

Fotoaktyvių junginių energijos virsmų įskaitant molekulinės terpės poveikį modeliai

Doc. dr. Stepas Toliautas

Mikrodalelių sistemos potencinės energijos paviršių modeliai yra vienas iš pagrindinių būdų nagrinėti šviesai jautrių molekulių energijos virsmus ir jų sukeltus cheminius vyksmus. Potencinė energija yra tinkama įvertinti savąsias skirtingų molekulių savybes, o gamtinės ar eksperimentinės terpės įtaka modeliuojama pridendant šiluminio ar elektrostatinio lauko pataisus. Tačiau pasitaiko atveju, kai tokios pataisos yra per bendros arba reikalauja informacijos, kurią įtraukti į modelį nėra galimybės. Pavyzdžiui, molekuliniai aplinkos jutikliai gali būti vienu metu jautrūs temperatūrai, klampai ir poliškumui; iš šių parametrų matematinis aparatas, bendruoju atveju aprašantis energijos pataisus, egzistuoja tik temperatūrai.

Šios doktorantūros temos siekis – taikant kvantinės mechanikos, dirbtinio intelekto ir kvantinių kompiuterių metodus praplėsti terpės parametrų modelius skaičiuojant terpėje esančių molekulių sistemų energiją ir iš jos gaunamų matuojamų dydžių (spektrų, gyvavimo trukmės, konformacijų pobūdžio) įverčius.

Models of energy relaxation processes in photoactive compounds accounting for the effects of the molecular surroundings

Potential-energy surface models of the particle systems are one of the main ways to analyze the energy processes of light-sensitive molecules and the chemical reactions caused by them. Potential-energy calculations are suitable for evaluating the intrinsic properties of different molecules, while the influence of the natural or experimental environment is modeled by adding thermal or electrostatic field corrections. However, in some cases such corrections are too general or require information that cannot be directly included in the model. For example, molecular environment sensors can be sensitive to temperature, viscosity, and polarity at the same time; of these parameters, general mathematical apparatus for the energy corrections exists only for temperature.

The aim of this doctoral thesis is to use novel computational methods of quantum mechanics, artificial intelligence, and quantum computing to extend the environment models used for the potential molecular energy calculation and the estimates of the measurable quantities obtained from it (e.g. spectra, lifetimes, conformation characteristics).