

Teoretyczna spektroskopia wysokiej dokładności dla elektronowych stanów wzbudzonych i zjonizowanych z powłoki rdzenia

Elektrony w atomie lub cząsteczce można podzielić na dwie kategorie: elektrony rdzeniowe i elektrony walencyjne. Elektrony rdzeniowe znajdują się blisko jądra atomowego, w ciasno związanych wewnętrznych powłokach i nie uczestniczą w tworzeniu wiązań chemicznych. Natomiast elektrony walencyjne są obecne na zewnętrznych powłokach i odpowiadają za tworzenie wiązań chemicznych oraz oddziaływania między cząsteczkami.

Gdy wysokoenergetyczne fotony rentgenowskie (tj. promieniowanie X) oddziałują z cząsteczką, mogą wzbudzać elektrony rdzeniowe, usuwając je z wewnętrznych powłok. Proces ten leży u podstaw różnych technik spektroskopii rentgenowskiej, które umożliwiają identyfikację pierwiastków, określenie ich stopni utlenienia oraz badanie struktur cząsteczek. Dzięki temu spektroskopia rentgenowska jest nie tylko skutecznym narzędziem do badania podstawowych właściwości materii, ale znajduje również szerokie zastosowania praktyczne, np. w analizie chemicznej czy diagnostyce medycznej.

Postępy w technikach eksperymentalnych w ostatnich kilkunastu latach, szczególnie rozwój laserów opartych na swobodnych elektronach, pozwoliły na obserwację niezwykle szczegółowych zjawisk związanych z elektronami rdzeniowymi w atomach i cząsteczkach. Przykładowo, zmierzono z ogromną dokładnością jak cząsteczka jodku metylu CH_3I rozpada się pod wpływem intensywnego promieniowania rentgenowskiego. Takie badania otwierają drogę do zrozumienia mechanizmów prowadzących do uszkodzeń materiałów biologicznych wywoływanych promieniowaniem X. Aby w pełni wykorzystać potencjał takich obserwacji, niezbędne są zaawansowane narzędzia teoretyczne.

Celem tego projektu jest opracowanie nowych metod teoretycznych służących do dokładnego przewidywania i interpretowania widm powstających w wyniku wzbudzeń lub jonizacji elektronów rdzeniowych. Pozwoli to na lepsze zrozumienie, co dzieje się z atomami lub cząsteczkami po usunięciu jednego lub więcej elektronów rdzeniowych. W szczególności planujemy szukać odpowiedzi na następujące pytania:

- Jak oddziaływania między elektronami walencyjnymi wpływają na zachowanie cząsteczek po usunięciu elektronu z powłoki rdzenia?
- Jak vibracje cząsteczki wpływają na kształt widm rentgenowskich?
- Jak najlepiej matematycznie opisać ruch swobodnych elektronów emitowanych po uprzednim wzbudzeniu elektronu rdzeniowego?
- Jakie czynniki decydują o względnej wadze różnych procesów relaksacyjnych (takich jak dysocjacja cząsteczki lub emisja elektronów Auger)?

Nasze metody modelowania widm będą opierać się wyłącznie na fundamentalnych zasadach mechaniki kwantowej. Planujemy wykorzystać zaawansowane techniki matematyczne i obliczeniowe, takie jak metoda równań ruchu sprzężonych klasterów (EOM-CC). Metoda EOM-CC umożliwia modelowanie właściwości cząsteczek w stanach wzbudzonych z dużą dokładnością. Zamierzamy rozszerzyć tę metodę w taki sposób, aby była równie skuteczna w badaniach własności cząsteczek po usunięciu elektronów rdzeniowych.

Dodatkowo opracujemy optymalne metody opisu ruchu elektronów emitowanych w procesach relaksacji, takich jak rozpad Augera. Aby zrozumieć wpływ ruchu jąder atomowych na rozpad Augera, zamierzamy zastosować nowoczesne techniki uczenia maszynowego. Dzięki temu będziemy mogli przewidywać, w jakim stopniu ruchy vibracyjne cząsteczek kształtują widma wywołane absorpcją promieniowania rentgenowskiego.

Opracowane metody zostaną wykorzystane do badania modelowych cząsteczek, takich jak woda, dwutlenek węgla, czy benzen. Umożliwi to lepsze zrozumienie kaskady procesów molekularnych, które wywołuje absorpcja wysokoenergetycznego promieniowania. Oczekujemy, że nasze badania dostarczą nowych informacji na temat zachowania cząsteczek w ekstremalnych warunkach i znacząco wspomogą interpretację wyników doświadczalnych.