

Badania zderzeń ciężkich molekuł obserwowanych w kometach

Komety - Kapsuły czasu

Komety powstały razem z naszym Układem Słonecznym. Te skaliste obiekty pokryte są lodową otoczką zbudowaną z zamrożonych cząsteczek. Gdy kometa zbliża się do Słońca, jej lodowa powłoka zaczyna się rozpuszczać, powodując sublimację cząsteczek. W ten sposób powstaje ogon komety, zwany też jej atmosferą. Badając te cząsteczki, znajdujące się w ogonie komety, jesteśmy w stanie określić warunki panujące podczas formowania się planet naszego Układu Słonecznego. Dzięki lepszemu zrozumieniu ewolucji młodego Układu Słonecznego możemy próbować odpowiedzieć na pytania takie jak: jak powstało życie na Ziemi? Jak właściwie uformował się nasz Układ Słoneczny? Jak szukać życia w kosmosie? Badania nad początkiem Układu Słonecznego prowadzimy poprzez obserwacje astronomiczne. Jednakże, żeby, dokładnie opisać obserwacje, potrzebujemy teoretycznego modelu atmosfery komety. Wymaga to obliczeń zderzeń pomiędzy różnymi cząsteczkami występującymi w atmosferze komet. Niestety, dla najczęściej obserwowanych cząsteczek, takich jak siarkowodor (H_2S), formaldehyd (H_2CO) czy kwas mrówkowy ($HCOOH$), takie dane zderzeniowe nie istnieją. **Dlatego motywacją tego projektu jest dostarczenie pierwszych danych zderzeniowych najczęściej obserwowanych cząsteczek w kometach: H_2S , H_2CO i $HCOOH$ w zderzeniu z wodą (H_2O) i tlenkiem węgla (CO).**

Analiza obserwacji

Komety należą do nielicznych obiektów astronomicznych, które możemy badać *in situ*. Pomimo kilku udanych misji, pozostają one rzadkością, ponieważ każda z nich jest niezwykle kosztowna i wymaga bardzo długich przygotowań, jak i realizacji. Dlatego głównym źródłem informacji o molekułach w kometach są obserwacje astronomiczne. Większość molekuł odkrywana jest w zakresie podczerwieni i radiowym, przy użyciu takich teleskopów jak Atacama Large Millimeter Array (ALMA) czy James Webb Space Telescope (JWST). **W tym zakresie spektralnym obserwujemy przejścia rotacyjne i vibracyjne. Dlatego w tym projekcie obliczenia dla H_2S , H_2CO i $HCOOH$ skupią się tylko na przejściach rotacyjnych.**

Metodologia badań

Obecny brak danych zderzeniowych można wytłumaczyć ich ogromnym kosztem obliczeniowym. Obliczenia zderzeniowe wymagają ogromnych ilości pamięci i czasu obliczeniowego. W dzisiejszych czasach obserwujemy wykładniczy wzrost mocy obliczeniowej. Jednak na dzień dzisiejszy obliczenia zderzeniowe z wykorzystaniem dokładnej metody kwantowej są nadal ograniczone do małych trzy-/cztero-/atomowych cząsteczek z lekkimi partnerami takimi jak H, He i H_2 . W przypadku komet mamy jednak do czynienia z bardziej złożonymi cząsteczkami i cięższymi partnerami (H_2O i CO). Zatem zastosowanie metod kwantowych do obliczeń tak złożonych układów jest niemożliwe. W 2018 roku Jerome Loreau, Francois Lique i Alexandre Faure, zaproponowali wykorzystanie metody statystycznej (SACM) w obliczeniach rozpraszania niereaktywnego. Zaletą tej metody jest znaczne obniżenie kosztów obliczeń. Została ona przetestowana na kilku układach a uzyskane wyniki zostały porównane z tymi uzyskanymi za pomocą dokładnych obliczeń kwantowych. Okazuje się, że dla niskich temperatur (które występują w kometach) zgodność pomiędzy tymi dwoma metodami jest bardzo dobra. Używając tej nowej metody, możemy badać znacznie bardziej złożone układy (jak te interesujące dla komet), które w przeciwnym razie byłyby niemożliwe do obliczenia. **Dlatego też zastosujmy nową metodę SACM do obliczeń kolizyjnych układów proponowanych w tym projekcie.**

Spodziewane wyniki

Wyniki naszych obliczeń zastosujemy do analizy obserwacji komet. Nowe wyniki pozwolą po raz pierwszy przeprowadzić dokładną analizę obserwacji i obliczyć dokładnie temperaturę, gęstości itp. **Analiza ta może być nadzwyczaj pomocna w rozwiązaniu niektórych zagadek dotyczących pierwotnych warunków naszego Układu Słonecznego i pochodzenia życia.**