

Zasoby chemii teoretycznej i obliczeniowej, zgrane do modelowania procesów luminescencyjnych

Nowoczesna chemia kwantowa i obliczeniowa oferuje szereg narzędzi, które są dobrze znane i sprawdzone w praktyce. Mimo imponującego rozwoju od czasów postania równia Schrödingera, jedyną rzeczą, którą można dziś obliczyć w sposób względnie prosty, jest całkowita energia danego układu atomów. Tematem mojej rozprawy jest luminescencja – proces z natury rzeczy związany ze stanami wzbudzonymi. Obliczenia stanów wzbudzonych są powszechnie uznawane za wyjątkowo trudne. Przedstawiana praca dotyczy bardziej złożonych układów, takich jak jony domieszkowe w kryształach. Z jednej strony, domieszka to pojedynczy atom. Z drugiej – chromoforem nieraz jest domieszka wraz z najbliższym otoczeniem, typowo sześcioma lub ośmioma anionami tlenowymi, zależnie od rodzaju domieszki i matrycy. Wydawać by się mogło, że mając dokładną geometrię eksperymentalną (np. z dyfrakcji rentgenowskiej), wystarczy wprowadzić ją do programu obliczeniowego, uruchomić symulację i otrzymać energie przejść elektronowych. I rzeczywiście – takie wyniki można uzyskać. Tyle że niekoniecznie będą one odpowiadały wynikom eksperymentalnym: mogą mieć niewłaściwe intensywności, czasy życia lub nawet nie zbiegać się numerycznie. Warto też pamiętać, że nie mówimy o grupie atomów w próżni, lecz o układzie wbudowanym w kryształ – a wpływ tej matrycy musi zostać odpowiednio zamodelowany. Nawet jeśli mamy do dyspozycji zestaw narzędzi – powiedzmy, trzech „czarnych skrzynek” które stosujemy po kolei – nie oznacza to, że uzyskane widmo absorpcji lub emisji światła będzie zgodne z eksperymentem. Co najwyżej będzie odpowiadało jednej geometrii, jednemu ustawieniu atomów – a pasma obliczone w taki sposób będą miały szerokość ograniczoną jedynie nieoznaczonością Heisenberga, a więc praktycznie zerową. Tymczasem każdy, kto widział eksperymentalne widmo, wie, że tak ono nie wygląda.

Podsumowując: pozornie znajdujemy się w sytuacji komfortowej – jak w dobrze zaopatrzonym supermarkecie. Mamy mnóstwo zasobów, każdy wydaje się dobry i sprawdzony. W praktyce jednak często brakuje nam dokładnie tego, czego potrzebujemy. Uzyskanie tego czegoś wymaga ogromnej wiedzy, dużego nakładu pracy, a także rozwiązywania licznych problemów natury inżynierskiej, matematycznej, fizycznej i koncepcyjnej.

I właśnie temu poświęcona jest moja rozprawa. Pokazuje ona, jak z jednej strony korzystać z istniejących, sprawdzonych metod – „stojąc na ramionach olbrzymów” – a z drugiej, jak łączyć je ze sobą w spójny system, uzupełniać luki między nimi i uzyskiwać jednolity obraz. Na podstawie mojego doświadczenia mogę stwierdzić, że udało mi się rozwiązać kilka istotnych problemów. Jestem jednak świadomy, że znacznie więcej wciąż czeka na rozwiązanie i stanowi fundament mojego dalszego planu badawczego.

Musimy również odpowiadać na potrzeby gospodarki. Owszem, mamy lasery, materiały luminescencyjne i wiele innych technologii – ale zawsze możemy mieć lepsze. Co znaczy „lepsze”, zależy od okoliczności – a tych nie jesteśmy w stanie przewidzieć. Możemy jednak dążyć do tego, by nasze metody były niezawodne w każdych warunkach – i właśnie na tym powinna się opierać nowoczesna nauka.