

Attoseconds in physics, chemistry and biology: new quantum chemical tools for the interpretation of time-resolved experiments

Streszczenie projektu

W 1999 roku, Ahmet Zewail otrzymał Nagrodę Nobla w dziedzinie Chemii za pracę w dziedzinie femtochemii, tzn. rozwoju technik, przy użyciu których możliwe jest wykonanie "zdjęć" reakcji chemicznych w skali femtosekund, czyli jednej tysięcznej jednej milionowej jednej milionowej części sekundy. W XXI wieku marzeniem naukowców jest obserwacja złożonej dynamiki kwantowej w skalach niższych niż femtosekundowa i nanometrowa w układach fizycznych, chemicznych czy biologicznych. W nauce attosekundowej ultrakrótkie impulsy laserowe oddziałują na materię tworząc jeszcze krótsze, attosekundowe (czyli tysiąckrotnie krótsze od femtosekundowych) impulsy promieniowania nadfioletowego lub rentgenowskiego, oraz elektrony obdarzone zadziwiająco wysoką energią kinetyczną. Attosekundowe impulsy promieniowania nadfioletowego i rentgenowskiego mogą być wykorzystane do badania dynamiki atomów, molekuł, ciał stałych, dwuwymiarowych powierzchni, takich jak grafen, biocząsteczek, biokompleksów itp.

Nasza propozycja tematyki badawczej stanowi część dużego międzynarodowego projektu skupiającego się na rozwijaniu teorii i eksperymentów w celu zrozumienia istoty fizyki grającej rolę w wyżej wymienionych procesach, w szczególności w kontekście efektów wielociałowych, które były dotychczas zaniechane w standardowych modelach. Naszym głównym celem jest zrealizowanie marzenia: zaobserwowanie złożonej dynamiki kwantowej w skalach niższych niż femtosekundowa i nanometrowa. Pozwoli to na zrozumienie niezliczonych zjawisk grających kluczową rolę w procesach chemicznych, biofotonicznych czy biologicznych. Prof. Francesca Calegari, beneficjentka grantu ERC „Steering attosecond electron dynamics in biomolecules with UV-XUV LIGHT pulses”, jest liderem działu nauki attosekundowej w hamburskim instytucie synchrotronowym DESY i będzie kierować częścią eksperymentalną projektu. Główne cele tej części obejmują rozwój metod spektroskopii czasowo-zależnej pozwalających na badania i kontrolę dynamiki elektronowej w molekułach o znaczeniu biologicznym. Prof. Robert Moszyński, beneficjent grantu SYMFONIA „Attosekundy w biologii, chemii i fizyce: nowe eksperymentalne i teoretyczne oblicze” będzie natomiast kierował rozwojem zaplecza teoretycznego projektu, służącego do analizy, interpretacji oraz ekstrapolacji danych pochodzących z eksperymentów.

Podstawowym zadaniem doktoranta będzie opracowanie czasowo-zależnej teorii sprzężonych klasterów (TDCC) z niezależnym od czasu stanem odniesienia. Do badania złożonych układów biologicznych w reżimie czasowo-zależnym niezbędne jest rozwiązanie w sposób numeryczny wielowymiarowego równania Schrodingera zależnego od czasu (TDSE). Planujemy rozwinięcie teorii TDCC, która prowadzi do uzyskania funkcji falowej układu w postaci zależnej od czasu, natomiast obserwable (właściwości molekularne) są obliczane jako wartości oczekiwane odpowiednich operatorów. Zamierzamy skupić się

przede wszystkim na podejściu Jeziorskiego-Moszyńskiego, które odniosło sukcesy w niezależnej od czasu teorii CC, i wprowadzić do niego propagację układu w czasie. Pozwoli to m.in. na opis teoretyczny generacji wyższych harmonik, która jest jednym z podstawowych zjawisk mających miejsce w eksperymentach attosekundowych.

Odpowiedni poziom zaawansowania teoretycznego ma dwojakie znaczenie dla przebiegu całego projektu: po pierwsze wyniki eksperymentalne dla niewielkich układów pozwolą na odpowiednie skalibrowanie metod obliczeniowych, które ze względu na innowacyjność badań nie są jeszcze wystarczająco rozwinięte, a po drugie kiedy metody obliczeniowe będą gotowe, pozwolą na planowanie i przewidywanie wyników kolejnych eksperymentów.

Projekt ma wybitnie interdyscyplinarny charakter, opiera się na współpracy specjalistów z zakresu chemii, biologii, fizyki i dziedzin pokrewnych. Proponowane badania będą miały nieoceniony wpływ na zrozumienie podstaw fizycznych różnych procesów wywoływanych światłem mających miejsce z złożonych struktur biologicznych oraz na możliwości zastosowania tych procesów w fotochemii i elektronice kwantowej.

Prof. Robert Moszyński, Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego

+48 22 5526389.

rmoszyns@tiger.chem.uw.edu.pl

Prof. Francesca Calegari, Deutsches Elektronen-Synchrotron

+49 (0)40 8998 6369

francesca.calegari@desy.de