powszechną metodą badania molekuł jest spektroskopia. Polega ona na oświetleniu cząsteczek światłem o różnej długości fali oraz obserwowaniu przy jakiej długości fali molekuly pochłaniają światło, a kiedy je przepuszczają. Zależność absorpcji od długości fali światła nazywa się widmem danej cząsteczki. Określone grupy długości fal są pochłaniane znacznie silniej niż inne – są to tak zwane linie widmowe. Analiza ich położenia (jakie długości fali światła są pochłaniane?), natężenia (jak dużo światła zostało pochłonięte?) oraz kształt pozwalają odtworzyć informacje o strukturze wewnętrznej molekuly, jej ruchu i oddziaływaniu z otoczeniem. Zderzenia molekuł z innymi atomami albo molekułami mają istotny wpływ na kształt linii widmowych, możemy zatem analizować efekty zderzeniowe dzięki obserwacji widm w laboratorium. Wyciąganie odpowiednich wniosków wymaga jednak porównania eksperymentów z dokładnym modelem teoretycznym, uwzględniającym zderzenia w możliwie najbardziej realistyczny sposób.

Głównym celem niniejszego projektu jest zatem opis teoretyczny zderzeń molekularnych oraz uwzględnienie ich obecności w teoretycznych modelach kształtów linii widmowych. W świecie, który widzimy na co dzień, podczas zderzeń sztywnych obiektów całe oddziaływanie odbywa się podczas ich kontaktu, następnie zazwyczaj odbijają się od siebie. Odpowiednikiem takiej sytuacji w świecie molekularnym jest tzw. model „Kul Bilardowych”, w którym oddziałują ze sobą tylko w chwili ich „zetknięcia”. Jest to jeden z najbardziej dokładnych, stosowanych współcześnie modeli zderzeń. W świecie rzeczywistym możemy sobie jednak wyobrazić inne sytuacje zderzeń, np. dwóch magnesów. Z doświadczenia wiemy, że magnesy wpływają na siebie wzajemnie polami magnetycznymi co sprawia, że czasami mogą „odbić się” od siebie bez dotykania się. W innym przypadku, oddziaływanie magnetyczne może przyspieszyć moment zderzenia lub nawet sprawić, że w jego wyniku połączą się na stałe. W świecie mikroskopowym, gdzie kształt i wielkość cząsteczek nie są dobrze zdefiniowane, podobne oddziaływania na odległość grają kluczową rolę.

Istotą niniejszego projektu jest uwzględnienie przyciągania i odpychania molekuł w opisie ich zderzeń (wykorzystamy do tego potencjał Lennarda-Jonnesa). Pozwoli nam to na dokładniejszy opis kształtów linii widmowych i bardziej dogłębną analizę ultra dokładnych wyników eksperymentalnych.

Dokładna numeryczna symulacja nawet pojedynczej linii widmowej jest bardzo wymagająca i czasochłonna. Polega ona na rozwiązaniu równania transportu-relaksacji opisującego ruch cząsteczki, oddziaływanie z otoczeniem oraz jej stany wewnętrzne. Znaleźliśmy prosty matematyczny sposób aby podać rozwiązanie tego równania, wykorzystując rozwinięcie w wielowymiarowy szereg. Poza uzyskaniem jednego konkretnego rozwiązania tj. poznania współczynnika absorpcji dla konkretnej linii i długości fali, ta metoda pozwala w łatwy sposób podać rozwiązania dla innych długości fali aby bezpośrednio wysymulować całą linię widmową, a nawet wykorzystać to rozwiązanie do modelowania kształtów zupełnie innych linii tej samej molekuly.

Realistyczne opisy zderzeń molekularnych, większa dokładność modeli kształtów linii widmowych oraz metody przyspieszające obliczenia mają istotne znaczenie dla całej dziedziny spektroskopii molekularnej. Analiza widm jest jedynym sposobem badania składu atmosfer odległych planet i egzoplanet, jest również wykorzystywana w obserwacji atmosfery Ziemi, na przykład pod kątem zmian klimatycznych, poprzez obserwację stężenia dwutlenku węgla. Coraz dokładniejsze badania spektroskopowe pozwolą nam również na zwiększenie wiedzy na temat fundamentalnych oddziaływań między podstawowymi składnikami materii.