

I. Imię i Nazwisko

Jan Franz

II. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe/ artystyczne – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej

1. Doktor rerum naturalium (Doktor nauk przyrodniczych),
Faculty of Mathematics and Natural Science,
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Bonn, Niemcy,
Rok uzyskania stopnia doktora: 2003,
Tytuł rozprawy doktorskiej: Effektive Hamilton operatoren zur approximativen Berechnung der Elektronenkorrelation in Molekülen (Efektywne operatory Hamiltona celem aproksymatywnego obliczenia korelacji elektronowej w molekułach – teoria, implementacja i zastosowanie),
Promotor: Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff
Rozprawa doktorska zamieszczona przez Bibliotekę Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn na stronie:
<http://hss.ulb.uni-bonn.de/2003/0053/0053.htm>
2. Diplomchemiker (Magister chemii),
Faculty of Mathematics and Natural Science,
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Bonn, Niemcy,
Rok uzyskania stopnia magistra: 1999,
Tytuł pracy magisterskiej: Untersuchungen von elektronisch angeregten Zuständen in den linearen Kohlenstoff-Clustern C_5 und C_7 (Badania elektronowych stanów wzbudzonych w liniowych klasterach węgla C_5 i C_7),
Promotor: Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff
DOI: 10.13140/RG.2.2.15317.52967

III. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych/ artystycznych

od 10/2013	Adiunkt Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechnika Gdańska, Gdańsk, Polska
07/2013 – 09/2013	Asystent Institute for Automotive Engineering Cologne University of Applied Sciences, Cologne, Germany
06/2011 – 01/2013	Nauczyciel Europaschule Bornheim and Marienschule Euskirchen Bornheim and Euskirchen, Germany
06/2011 – 09/2013	Pracownik naukowy Institute for Physical and Theoretical Chemistry Rheinische Friedrich-Wilhelms Universität Bonn, Bonn, Germany
06/2009 – 06/2011	Asystent Department of Chemistry, University of Gothenburg, Gothenburg, Sweden



1

- | | |
|-------------------|---|
| 07/2005 – 05/2009 | Pracownik naukowy
Department of Physics and Astronomy,
University College London, London, United Kingdom |
| 12/2004 – 06/2005 | Asystent
Department of Chemistry,
University of Rome <i>La Sapienza</i> , Rome, Italy |
| 08/2004 – 11/2004 | Naukowiec wizytujący
Department of Chemistry,
Seoul National University, Seoul, Korea |
| 05/2004 – 07/2004 | Asystent
Institute for Physical Chemistry,
Ruprecht-Karls Universität Heidelberg, Heidelberg, Germany |
| 07/1999 – 04/2004 | Asystent
Institute for Physical and Theoretical Chemistry
Rheinische Friedrich-Wilhelms Universität Bonn, Bonn, Germany |

IV. Wskazanie osiągnięcia* wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2016 r. poz. 882 ze zm. w Dz. U. z 2016 r. poz. 1311.):

A. Tytuł osiągnięcia naukowego

Grupa tematycznie powiązanych publikacji pt.

„Teoretyczne metody opisu zderzeń pozytonów z cząsteczkami”.

B. Autor/autorzy, tytuł/tytuły publikacji, rok wydania, nazwa wydawnictwa, recenzenci wydawniczy

1. **[H1]** J. Franz and F. A. Gianturco,
Annihilation rates of low-energy positron scattering from simple diatomic molecules, 2006,
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with
Materials and Atoms, volume 247, pages 20-34,
DOI: 10.1016/j.nimb.2006.01.033
IF₂₀₀₆ = 0.946, ilość cytowań: 9.
2. **[H2]** J. Tennyson and J. Franz,
Low-energy electron and positron collisions with the R-matrix method,
2006, in *Explicitly Correlated Wavefunctions*, E. A. G. Armour, J. Franz, and J. Tennyson
(Eds.), CCP2, Daresbury, pages 32-38.
ISBN: 978-0-9545289-4-8
IF = niedostępne, ilość cytowań: niedostępne.
3. **[H3]** J. Franz,
An R-matrix method for positron atom and molecule scattering using explicitly correlated wavefunctions,
2007, in *Mathematical and Computational Methods in R-Matrix Theory*, Edited by M.
Plummer J. D. Gorfinkiel, and J. Tennyson, CCP2, Daresbury, pages 27-31.
ISBN 978-0-9556616-3-1
IF = niedostępne, ilość cytowań: niedostępne.



4. **[H4]** J. Franz, I. Baccarelli, S. Caprasecca and F. A. Gianturco,
Computed vibrational excitation of CF₄ by low-energy electrons and positrons,
2009, Physical Review A, volume 80, article number 012709,
DOI: 10.1103/PhysRevA.80.012709
IF₂₀₀₉ = 2.866, ilość cytowań: 4.
5. **[H5]** J. Franz and F. A. Gianturco,
Low-energy positron scattering from gas-phase tetrahydrofuran: a quantum treatment of the dynamics and a comparison with experiments,
2013, Journal of Chemical Physics, volume 139, article number 204309,
DOI: 10.1063/1.4832417
IF₂₀₁₃ = 3.122, ilość cytowań: 9.
6. **[H6]** J. Franz and F. A. Gianturco,
Low-energy positron scattering from gas-phase pyrimidine: a quantum treatment of the dynamics and a comparison with experiments,
2013, Physical Review A, volume 88, article number 042711,
DOI: 10.1103/PhysRevA.88.042711
IF₂₀₁₃ = 3.042, ilość cytowań: 10.
7. **[H7]** J. Franz, F. A. Gianturco and I. Baccarelli,
Low-energy positron scattering from gas-phase uracil,
2014, European Physical Journal D, volume 68, article number 183,
DOI: 10.1140/epjd/e2014-40796-0
IF₂₀₁₄ = 1.228, ilość cytowań: 10.
8. **[H8]** J. Franz and F. A. Gianturco,
Low-energy positron scattering from DNA nucleobases: the effects of permanent dipoles,
2014, European Physical Journal D, volume 68, article number 279,
DOI: 10.1140/epjd/e2014-50072-0
IF₂₀₁₄ = 1.228, ilość cytowań: 7.
9. **[H9]** J. Franz,
Solution of coupled integral equations for quantum scattering in the presence of complex potentials,
2015, Journal of Mathematical Physics, volume 56, article number 012104,
DOI: 10.1063/1.4905734
IF₂₀₁₅ = 1.234, ilość cytowań: 4.
10. **[H10]** K. Fedus, J. Franz and G. P. Karwasz,
Positron scattering on molecular hydrogen: analysis of experimental and theoretical uncertainties,
2015, Physical Review A, volume 91, article number 062701,
DOI: 10.1103/PhysRevA.91.062701
IF₂₀₁₅ = 2.765, ilość cytowań: 10.
11. **[H11]** J. Franz, K. Fedus and G. P. Karwasz,
Do positrons measure atomic and molecular diameters?,



3

2016, European Physical Journal D, volume 70, article number 155,
DOI: 10.1140/epjd/e2016-70100-3
IF₂₀₁₆ = 1.208, ilość cytowań: 5.

12. [H12] J. Franz,
Positron-electron correlation-polarization potentials for the calculation of positron collisions with atoms and molecules,
2017, European Physical Journal D, volume 71, article number 44,
DOI: 10.1140/epjd/e2017-70591-2
IF₂₀₁₆ = 1.208, ilość cytowań: 4.
13. [H13] J. Franz,
The POCOBIO Database for Computed Scattering Cross-Sections for Positron Collisions with Biomolecular Systems,
2017, Acta Physica Polonica A, volume 132, pages 1478-1481,
DOI: 10.12693/APhysPolA.132.1478
IF₂₀₁₆ = 0.469, times cited: 0.

C. Omówienie celu naukowego/artystycznego ww. pracy/prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania.

1. Wstęp

W autoreferacie przedstawiam cykl 13 artykułów opisujących wyniki moich badań nad teoretycznym opisem procesów zderzeń pozytonów z cząsteczkami w fazie gazowej. Mój wkład w rozwój tej dziedziny to sformułowanie nowych narzędzi teoretycznych i obliczeniowych, przeprowadzenie obliczeń i dokonanie na podstawie ich wyników, interpretacji rezultatów eksperymentalnych.

Pozyton jest elementarną cząstką materii, będącą antycząstką elektronu. Pozyton i elektron mają taką samą masę, taką samą wartość ładunku elektrycznego, ale przeciwny znak. W wyniku zderzenia cząstki z antycząstką dochodzi do ich anihilacji, a cała energia jest wyświecana w postaci dwóch lub więcej fotonów (np. Charlton i Humberston [1] oraz rozdział 10 w monografii Greiner i Reinhardt [2]). Pojęcie pozytonu pojawiło się w literaturze naukowej w latach trzydziestych ubiegłego stulecia. W 1930 r. Dirac sformułował relatywistyczny odpowiednik równania Schrödingera [3]. Wkrótce potem Anderson odkrył pozyton podczas obserwacji promieni kosmicznych za pomocą komory mgłowej [4, 5, 6]. W tym samym czasie Blackett i Occhialini zaobserwowali tworzenie par elektron-pozyton również w komorze mgłowej [7]. W latach 1933-34 trzy zespoły badaczy: Neddermeyer i Anderson, Curie i Joliot oraz Meitner i Philipp, dokonały odkrycia procesu tworzenia pozytonów w wyniku rozpadu jądra β^+ . Więcej informacji dotyczących odkrycia pozytonu można znaleźć w publikacjach Andersona [6] oraz monografii Close'a [8].

Od tamtej pory badania dotyczące pozytonów wprowadziło do swojej metodologii wiele dziedzin naukowych, takich jak astrofizyka, materiałoznawstwo i medycyna. Istnienie antymaterii we Wszechświecie było dyskutowane przez Alfvena w latach pięćdziesiątych ubiegłego stulecia [9, 10]. Obecnie wciąż otwartą kwestią pozostaje pochodzenie rozbłysków gamma (np. Piran [11]) oraz anihilacja pozytonów w naszej galaktyce (np. Pratzos i wsp. [12]). Pozytony są wykorzystywane w badaniach materiałowych do znajdowania i pomiaru defektów oraz wyznaczania elektronowej struktury pasmowej ciał stałych (Mogensen [13] oraz Krause-Rehberg i Leipner [14]). Zastosowania w medycynie to na przykład wykorzystanie sygnałów z anihilacji par pozyton-elektron w pozytonowej tomografii emisyjnej (PET) do lokalizowania komórek nowotworowych i wizualizacji aktywności mózgu (np. Cherry i wsp. [15]).



Głównym zrozumieniem oddziaływania pozytonów z otoczeniem jest możliwe poprzez badania zderzeń pozytonów z pojedynczymi atomami lub cząsteczkami w skali nanoskopowej. Można to osiągnąć dokonując pomiarów i przeprowadzając obliczenia przekrojów czynnych na zderzenia pozytonów w rozrzedzonych gazach atomowych i molekularnych (np. Karwasz i współpracownicy [16, 17, 18], Charlton i Humberston [1], Surko i Gianturco [19] oraz prace przeglądowe Danielsona i wsp. [20] czy też Brungera i wsp. [21]). Obliczenia wymagają rozwiązania równań opisujących proces rozproszenia dla układu wielu ciał, które mogą stanowić kilka jąder, wiele elektronów i jeden pozyton. Takie układy są silnie skorelowane, dlatego rozwiązanie podstawowych równań jest skomplikowane. W konsekwencji, ilość dostępnych metod teoretycznych oraz narzędzi obliczeniowych jest raczej ograniczona. W moich badaniach naukowych przyczyniłem się do stworzenia programów komputerowych oraz opracowania nowych metod teoretycznych, umożliwiających przeprowadzenie obliczeń przekrojów czynnych na zderzenia pozytonów z cząsteczkami wieloatomowymi. W większości prac własnych, cytowanych w niniejszym dokumencie, przedstawiono wyznaczone teoretycznie wartości przekrojów czynnych, które porównano z wartościami doświadczalnymi. Niniejszy rozdział zawiera krótki opis procesów, które mogą zachodzić w wyniku zderzeń pozytonów z cząsteczkami.

Poniżej przedstawiono najważniejsze procesy zachodzące podczas oddziaływania pomiędzy pozytonami i cząsteczkami. W zapisie reakcji, M oznacza cząsteczkę, natomiast A i B są jej fragmentami. Symbole (n_i, v_i, j_i) oznaczają odpowiednio początkowe stany: elektronowe, oscylacyjne i rotacyjne. Podobnie, symbole (n_f, v_f, j_f) opisują końcowe stany dla cząsteczki niezjonizowanej, natomiast symbole (n_f^+, v_f^+, j_f^+) określają stany końcowe cząsteczki zjonizowanej M^+ .

- Zderzenia sprężyste:

$$M(n_i, v_i, j_i) + e^+ \rightarrow M(n_i, v_i, j_i) + e^+$$
- Zderzenia niesprężyste:

$$M(n_i, v_i, j_i) + e^+ \rightarrow M(n_f, v_f, j_f) + e^+$$
- Jonizacja:

$$M(n_i, v_i, j_i) + e^+ \rightarrow M^+(n_f^+, v_f^+, j_f^+) + e^+ + e^-$$
- Dysocjacja:

$$M(n_i, v_i, j_i) + e^+ \rightarrow A + B + e^+$$
- Anihilacja:

$$M(n_i, v_i, j_i) + e^+ \rightarrow M^+(n_f^+, v_f^+, j_f^+) + 2\gamma + \dots$$
- Tworzenie pozytonium:

$$M(n_i, v_i, j_i) + e^+ \rightarrow M^+(n_f^+, v_f^+, j_f^+) + Ps$$

Obliczone wartości przekrojów czynnych dla zderzeń sprężystych i niesprężystych zostały przedstawione w publikacjach [H1], [H2], [P8], [P9], [P13], [H4]-[H8] oraz [H10]-[H12]. W większości cytowanych prac własnych, uwzględniono ruch rotacyjny cząsteczek. W publikacjach [H4] i [H7] zostały uwzględnione również oscylacyjne kanały rozproszenia. Stałe szybkości anihilacji zostały przedstawione w publikacjach [H1] i [P13]. Przekroje na jonizację i tworzenie pozytonium, zostały obliczone za pomocą potencjałów absorpcyjnych. Metoda rozwiązania równań opisujących proces rozproszenia została opisana w publikacji [H9]. Natomiast w publikacji [H13] opisano projekt bazy danych obliczonych wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na biocząsteczkach.

W większości prac własnych wyznaczone na podstawie obliczeń przekroje czynne są porównywane z danymi eksperymentalnymi. Doświadczalne metody badania procesu rozpraszania pozytonów mają następujące ograniczenia: ze względu na szerokość energetyczną stosowanej wiązki pozytonów, nie jest możliwe rozróżnienie wszystkich możliwych kanałów rozproszenia, stąd



wyznaczone z pomiarów wartości przekrojów czynnych mogą być niższe od tych uzyskiwanych z obliczeń. Ponieważ szerokość energetyczna wiązki pozytonów mieści się w przedziale od 50 do 200 meV, nie ma możliwości detekcji poziomów rotacyjnych, a obserwowanych jest jedynie kilka wybranych poziomów oscylacyjnych. Z tego powodu doświadczalnie wyznaczone przekroje czynne są przedstawiane w formie quasi-sprężystych przekrojów czynnych dla sprężystych i niesprężystych kanałów rozpraszania, oraz całkowitych przekrojów czynnych, gdy uwzględnione są wszystkie kanały rozpraszania. Doświadczalne wartości przekrojów czynnych mogą być niedoszacowane, ponieważ nie jest możliwe odróżnienie rozproszonych pozytonów od tych nierozproszonych. Z tego powodu w wyznaczonych doświadczalnie wartościach przekrojów czynnych brak udziału pozytonów, rozpraszanych w kącie bryłowym w kierunku padania wiązki. Rozmiar kąta bryłowego rozproszenia zależy od energii zderzenia, rozmiaru szczeliny wyjściowej komory rozproszeniowej, oraz wartości natężeń pól elektrycznego i magnetycznego w komorze [21]. W opisie rozpraszania pozytonów na cząsteczkach biologicznych, które zostały przedstawione w rozdziale czwartym, we współpracy z eksperymentatorami, szczególny nacisk został położony na wprowadzenie poprawek kątowych do danych doświadczalnych.

Metody teoretyczne takie jak wieloskładnikowa teoria funkcjonału gęstości (DFT, ang. density functional theory) oraz metoda R-macierzy (ang. R-matrix theory) zostały wykorzystane do rozwiązania równań opisujących proces rozproszenia dla układu skorelowanego wielu elektronów i jednego pozytonu. W rozdziale drugim przedstawiono rozwinięcie wieloskładnikowej teorii funkcjonału gęstości oraz rezultaty obliczeń przeprowadzonych na jej podstawie. W rozdziale trzecim przedstawiono kilka uogólnień molekularnej metody R-macierzy. W rozdziale czwartym omówiono postęp w analizie teoretycznej zderzeń pozytonów z biocząsteczkami. Rozdział piąty zawiera krótkie podsumowanie. Natomiast w rozdziale szóstym zostały opisane osiągnięcia autora w innych dziedzinach badań.

2. Rozpraszanie pozytonów na atomach i cząsteczkach z potencjałami modelowymi

Proces zderzenia pozytonów z cząsteczkami można opisać za pomocą potencjałów lokalnych (np. Franz [H12] oraz Jain i Gianturco [22]), które nie zależą od żadnych parametrów empirycznych. Potencjały modelowe są również niezależne od energii wiązki pozytonów. Potencjały modelowe można wyprowadzić wykorzystując wieloskładnikową teorię funkcjonału gęstości (DFT), oryginalnie wprowadzoną w fizyce ciała stałego do modelowania procesów z udziałem pozytonów (np. Boroński i Nieminen [23], Boroński i Stachowiak [24] oraz Drummond i wsp. [25, 26]).

W tym rozdziale dyskutowanych jest sześć publikacji [H1, H4, H9-12]. Dwie pierwsze prace powstały we współpracy z grupą prof. Franco A. Gianturco (University of Rome oraz University of Innsbruck). W publikacji [H1] prezentowane są wyniki obliczeń stałej szybkości procesu anihilacji pozytonów w gazach dwuatomowych. Dobre rezultaty otrzymano wykorzystując funkcję korelacji par do modelowania lokalnych wzmocnień gęstości elektronów w pobliżu pozytonu. Praca [H4] zawiera rezultaty obliczeń zderzeń nieelastycznych, oscylacyjnych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach tetra-fluorometanu (CF_4). Znajomość wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach tetra-fluorometanu jest ważna ze względu na jego częste wykorzystywanie, jako gazu buforowego, w pułapkach pozytonów. W publikacji [H9] przedstawiono algorytm umożliwiający numeryczne rozwiązywanie równań opisujących proces rozpraszania w obecności złożonych potencjałów absorpcyjnych (CAPs, ang. complex absorbing potentials). Potencjały CAPs są często wykorzystywane do opisu reakcyjnych kanałów rozpraszania takich jak tworzenie i jonizacja pozytonium. Rozwiązanie problemu znajdowane jest na podstawie sprzężonych równań całkowych. W publikacjach [H10] i [H11] zostały przedstawione wyniki otrzymane w ramach współpracy naukowej z dr hab. Kamilem Fedusem i prof. Grzegorzem P. Karwaszem (Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu). W artykule [H10] opisano zastosowanie kwantowych obliczeń procesu rozpraszania oraz zmodyfikowanej teorii efektywnego zasięgu (MERT, ang. modified effective range theory) w celu analizy elastycznych przekrojów czynnych na



rozpraszanie pozytonów przy bardzo niskich wartościach energii zderzeń. Metodę tą zastosowano do opisu rozpraszania pozytonów na cząsteczkach wodoru. W artykule [H11] omówiono możliwość określenia wielkości średnic atomowych i cząsteczkowych na podstawie wyznaczonych teoretycznie wartości sprężystych przekrojów czynnych pozytonów. Publikacja [H12] zawiera wyprowadzenia kilku nowych potencjałów modelowych wraz z przykładami ich zastosowań do obliczeń przekrojów czynnych, a wyniki rozważań teoretycznych porównywane są z wynikami doświadczalnymi oraz rezultatami innych prac teoretycznych.

2.1. Anihilacja pozytonów w gazach dwuatomowych

W pracy [H1] przedstawiono wyniki obliczeń stałej szybkości anihilacji pozytonów w gazach dwuatomowych. Produktem większości procesów anihilacji są dwa kwanty promieniowania γ . Szybkość anihilacji można wyrazić wzorem [1]:

$$\lambda(E) = \pi r_0^2 \cdot c N Z_{\text{eff}}(E),$$

gdzie r_0 jest klasycznym promieniem elektronu, c jest prędkością światła, N oznacza gęstość atomów i cząsteczek tarczy w gazie, natomiast E oznacza energię kinetyczną pozytonu [1]. Parametr anihilacji Z_{eff} może być interpretowany, jako efektywna liczba elektronów, widzianych przez nadlatujący pozyton. Pomimo tego, że parametr Z_{eff} zależy od wartości energii pozytonów, w analizie wyników doświadczalnych brana jest jedna wartość parametru Z_{eff} , zazwyczaj odpowiadająca pozytonom stermalizowanym. W publikacji [H1] przedstawiono wyprowadzenie równań wyrażających wartość parametru Z_{eff} na podstawie rozproszeniowych funkcji falowych przy wykorzystaniu formalizmu teorii wielocząsteczkowego funkcjonału gęstości. Parametr Z_{eff} może zostać wyznaczony z kontaktowej gęstości pomiędzy elektronami i pozytonami. Wyniki obliczeń można poprawić uwzględniając czynnik wzmocnienia, który opisuje lokalny wzrost gęstości elektronów w obszarach gdzie elektron i pozyton znajdują się w bliskim sąsiedztwie [23, 27, 28]. W analizowanym przypadku wysokiej gęstości, stosowane jest wyrażenie wyprowadzone przez Arponena [29]. Wyniki obliczeń współczynnika Z_{eff} uzyskane dla pięciu drobin dwuatomowych wraz z ich wartościami doświadczalnymi zostały przedstawione w tabeli 1. Obliczone wartości współczynnika Z_{eff} dla cząsteczek: O_2 , CO i NO , stanowią jedyne wartości teoretyczne tego parametru dostępne w literaturze. W czasie pisania publikacji (2006), w doniesieniach literaturowych można było znaleźć tylko dwie inne prace teoretyczne dotyczące tego zagadnienia, a mianowicie wyniki obliczeń współczynnika Z_{eff} przeprowadzone przez Varella i wsp. [32] dla N_2 oraz Armora i Bakera [33] dla H_2 .

Tabela 1

Doświadczalne oraz teoretyczne wartości parametru anihilacji Z_{eff} dla wybranych cząsteczek. a) Surko i wsp. [30], b) Iwata i wsp. [31], c) Varella i wsp. [32], d) Armour i Baker [33]

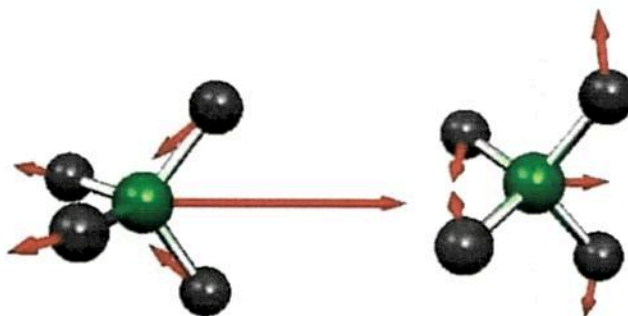
Cząsteczka	Z_{eff} (wartości doświadczalne)	Z_{eff} (wartości obliczone z uwzględnieniem czynnika wzmocnienia)	Z_{eff} (wartości z innych prac teoretycznych)
O_2	$36,7 \pm 5,0^{\text{a)}$	20,39	
N_2	$30,5 \pm 6,0^{\text{b)}$	15,82	9,3 ^{c)}
NO	$34,7 \pm 7,0^{\text{a)}$	36,55	
CO	$38,5 \pm 8,0^{\text{a)}$	23,68	
H_2	$14,6 \pm 3,0^{\text{a)}$	11,55	10,2 ^{d)}



Rezultaty obliczeń prezentowane w publikacji [H1] zostały uzyskane dla określonej wartości energii (0,001 eV) oraz przy założeniu ustalonej pozycji jądra, podczas gdy wyniki doświadczalne uzyskano stosując wiązkę stermalizowanych pozytonów w temperaturze pokojowej (298 K). Dla kilku cząsteczek tarczy, wyniki obliczeń współczynnika Z_{eff} pozostają w dobrej zgodności z wartościami eksperymentalnymi w granicy niepewności pomiarowych. Teoretyczny opis anihilacji pozytonów w gazach jest uważany za zagadnienie bardzo trudne. Świadczy o tym min. fakt, że w ciągu jedenastu lat od publikacji artykułu [H1] jedynie cząsteczka H_2 została poddana badaniom teoretycznym z użyciem kwantowych metod rozproszeniowych. Wśród prac dotyczących tego zagadnienia, można znaleźć publikację [P13], która będzie dyskutowana szerzej w następnym rozdziale.

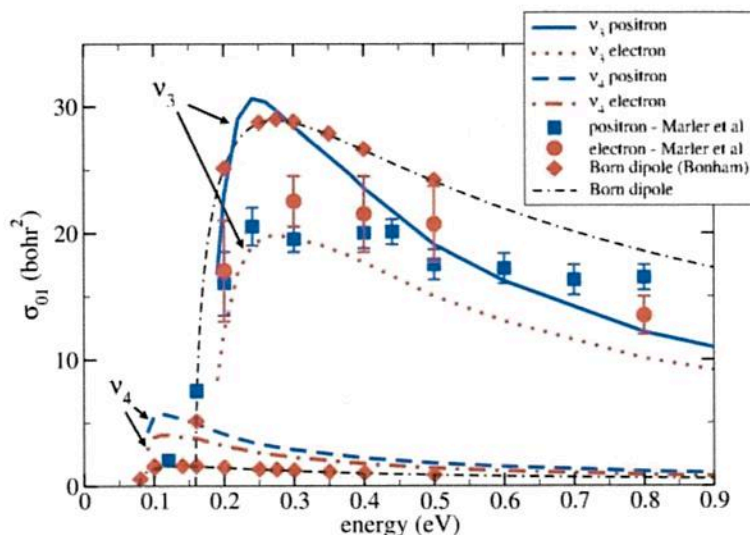
2.2. Oscylacyjne niesprężyste zderzenia z CF_4

W pracy autora i współpracowników [H4] poddano analizie teoretycznej oscylacyjne niesprężyste zderzenia pozytonów z cząsteczkami CF_4 . Dla porównania przeprowadzono również obliczenia zderzeń elektronów z tą samą cząsteczką, jako tarczą. Badania wykonano dla dwóch modów oscylacyjnych aktywnych w podczerwieni, które przedstawiono na rys. 1. CF_4 jest ważnym gazem w procesach plazmowych i jest zwykle używany, jako gaz buforowy przy chłodzeniu pozytonów w pułapkach pozytonowych (np. Marler i Surko [34]). Efekt chłodzenia jest wydajny, gdy przekrój niesprężysty ma dużą wartość, dzięki czemu energia kinetyczna pozytonu zamienia się na energię oscylacyjną gazu buforującego.



Rysunek 1. Schematyczne przedstawienie dwóch dozwolonych modów oscylacyjnych cząsteczki CF_4 : od lewej do prawej: mod rozciągający v_3 oraz mod zginający v_4 . Rysunek z publikacji Franz i wsp. [H4].

Obliczenia komputerowe zostały wykonane za pomocą metody silnego sprzężenia modów oscylacyjnych (VCC, ang. vibrational close-coupling) przy użyciu bezwymiarowych współrzędnych normalnych (np. publikacja [P4] Franz i Gianturco dyskutowana w rozdziale piątym). Główne wyniki przedstawiono na rys. 2, na którym przedstawiono również rezultaty obliczeń uzyskane przy zastosowaniu przybliżenia Borna. Przybliżenie Borna nie odróżnia pozytonów od elektronów, dając identyczne przekroje dla obu cząstek. Wykonane przez nas obliczenia z użyciem metody VCC stanowią jedyną dostępną pracę teoretyczną, która wykracza poza proste przybliżenie Borna. Z uzyskanych wyników obliczeń wynika większa wartość przekrojów niesprężystych dla pozytonów niż dla elektronów. Ten efekt jest najsilniejszy w pobliżu progu, gdzie przekrój niesprężysty jest o 50% większy dla pozytonów niż dla elektronów. Wyniki obliczeń z użyciem metody VCC są zgodne z wynikami eksperymentalnymi Marlera i Surko [34] (symbole wraz ze słupkami błędów na rys. 2). Jakkolwiek, w pobliżu progu w zakresie wartości energii od 0,2 do 0,4 eV, obliczone przez nas przekroje niesprężyste dla pozytonów wykazują większe wartości niż te uzyskane z pomiarów doświadczalnych.



Rysunek 2. Obliczone i zmierzone ($0 \rightarrow 1$) oscylacyjne przekroje czynne dla dwóch dozwolonych modów oscylacyjnych CF_4 w zderzeniach z pozytonami i elektronami. Wartości doświadczalne (pełne kwadraty i kółka) zostały zaczerpnięte z publikacji Marler i Surko [34], natomiast wyznaczone wcześniej wartości teoretyczne na podstawie przybliżenia Borna pochodzą z publikacji Bonhama [36], który do obliczeń wykorzystał dane Manna i Lindera [35]. Wyniki obliczeń własnych na podstawie przybliżenia Borna zostały przedstawione dla obydwu modów (czarna linia z kropką i kreską). Rysunek z publikacji Franz i wsp. [H4].

2.3. Integrator Volterry dla złożonych potencjałów absorpcyjnych

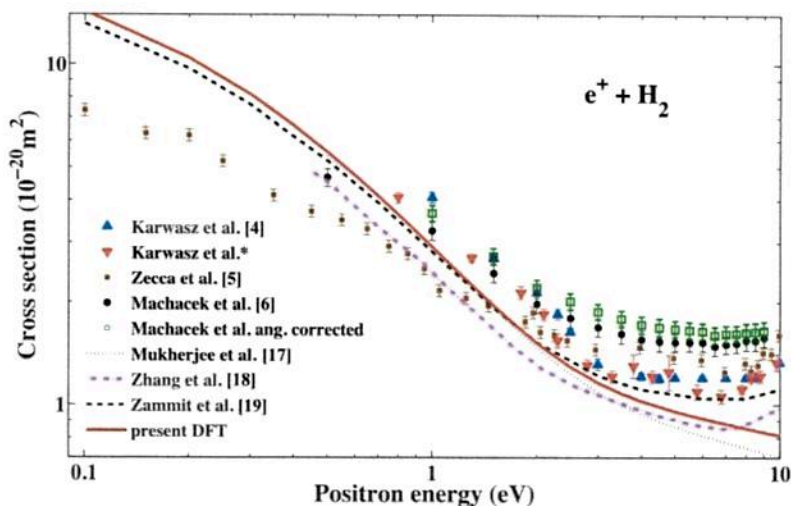
W publikacji [H9] przedstawiona została metoda rozwiązywania niezależnego od czasu równania Schrödingera w obecności złożonego potencjału absorpcyjnego poprzez numeryczne całkowanie równań całkowych Volterry. Wprowadzenie złożonego potencjału absorpcyjnego sprawia, że Hamiltonian staje się niehermitowski. Formalizm niehermitowski oferuje pewne uproszczenia w formułowaniu i obliczaniu procesów rozpraszania, które mogą być trudne do rozwiązania w ramach hermitowskiej teorii kwantowego rozpraszania (Moiseyev [37] i rozdział 8 w monografii Moiseyeva [38]). W zagadnieniach kwantowego rozpraszania włączenie złożonych potencjałów absorpcyjnych daje skuteczny sposób uzyskania przekrojów czynnych dla reakcji i tworzenia kompleksów o krótkim czasie życia (rozdział 18 w monografii Calogero [39]). Sprężone równania rozpraszania są rozwiązywane poprzez uogólnienie metody równań całkowych Volterry zaproponowanej przez Samsa i Kouri [40, 41, 42]. Metoda ta ma następujące zalety: warunki brzegowe są automatycznie uwzględniane; równania można rozwiązywać w procedurach nieiteracyjnych [42]; metoda może być stosowana dla lokalnych i nielokalnych potencjałów [42]. Ponadto metoda ta może być również wykorzystywana do obliczania obserwabli reakcji zderzeniowych [43, 44, 45].

W publikacji [H9] zostały wyprowadzone wyrażenia pozwalające wykonać operację całkowania numerycznego i przeprowadzić obliczenia przekrojów czynnych. Gdy złożony potencjał absorpcyjny jest pomijany, algorytm numeryczny jest zbliżony do tego uzyskiwanego dla potencjałów rzeczywistych (rozdział 5 w monografii Gianturco [46]). Motywacją do napisania tej publikacji było opracowanie metod obliczeniowych procesów, takich jak jonizacja atomów i cząsteczek w wyniku oddziaływania elektronów lub pozytonów i tworzenie pozytonium. Do analizy tych procesów zostały wykorzystane złożone potencjały absorpcyjne (potencjały dla elektronów: Staszewska [47], Blanco i Garcia [48, 49] oraz potencjały dla pozytonów: Reid i Wadehra [50, 51]).

2.4. Rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach wodoru

Publikacja [H10] jest rezultatem współpracy z dr hab. K. Fedusem i prof. G. Karwaszem. W tej pracy przedstawiamy ponowną analizę różnych danych eksperymentalnych dotyczących zderzeń pozytonów z cząsteczkami wodoru, w połączeniu z obliczeniami quasi-elastycznego przekroju

czynnego. W naszej analizie stosowany jest quasi-elastyczny przekrój czynny, będący sumą rotacyjnego sprężystego i niesprężystego przekroju czynnego, ze względu na wartość doświadczalnej niepewności energetycznej rzędu 200 meV. Obliczenia zostały wykonane z wykorzystaniem wieloskładnikowej teorii funkcjonalności gęstości.



Rysunek 3. Przekroje czynne na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach wodoru. Obliczone wartości przekrojów czynnych pochodzą z opracowania autora (z wykorzystaniem metody DFT), publikacji Mukherjee i Sarkara [52] oraz Zammita i wsp. [53]. Na wykresie przedstawiono również wyniki obliczeń z wykorzystaniem metody R-macierzy wzięte z publikacji [P13] (Zhang i wsp.), szczegółowo dyskutowanej w rozdziale 3. Doświadczalne wartości całkowitego przekroju czynnego pochodzą z publikacji Karwasza i wsp. [54] (a układ ponownie analizowanych wartości z tej publikacji oznaczono jako Karwasz i wsp.*), Zecca i wsp. [55] oraz Machacek i wsp. [56] (bezpośrednio zmierzone i poprawione). Rysunek został zaczerpnięty z publikacji [H10]. Cytowania przedstawione na wykresie odnoszą się do spisu literatury zamieszczonego w publikacji [H10].

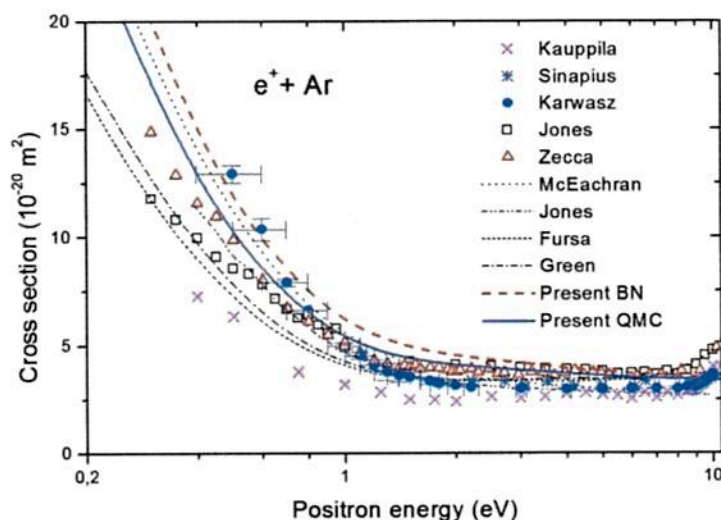
Na rys. 3 przedstawiono wyniki obliczeń i poddane ponownej analizie dane eksperymentalne (zaznaczone, jako czerwone odwrócone trójkąty). Ponadto na rys. 3. przedstawiono również wyniki obliczeń Mukherjee'a i Sarkara [52] oraz Zammita i wsp. [53], a także rezultaty obliczeń z zastosowaniem molekularnej metody R-macierzy z metodą pseudo-stanów, pochodzące z publikacji [P13], która będzie szczegółowo dyskutowana w następnym rozdziale. Na rys. 3 przedstawiono także wyniki doświadczalne opublikowane wcześniej przez Karwasza i wsp. [54] (oraz zestaw danych wziętych z tej publikacji i poddanych ponownej analizie oznaczony, jako Karwasz i wsp.*), Zecca i in. [55] oraz Machacek i wsp. [56] (bezpośrednio zmierzone i skorygowane). Dla energii poniżej 3 eV wyniki obliczeń są zgodne z danymi literaturowymi. Teorię zmodyfikowanego efektywnego zasięgu łańcucha Markova (MCMC-MERT, ang. Marcov chain Monte Carlo modified effective range theory) wykorzystano do sprawdzenia danych eksperymentalnych i wyznaczenia długości rozproszenia. Uzyskane na podstawie obliczeń wartości przekrojów czynnych są stosowane w zakresie niskich energii, dla których nie są dostępne dane eksperymentalne. Wykorzystanie procedury MCMC-MERT prowadzi do uzyskania długości rozproszenia o zbliżonych wartościach do skorygowanych kątowno danych eksperymentalnych zaczerpniętych z pracy Machacka i wsp. [56], a ponownie przeanalizowane dane z publikacji Karwasza i wsp. pozostają w dobrej zgodności z wynikami prezentowanymi w ostatnich pracach teoretycznych Mitroya i wsp. [57].

2.5. Wykorzystanie pozytonów do pomiaru średnic atomów i cząsteczek

Praca [H11] podobnie jak i publikacja [H10] jest rezultatem współpracy naukowej z dr hab. K. Fedusem i prof. G. Karwaszem. W tym artykule zastanawiamy się nad odpowiedzią na postawione w tytule pracy pytanie: czy pozytony można zastosować do pomiaru średnic atomów i cząsteczek. Odpowiedź na to pytanie jest twierdząca, jeżeli weźmiemy pod uwagę wartość przekroju

sprężystego poniżej progu dla tworzenia pozytonium. W tym kontekście badamy rozpraszanie pozytonów z dwoma atomami tarczy (argonem i kryptonem) oraz dwiema cząsteczkami tarczy (azotem i metanem).

W publikacji [H11] przedstawiono wyniki obliczeń sprężystych przekrojów czynnych. W obliczeniach wykorzystano asymptotyczny potencjał polaryzacyjny dalekiego zasięgu, który zawiera człony wyższych rzędów, wykraczające poza indukowany potencjał polaryzacyjny. Dla oddziaływań krótkiego zasięgu przedstawiamy obliczenia wykonane przy użyciu dwóch różnych potencjałów wyprowadzonych na podstawie funkcjonału Borońskiego-Nieminena [23] oraz obliczeń przeprowadzonych z wykorzystaniem kwantowej metody Monte Carlo przez Drummonda i wsp. [25, 26]. Szczegółowo, wyprowadzenie to analizowane jest w publikacji [H12].



Rysunek 4. Przekroje czynne na rozpraszanie pozytonów na atomach argonu. Obliczone wartości przekrojów czynnych na podstawie teorii funkcjonału gęstości z funkcjonałem Boroński-Nieminen (Present BN, czerwona linia przerywana) oraz kwantowej metody Monte-Carlo z publikacji Drummonda i wsp. (Present QMC, niebieska ciągła linia). Dla porównania na wykresie przedstawiono również wybrane wyniki teoretyczne i doświadczalne. Wyniki teoretyczne: McEachrana i wsp. [58] (spolaryzowany orbital), Jones i inni [59] (metoda relatywistycznego optycznego potencjału), Fursa i Braya [60] (sprężenie zbieżne) oraz Green i wsp. [61] (teoria wielu ciał). Wyniki doświadczalne: Kauppila i inni [62], Sinapius i wsp. [63], Karwasz i wsp. [64], Jones i wsp. [59] oraz Zecca i wsp. [65]. Rysunek został zaczerpnięty z publikacji [H11].

Uzyskane z obliczeń wyniki przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na atomach argonu zostały przedstawione na rys. 4 wraz z rezultatami obliczeń zaczerpniętymi z publikacji McEachrana i wsp. [58], Jonesa i wsp. [59], Fursa i Braya [60] oraz Greena i wsp. [61]. Zbliżone do uzyskanych wyników własnych, rezultaty obliczeń metodą silnego sprzężenia (ang. the convergent close-coupling calculations) uzyskane przez Fursa i Braya obejmują kanał tworzenia pozytonium. Pozostałe wyniki obliczeń prezentowane na rys. 4. dotyczą rozpraszania sprężystego. Na rys. 4 przedstawiono również doświadczalne wartości całkowitych przekrojów czynnych wyznaczone przez Kauppila i wsp. [62], Sinapiusa i wsp. [63], Karwasza i wsp. [64], Jonesa i wsp. [59] oraz Zecca i wsp. [65].

Wyniki obliczeń własnych pozostają w dobrej zgodności z najnowszymi danymi teoretycznymi i doświadczalnymi uzyskanymi przez inne zespoły badawcze. Starsze wyniki obliczeń i pomiarów z lat 80-tych i 90-tych wykazują znacznie niższe wartości przekroju czynnego. Efekt ten jest silniejszy przy niższych energiach. Wykres przekrojów czynnych w funkcji energii jest prawie płaski dla energii z zakresu od 3 eV do progu tworzenia pozytonium (8,96 eV). Sugeruje to możliwość zastosowania modelu sztywnej sfery. Bardziej szczegółowa analiza modelu sztywnej sfery dla atomu argonu i innych atomów została zawarta w publikacji [H11]. Dla dwóch

analizowanych w publikacji tarcz atomowych wartości promieni uzyskane na podstawie modelu sztywnej sfery są zgodne z wartościami promieni kowalencyjnych.

2.6. Nowe potencjały korelacyjno-polaryzacyjne do opisu rozpraszania pozytonów

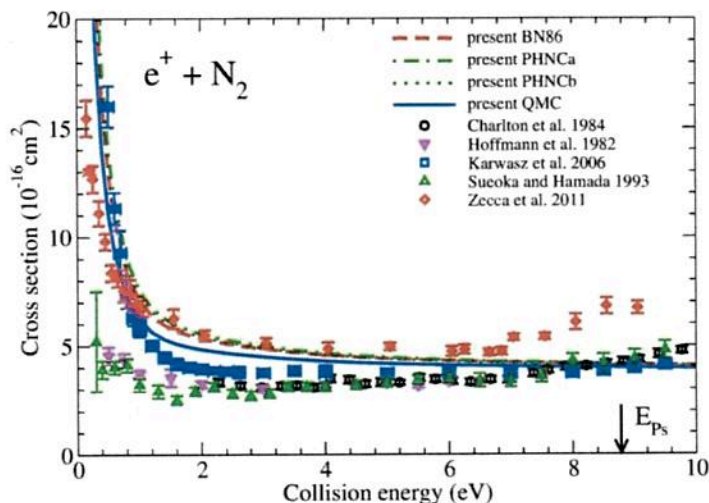
W publikacji [H12] zostały przedstawione wyprowadzenia kilku potencjałów opisujących oddziaływanie korelacyjne i polaryzacyjne, zachodzące pomiędzy pozytonami oraz elektronami związanymi z atomami bądź cząsteczkami podczas procesu rozpraszania. Potencjały są zbudowane z części krótkozasięgowej, zawierającej efekty korelacyjne i długozasięgowego członu polaryzacyjnego. Krótkozasięgowe potencjały korelacyjne zostały wyprowadzone na podstawie różnych wieloskładnikowych funkcjonałów gęstości. Natomiast, aby uzyskać długozasięgową część polaryzacyjną zastosowano rozwinięcie multipolowe.

W analizie procesów rozpraszania pozytonów na cząsteczkach, najczęściej wykorzystywany jest potencjał o krótkim zasięgu, uzyskany z wieloskładnikowej metody funkcjonału gęstości, Borońskiego i Nieminena [23]. Wyprowadzenie takiego potencjału zostało przedstawione w publikacji Jaina i Gianturco [22]. Potencjał Borońskiego-Nieminena został wykorzystany we wszystkich obliczeniach autora prezentowanych w tym rozdziale oraz w sekcji poświęconej rozpraszaniu pozytonów na biocząsteczkach. Wadą funkcjonału Borońskiego-Nieminena jest jego mniejsza dokładność w przypadku małej wartości gęstości elektronów oraz przyjmowanie różnych form matematycznych w zależności od zakresu gęstości elektronów.

W pracach teoretycznych innych autorów zaproponowano szereg postaci funkcjonałów. W cytowanej publikacji wyprowadzone zostały krótkozasięgowe potencjały korelacyjne z bardziej aktualnych funkcjonałów Borońskiego i Stachowiaka [24] oraz Drummonda i wsp. [25, 26]. Boroński i Stachowiak [24] wyprowadzili dwa alternatywne wyrażenia dla pozytonu w jednorodnym gazie elektronowym metodą PHNC (PHNC, ang. perturbed hypernetted chain method). Uzyskane stąd potencjały zostały oznaczone odpowiednio, jako PHNCa i PHNCb. Równanie funkcjonału Drummonda i wsp. [25, 26] uzyskano wykorzystując kwantową metodę Monte Carlo. Funkcjonał ten został zastosowany w obliczeniach autora opisanych w publikacji [H11], a w tekście autoreferatu został oznaczony, jako QMC.

Wszystkie wyprowadzone potencjały są lokalne i niezależne od energii. To ułatwia ich implementację w istniejących kodach kwantowych, służących do modelowania procesu rozpraszania. Ich zastosowanie do analizy procesu rozpraszania pozytonów zostało przedstawione dla rozpraszania sprężystego na dwóch tarczach atomowych (argonu i kryptonu) oraz molekularnych (azotu i metanu). Są to te same układy, które zostały omówione w prezentowanej wcześniej publikacji [H11].

Na rys. 5 przedstawiono porównanie wyników obliczeń i wyników doświadczalnych rozpraszania pozytonów na atomach azotu. Wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na atomach azotu uzyskane z obliczeń dla energii zderzeń poniżej progu tworzenia pozytonium (patrz strzałka na rysunku) pozostają w dobrej zgodności z wynikami ostatnich pomiarów doświadczalnych uzyskanymi przez Karwasza i wsp. [64] oraz Zecca i wsp. [66]. Na rys. 5 przedstawiono również starsze dane eksperymentalne Hoffmanna i wsp. (1982) [68], Charltona i wsp. (1984) [67] oraz Sueoka i Hamada (1993) [69], które wykazują znacznie niższe wartości przekrojów czynnych dla małych energii. Z obliczeń można wnioskować, że wszystkie cztery potencjały krótkiego zasięgu dają bardzo podobne wyniki. Natomiast potencjał QMC może być zalecany do przyszłych badań, ponieważ jego postać matematyczna jest prosta i wymaga tylko jednego zestawu parametrów dla całego zakresu gęstości elektronów.



Rysunek 5. Przekroje czynne na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach azotu. Rezultaty własnych obliczeń sprężystych przekrojów czynnych z użyciem potencjałów korelacyjno-polaryzacyjnych BN86 (czerwona linia przerywana), PHNCA (zielona linia z kropką i kreską), PHNCb (zielona linia kropkowana) oraz QMC (niebieska, ciągła linia). Doświadczalne wartości przekrojów czynnych: Charlton i wsp. [67] (czarne kółka), Hoffmann i wsp. [68] (magenta, odwrócone trójkąty), Karwasz i wsp. [64] (niebieskie kwadraty), Sueoka i Hamada [69] (zielone trójkąty) oraz Zecca i wsp. [66] (czerwone romby). Rysunek z publikacji Franza [H12].

3. Metoda R-macierzy dla rozpraszania pozytonów na cząsteczkach

W latach 2005-2009 pracowałem w grupie prof. Jonathana Tennysona na University College London (UCL) w Londynie, a tematem mojej pracy naukowej było opracowanie metody R-macierzy do przeprowadzania obliczeń przekrojów czynnych na zderzenia pozytonów o małych wartościach energii z cząsteczkami wieloatomowymi. Metoda R-macierzy jest metodą wariacyjną obliczania przekrojów czynnych na rozproszenia, która pierwotnie została sformułowana przez Wignera i Eisenbuda [70, 71, 72] do obliczania przekrojów czynnych dla reakcji jądrowych. Metoda R-macierzy pozwoliła Wignerowi i Eisenbudowi traktować różne obszary przestrzeni różnymi metodami teoretycznymi.

W metodzie R-macierzy przestrzeń może być podzielona na szereg obszarów. W każdym obszarze równanie falowe jest rozwiązywane z warunkiem brzegowym podanym przez R-macierz na powierzchni łączącej różne obszary. W naszych badaniach rozważane były zderzenia zachodzące przy wartościach energii poniżej 20 eV – stąd zastosowanym równaniem falowym było równanie Schrödingera.

Metoda R-macierzy została wykorzystana przez grupy naukowców z Bonn i UCL w latach 80-tych i 90-tych do analizy procesu rozpraszania elektronów na cząsteczkach (np. Morgan i wsp. [73] oraz publikacja przeglądowa Tennysona [74]). Idea tej metody jest następująca: najbardziej wewnętrzna sfera otacza cząsteczkę (tarczę); wewnątrz tej sfery zagadnienie wielu ciał rozwiązywane jest poprzez zastosowanie technik i odpowiednich programów obliczeniowych chemii kwantowej. Jakkolwiek, aby w pełni rozwiązać zagadnienie, programy obliczeniowe chemii kwantowej wymagają pewnych udoskonaleń i poprawek.

Opis rozpraszanej cząstki wewnątrz sfery wymaga wprowadzenia specjalnych warunków, które zostały zestawione poniżej.

- Wszystkie całki muszą być ograniczone do najbardziej wewnętrznej sfery R-macierzy.
- Operator Blocha musi zostać dodany do całek energii kinetycznej [75].
- Wartość funkcji falowej i jej pochodnej musi być obliczona na granicy sfery.

Bolesław

- Wszystkie wartości własne i wektory własne macierzy Hamiltonianu są niezbędne do utworzenia R-macierzy. Z tego powodu kompletna macierz Hamiltona musi być zdiagonalizowana, a wydajne algorytmy, takie jak Davidsona, nie mogą być stosowane.
- W oddziaływaniu konfiguracyjnym (CI, ang. configuration interaction) należy wprowadzić kilka ograniczeń i skrótów funkcji falowej, aby możliwe było rozwiązanie problemu rozpraszania.
- Rozwiązanie układu N-elektronowego i $(N + 1)$ – elektronowego jest niezbędne.

Metodę zastosowano do analizy wielu przypadków zderzeń elektronów z cząsteczkami. Dla zderzeń pozytonów z cząsteczkami, wymagane jest dokonanie dalszych adaptacji metody R-macierzy w celu jej uogólnienia dla układów zawierających elektrony i pozytony. W tym rozdziale omawianych jest pięć publikacji [H2], [H3], [P8], [P9], [P13], które stanowią podsumowanie współpracy naukowej autora z grupą prof. Tennysona z UCL. Wszystkie implementacje komputerowe zostały wprowadzone do brytyjskiego opracowania pakietu R-macierzy. W publikacji autorstwa Tennysona i Franza [H2] została przedstawiona pierwsza wersja stworzonego oprogramowania do analizy procesu rozpraszania pozytonów na cząsteczkach wieloatomowych. Poprzednie wersje oprogramowania były ograniczone do cząsteczek dwuatomowych. W publikacjach Baluja i wsp. [P8] oraz Franza i wsp. [P9] zastosowano wytworzone oprogramowanie do przeprowadzenia obliczeń przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach wody i dwutlenku węgla. W publikacji Franza [H3] omówiono formalizm stworzony w celu poprawienia dokładności metody R-macierzy, używając do tego funkcji falowych zawierających w sposób jawny odległość pozyton-elektron. W pracy Zhang i wsp. [P13] została przedstawiona metoda poprawienia dokładności poprzez włączenie pseudo-stanu i zastosowanie metody obliczania przekrojów czynnych i szybkości anihilacji dla zderzeń pozytonów z cząsteczkami wodoru.

3.1. Metoda R-macierzy dla rozpraszania pozytonów na cząsteczkach wieloatomowych

Metoda R-macierzy została wykorzystana przez Danby i Tennysona [76, 77, 78] do przeprowadzenia obliczeń procesu rozpraszania pozytonów na cząsteczkach. Jakkolwiek, zastosowany w obliczeniach kod źródłowy ograniczał się jedynie do cząsteczek dwuatomowych. Przeprowadzona przez autora i współpracowników ponowna implementacja metody R-macierzy pozwoliła na jej rozszerzenie na procesy rozpraszania pozytonów na cząsteczkach wieloatomowych. Nowe kody komputerowe stworzone w tym celu zawierają następujące udoskonalenia:

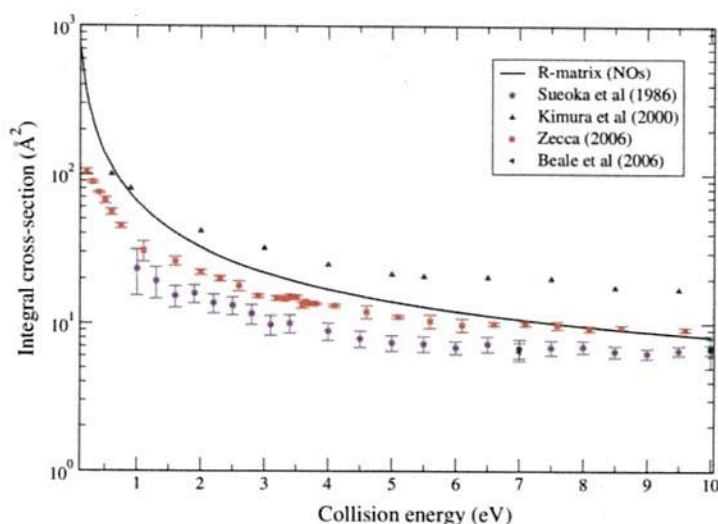
1. Orbitale typu Gaussowskiego (GTOs, ang. Gaussian-type orbitals,) są stosowane do wyrażania orbitali atomowych, zamiast orbitali typu Slater'a (STOs, ang. Slater-type orbitals), które były stosowane w poprzednich, starszych wersjach kodu. Całki wielocentrowe z kilkoma orbitalami GTOs mogą być całkowane wykorzystując wydajne algorytmy, rutynowo stosowane w pakietach oprogramowania chemii kwantowej.
2. Generacja spinowo przystosowanych konfiguracji funkcji falowych dla układu wielu cząstek (w tym elektronów i pozytonów).
3. Macierz Hamiltonianu została skonstruowana przy użyciu symbolicznych elementów macierzy. Zastosowany algorytm stanowi uogólnienie wydajnego algorytmu SCATCI Tennysona [79, 80] przystosowanego do układów elektron-pozyton. Algorytm uzyskuje swoją wydajność poprzez uwzględnienie w obliczeniach procesu rozpraszania, specjalnej formy elementów macierzy. To pozwala na uwzględnienie funkcji oddziaływań konfiguracyjnych (ang. configuration interaction functions), które osiągają wartości o kilka rzędów wielkości większe niż te w starszym kodzie Danby i Tennysona.



Nowy kod źródłowy został wdrożony do obliczeń sprężystych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na atomach azotu i stanów związanych pozytonu w cząsteczce wodoru litu (LiH), a rezultaty analizy teoretycznej zostały opublikowane w pracy Tennysona i Franza [H2]. Kod źródłowy poddano wielu testom. Jednym z testów było wykonanie obliczeń przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na różnych cząsteczkach dwuatomowych, stanów związanych pozytonu w małych układach i opracowanie procedury komputerowej do obliczania przekrojów dla zagadnień możliwych do rozwiązania analitycznie (np. kwadratowa studnia potencjału). Rezultaty kolejnych testów zostały opublikowane w pracy Franza i wsp. [P11], w której porównane zostały wyniki obliczeń przy wykorzystaniu metody R-macierzy dla rozpraszania pozytonów na cząsteczkach acetyleny z wynikami uzyskanymi przy użyciu kodów komputerowych przez inne grupy badawcze. Różne kody komputerowe wykorzystują różnorodne metody rozwiązywania równań rozproszenia i opisu oddziaływań zachodzących między pozytonem a cząsteczką. Jeśli uwzględnia się tylko oddziaływania elektrostatyczne, wszystkie kody dają takie same wartości przekrojów czynnych w granicach błędu - co jest kolejnym dowodem na poprawność wdrożenia.

W publikacji Baluja i wsp. [P8] zastosowano metodę R-macierzy do obliczenia przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach wody. Cząsteczka wody jest najpowszechniej występującą cząsteczką w materii biologicznej. Dlatego znajomość przekrojów czynnych na zderzenia pozytonów z tymi cząsteczkami jest niezbędna do symulacji zasięgu pozytonów w tkankach ludzkich lub innym materiale biologicznym. Cząsteczka wody posiada duży moment dipolowy. W konsekwencji, czego elastyczny przekrój czynny wykazuje dużą wartość dla małych kątów rozproszenia (rozproszenie do przodu). To sprawia, że pomiary niesprężystych przekrojów czynnych są trudne do zrealizowania, ze względu na nierozróżnialność cząstek rozproszonych do przodu od cząstek nierozproszonych.

Na rys. 6 przedstawiono wyniki obliczeń przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach wody wraz z wartościami przekrojów czynnych zmierzonych doświadczalnie. Wyznaczone doświadczalnie wartości przekrojów czynnych pochodzą z eksperymentów przeprowadzonych przez Sueoka i wsp. [81], Zecca i wsp. [82] oraz Beale i wsp. [83]. Przedstawiony na wykresie zestaw danych eksperymentalnych nie został skorygowany ze względu na występowanie w metodzie eksperymentalnej możliwych błędów dyskryminacji kątowej, opisanych powyżej. Przedstawione zostały również dane uzyskane przez Kimura i wsp. [84], którzy dokonali korekty wartości eksperymentalnych otrzymanych przez Sueoka i wsp. [81], uwzględniając efekty związane z polem magnetycznym w komorze rozproszeniowej. Korekta danych została przeprowadzona zgodnie z procedurą określoną przez Okamoto i wsp. [85] oraz Hamada i Sueoka [86]. Ze względu na ograniczoną rozdzielczość energetyczną, wszystkie wartości eksperymentalne przekrojów czynnych stanowią sumę sprężystych przekrojów czynnych oraz niesprężystych rotacyjnych i oscylacyjnych przekrojów czynnych. Obliczenia wykonane przy użyciu metody R-macierzy przeprowadzono w układzie związanym z cząsteczką. K-macierze są transformowane do układu laboratoryjnego z zastosowaniem domknięcia Borna. Ten proces został przeprowadzony zgodnie z procedurą określoną przez Sanna i Gianturco przy użyciu programu POLYDCS [87].

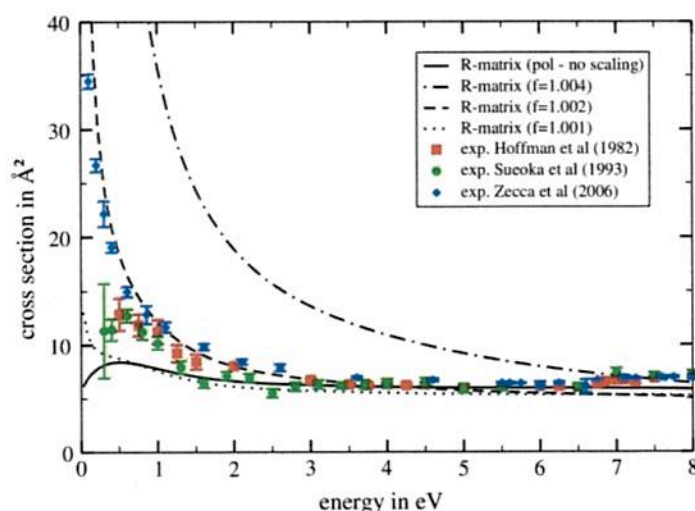


Rysunek 6. Przekrój czynny na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach wody. Obliczone wartości quasi-sprężystych przekrojów czynnych (sumowanych rotacyjnie) zostały uzyskane przy zastosowaniu metody R-macierzy dla cząsteczek wieloatomowych. Doświadczalne wartości przekrojów czynnych: Sueoka i wsp. [81] (fioletowe kółka), Kimura i wsp. [84] (niebieskie trójkąty), Zecca i wsp. [82] (czerwone kwadraty) oraz Beale i wsp. [83] (jeden punkt dla energii 10 eV oznaczony zielonym trójkątem). Rysunek z publikacji Baluja i wsp. [P8].

Obliczenia wykonane przez autora były sumowane po wszystkich elastycznych i nieelastycznych kanałach rozproszenia. W roku 2007, w momencie sporządzania publikacji, obliczone wartości przekrojów czynnych były większe od wszystkich nieskorygowanych, wyznaczonych doświadczalnie, ale posiadały niższe wartości od tych poprawionych wziętych z publikacji Kimura i wsp. [84]. Może to oznaczać, że wyniki obliczeń dają zbyt niskie wartości, bądź dokonane poprawki wartości doświadczalnych przez Kimura są zbyt duże. W roku 2014 Tattersall i wsp. [88] opublikowali pracę przedstawiającą wyniki eksperymentalne wraz z ich analizą teoretyczną, która potwierdziła rezultaty obliczeń autora, całkowitych i różniczkowych przekrojów czynnych.

W publikacji Franza i wsp. [P9] porównano wyniki obliczeń przekrojów czynnych z danymi eksperymentalnymi dla rozpraszania pozytonów na cząsteczkach dwutlenku węgla. Dla energii zderzeń o wartościach powyżej 1 eV osiągnięto dobrą zgodność pomiędzy teorią a eksperymentem (patrz czarna ciągła linia na rys. 7). Dla energii zderzeń o wartościach poniżej 1 eV obliczone przekroje czynne mają niższe wartości od eksperymentalnych. Rozwinięcie funkcji falowej, stosowane w sferze R-macierzy, będące sumą produktów funkcji elektronów i pozytonów, nie jest w stanie opisać dominujących sił korelacji i polaryzacji. W cytowanej publikacji wprowadzono prosty współczynnik wzmocnienia służący do skalowania oddziaływań elektron-pozyton. Współczynnik wzmocnienia można otrzymać korzystając z teorii zaburzeń drugiego rzędu. Realizacja tego zadania odbywa się poprzez skalowanie całek przyciągania elektronów i pozytonów przez ten sam czynnik, który można wyznaczyć dopasowując obliczony przekrój czynny do wyznaczonego zestawu danych eksperymentalnych. Opisaną powyżej procedurę zastosowano do analizy procesu rozpraszania pozytonów na cząsteczkach dwutlenku węgla, której rezultaty zostały przedstawione na rys. 7. Na rysunku przedstawiono wartości sprężystych przekrojów czynnych otrzymanych dla różnych wartości współczynnika wzmocnienia. Bez uwzględnienia współczynników wzmocnienia w metodzie R-macierzy, uzyskujemy „płaski” wykres zależności przekrojów czynnych w funkcji energii zderzeń bez typowego wzrostu przy niskich wartościach energii. Współczynnik wzmocnienia poprawia wartości przekrojów czynnych dla zderzeń o niskich energiach. Jest to imponujące, że pojedynczy parametr powoduje zmianę wartości przekrojów czynnych, dając ich dobrą zgodność z najnowszymi wartościami eksperymentalnymi uzyskanymi dla zderzeń o energiach do kilku eV przez Zecca i wsp. [89]. Ta sama metoda została zastosowana w przypadku analizy procesu rozpraszania pozytonów na cząsteczkach acetyleny, której rezultaty zostały opisane w publikacji Franza i wsp. [P11]. Prezentowana odmiana metody R-macierzy

została nazwana pół-empiryczną metodą R-macierzy i może być stosowana do interpolacji doświadczalnych wartości przekrojów czynnych. Wadą tego podejścia jest to, że charakter „ab initio” metody pierwotnej został zniszczony.



Rysunek 7. Przekrój czynny na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach CO_2 . Obliczone wartości quasi-sprężystych (sumowanych rotacyjnie) całkowitych przekrojów czynnych uzyskano wykorzystując metodę R-macierzy dla cząsteczek wieloatomowych używając różnych współczynników wzmocnienia. Doświadczalne wartości całkowitych przekrojów czynnych: Hoffmann i wsp. [68] (czerwone kwadraty), Sueoka i Hamada [69] (zielone koła) oraz Zecca i wsp. [89] (niebieskie romby). Rysunek z publikacji Franz i wsp. [P9].

3.2. Metoda R-macierzy dla rozpraszania pozyton-cząsteczka z jawnie skorelowanymi funkcjami falowymi

Pozyton i elektron są silnie skorelowane, ponieważ obie cząstki przyciągają się wzajemnie. Do stworzenia dokładnego opisu systemu zawierającego pozytony i elektrony, konieczne jest włączenie członów w funkcji falowej, które zawierają jawną odległość pozyton-elektron (np. Armour i Humberston [90]). Jednakże w konwencjonalnej metodzie R-macierzy, jak opisano powyżej, funkcja falowa jest zbudowana z zestawu funkcji bazowych, które są produktami funkcji jednopozytonowych i N-elektronowych wyznaczników Slatera. Takie funkcje nie zawierają składników z jawną postacią odległości między cząstkami pozyton-elektron, dlatego też funkcja falowa oraz wszystkie obliczone na jej podstawie własności układu, zbiegają się bardzo powoli pod względem wielkości tego podstawowego zestawu.

W rozdziale książki [H3] zaproponowano formalizm dla uogólnionej metody R-macierzy, w której funkcja falowa zawiera wyrażenia, jawnie zależne od odległości pozyton-elektron. W publikacji przedstawiono wyprowadzenia elementów macierzy Hamiltonianu i omówiono implementację komputerową. Skuteczna implementacja jest trudna, ponieważ elementy macierzy zawierają całki trzycząstkowe i czterocząstkowe oprócz zwykłych całek jednocząstkowych i dwucząstkowych. W celu uproszczenia obliczeń całek wieloskładnikowych w pracy sugerowane jest zastosowanie pewnych technik wynikających z teorii budowy elektronowej (np. Noga i wsp. [91] oraz Ten-no [92, 93]).

3.3. R-macierz z metodą pseudo-stanów dla rozpraszania i anihilacji pozyton-cząsteczka

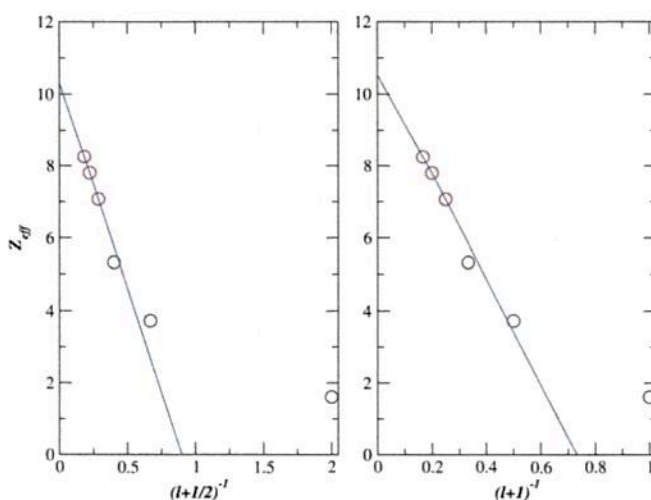
W publikacji Zhang i wsp. [P13] wprowadzono metodę R-macierzy z pseudo-stanami (MRMPS, ang. molecular R-matrix with pseudo states) w celu analizy procesu rozpraszania pozytonów na cząsteczkach. Ideą metody MRMPS jest udoskonalenie opisu funkcji falowej wielu cząstek wewnątrz sfery R-macierzy, poprzez dodanie dodatkowego zestawu pseudo-stanów. Pseudo-stany są skonstruowane, jako stany sprzężenia zwrotnego przy użyciu pseudo-ciągłych orbitali (PCOs,

ang. pseudo-continuum orbitals). Jako PCOs używamy zrównoważonych orbitali typu Gaussowskiego (GTOs, ang. Gaussian-type orbitals), które umieszcza się w centrum ładunku cząsteczki. Podstawowy zestaw PCOs może zostać rozszerzony w sposób systematyczny. Pozwala to na ekstrapolacje w kierunku kompletnego zestawu baz. W publikacji [P13] została zastosowana metoda MRMPs do zderzeń pozytonów z cząsteczkami wodoru. Obliczony został elastyczny przekrój czynny dla małych wartości energii zderzeń, długość rozpraszania, a także parametr anihilacji pozytonu Z_{eff} . Ten parametr jest miarą skutecznej liczby elektronów przyczyniających się do bezpośredniej anihilacji pozytonów. Uśredniony spinowo przekrój czynny na anihilację i parametr Z_{eff} są powiązane ze sobą za pomocą równania:

$$\sigma_{\text{ann}} = \pi r_0^2 \frac{c}{v} Z_{\text{eff}},$$

gdzie r_0 jest klasycznym promieniem pozytonu, c jest prędkością światła, a v jest prędkością uderzającego pozytonu. Parametr anihilacji Z_{eff} można interpretować, jako efektywną liczbę elektronów widzianych przez nadlatujący pozyton. Choć Z_{eff} zależy od energii nadlatującego pozytonu, eksperymetatorzy zwykle przyjmują jedną wartość Z_{eff} dla stermalizowanych pozytonów. Obliczenie współczynników anihilacji wymaga znajomości całkowitej funkcji falowej układu jednego pozytonu i N elektronów. Funkcja falowa nie jest zwykle obliczana w metodzie R-macierzy, a zamiast tego R-macierz (odwrotna pochodna logarytmiczna funkcji falowej) jest obliczana i rozprzestrzeniana z jednego sektora radialnego do następnego. Do przeprowadzenia tego projektu zostało napisanych kilka nowych programów komputerowych.

Na rys. 8 przedstawiono obliczone parametry Z_{eff} w funkcji maksymalnej wartości l w bazie PCO. Wykresy wykonano w celu ekstrapolacji do nieskończoności wartości parametru l . Do sporządzenia wykresu zamieszczonego po lewej stronie na rys. 8 użyto wzoru ekstrapolacji Gribakina i Ludlowa [94], natomiast wykres zamieszczony po prawej stronie został wykonany przy wykorzystaniu wzoru ekstrapolacji Mitroya i Bromleya [95]. W pierwszym przypadku ekstrapolacja przy $l \rightarrow \infty$ daje wartość $Z_{\text{eff}} = 10,30$, a w drugim przypadku $Z_{\text{eff}} = 10,53$. Wyznaczone wartości są zgodne z wartością $Z_{\text{eff}} = 10,2$ obliczoną przez Armora i wsp. [96] przy użyciu metody wariacyjnej Kohna. W publikacji [H1] wartość parametru, obliczona przy użyciu modelu przybliżonego potencjału, jest równa $Z_{\text{eff}} = 11,55$ (rozdział 2.1.). Inna wartość teoretyczna parametru $Z_{\text{eff}} = 6,67$ wynika z publikacji Varella i wsp. [97]. Natomiast, prezentowana w publikacji Laricchia i wsp. [98], doświadczalna wartość parametru Z_{eff} uzyskana w temperaturze pokojowej jest równa $Z_{\text{eff}} = 14,61 \pm 0,14$.



Rysunek 8. Obliczone wartości parametru Z_{eff} dla rozpraszania pozytonów na cząsteczkach wodoru H_2 dla wartości energii zderzeń rzędu 0.037 eV. Wykresy przedstawiają zależność parametru Z_{eff} w funkcji największej wartości l z bazy PCOs. Linia prosta przedstawia linię trendu poprowadzoną przez trzy punkty o największej wartości l . Rysunek z pracy Zhang i wsp. [P13].

4. Rozpraszanie pozytonów na biocząsteczkach

W tym rozdziale opisano pięć publikacji, które dotyczą procesu rozpraszania pozytonów na biocząsteczkach. Badania oddziaływań pozytonów z biocząsteczkami są ważne w celu lepszego zrozumienia procesów fizycznych zachodzących w metodzie pozytonowej tomografii emisyjnej (PET, ang. positron emission tomography) i terapii nowotworów przy użyciu wiązki jonów (IBCT, ang. ion-beam cancer-therapy). W metodzie PET pozyton powstaje w wyniku zaniku cząstki β^+ , niestabilnego izotopu jądrowego. Lokalizacja miejsca anihilacji pozytonu z elektronem, może być określona na podstawie sygnałów rejestrowanych w detektorze promieniowania gamma, które są wytwarzane podczas anihilacji. Odległość, którą pokonuje pozyton od momentu kreacji do anihilacji jest jednym z czynników decydujących o dokładności skanów w metodzie PET. W terapii IBCT pozytony są wytwarzane, jako cząstki wtórne, podczas procesu hamowania wiązki jonów. Cząstki wtórne mogą powodować dodatkowe uszkodzenia pozostającego w ich otoczeniu materiału biologicznego. W metodzie IBCT z użyciem ciężkich jonów (takich jak węgiel i tlen) jony mogą indukować transmutację jąder w wyniku, czego powstają niestabilne izotopy, takie jak węgiel-11. Węgiel-11 może ulegać rozpadowi β^+ . Uzyskany sygnał w skanerze PET może być używany do monitorowania i kontrolowania położenia, w którym wiązka jonów niszczy materiał biologiczny. Dlatego zrozumienie oddziaływania pozytonów z materią biologiczną jest ważne dla poprawy metod PET i IBCT. Symulacje z użyciem metody Monte-Carlo mogą służyć do obliczania zakresu pozytonów w materii biologicznej. Symulacje te wymagają znajomości przekrojów czynnych dla różnych procesów zachodzących między pozytonem a poszczególnymi cząsteczkami. Doświadczalne wyznaczenie przekrojów czynnych jest trudne do zrealizowania, dlatego obliczenia komputerowe wydają się być najbardziej obiecującym sposobem uzyskania wiarygodnych wartości przekrojów czynnych. Prace prezentowane w tym rozdziale przedstawiają obliczenia quasi-elastycznych przekrojów czynnych na zderzenia pozytonów z biocząsteczkami w fazie gazowej. Quasi-elastyczne przekroje czynne zawierają sprężyste i niesprężyste przekroje czynne. W naszych obliczeniach nie uwzględniamy innych niesprężystych kanałów rozproszeń, takich jak tworzenie, anihilacja i jonizacja pozytonium oraz wzbudzenie oscylacyjne bądź elektronowe, gdyż jest to zbyt wymagające obliczeniowo. Wpływ wymienionych kanałów rozproszeń na wartość sprężystego przekroju czynnego jest stosunkowo niewielki, co jest dyskutowane szczegółowo w pracy Charltona i Humberstona [1]. W przypadku energii zderzeń o wartościach poniżej 10 eV wyznaczone z obliczeń wartości przekrojów czynnych można uważać za najbardziej dokładne spośród obecnie dostępnych w literaturze. W przypadku energii zderzeń o wartościach powyżej 10 eV, wartości przekrojów czynnych, obliczone metodą IAM-SCAR (IAM-SCAR ang. independent atom model with screening corrected additivity rule) opracowaną przez Blanco i Garcia [48, 49], można uznać za bardziej dokładne.

Obliczenia wykonane przez autora zostały przeprowadzone z użyciem przybliżenia funkcjonału gęstości, które zostało omówione w rozdziale 1 przy zastosowaniu metody rozwinięcia jedno-centrowego (SCE, ang. single-centre expansion). Aby móc zastosować metodę SCE do badania biocząsteczek wprowadzono szereg ulepszeń w oprogramowaniu komputerowym. Analizowane, w wybranych publikacjach, biocząsteczki posiadają od około 10 do 20 atomów. Dlatego też liczba fal cząstkowych stosowana w celu zwiększenia potencjału wielośrodkowego i rozproszeniowej funkcji falowej jest inna niż dla cząsteczek dwuatomowych, które omówiono w rozdziale 1. Rozszerzono potencjał w falach cząstkowych aż do wartości $L = 100$, a funkcję falową aż do wartości $L = 50$ i zastosowano gęstą siatkę całkowania. Wymagało to zastosowania programów komputerowych o większych mocach obliczeniowych. Do tego celu zaadaptowano kody komputerowe SCELlib [99] i VOLSCAT [100], które mogą działać na dużych komputerach równoległych, używając MPI, OpenMP i CUDA w celu pełnego wykorzystania możliwości nowoczesnych komputerów o wysokiej wydajności z wieloma procesorami wielordzeniowymi i procesorami graficznymi.

Biocząsteczki posiadają trwały moment dipolowy o dużej wartości. W układzie odniesienia związanym z ciałem, rozwinięcie jedno-centrowe nie jest zbieżne. Dlatego macierze rozproszania



przetransformowano do układu odniesienia związanego z ustalonym punktem przestrzeni, a następnie zastosowano domknięcie Borna. Transformacja do układu obrotowego została wykonana za pomocą modelowego Hamiltonianu dla asymetrycznego rotatora (np. Jain i Thompson [101]), który ma te same momenty bezwładności, co odpowiadająca mu biocząsteczka. Numeryczna zbieżność tego podejścia została dokładnie przeanalizowana w publikacjach [H5] i [H6]. Podejście to zostało przedstawione w pracy przeglądowej Jain i Gianturco [22] i wdrożone do programu komputerowego POLYDCS [87]. Zastosowanie programu komputerowego POLYDCS ogranicza się jedynie do cząsteczek liniowych, które można potraktować, jako sferyczne lub symetryczne rotatory. Mery RNA i DNA wykazują niską symetrię i muszą być opisywane, jako rotatory asymetryczne. Dlatego uzyskane wyrażenia dla rozpraszania pozytonów na tych cząsteczkach zostały wyprowadzone przy zastosowaniu modelu asymetrycznego rotatora. Równania wdrożone w programach komputerowych zostały przedstawione w dodatku dołączonym do publikacji [H8].

Badania przedstawione w tym rozdziale zostały wykonane we współpracy z prof. Franco Gianturco. Wspólny projekt badawczy rozpoczęliśmy w 2011 roku, dzięki dotacji finansowej na wykonanie obliczeń, którą uzyskaliśmy od Komisji Europejskiej w ramach programu HPC-Europa2 Transnational Access Programme. Przyznane środki pozwoliły na korzystanie z centrum komputerowego CINECA w Casalecchio di Reno. Program był kontynuowany dzięki kilku innym dotacjom komputerowym, w tym dzięki środkom finansowym przyznanym w ramach europejskiego programu COST Action MP 1002 – Nano-scale Insight into Ion Beam Cancer Therapy (NanoIBCT). W celu swobodnej dystrybucji wyników obliczeń w publikacji [H13] opisano budowę bazy danych obliczonych wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na biocząsteczkach. Publikacja przedstawia projekt bazy danych, której budowa pozostaje w fazie wstępnej.

4.1. Nisko energetyczne rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach tetrahydrofuranu i pirymidyny: obliczenia i porównanie z eksperymentem

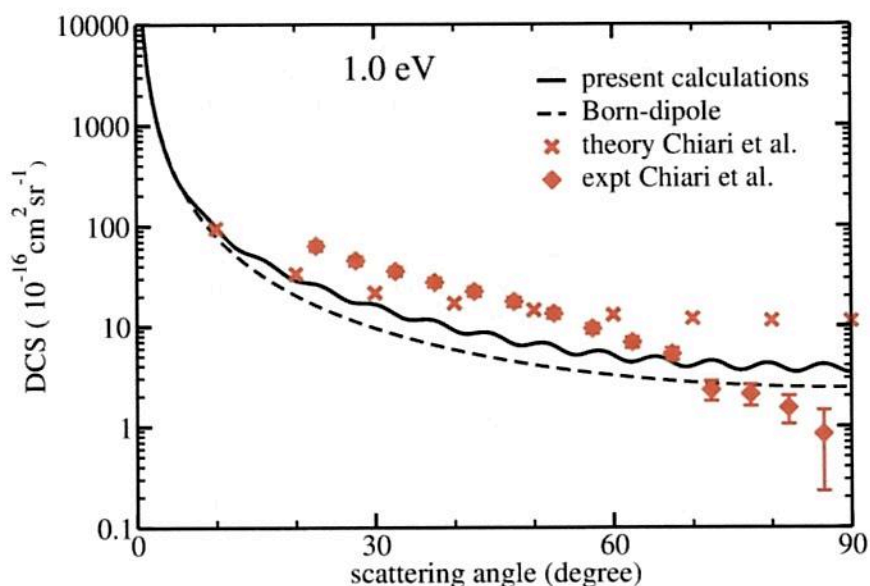
W publikacjach [H5] i [H6] omówiono rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach dwóch związków modelowych: tetrahydrofuranu (THF) [H5] i pirymidyny [H6]. Cząsteczka THF została uwzględniona w analizie ze względu na to, że często stanowi model cukru w strukturze DNA. Dla obu cząsteczek istotne jest wyznaczenie teoretycznych przekrojów czynnych w celu analizy i interpretacji danych doświadczalnych. Szczegółowo, zagadnienie to zostanie omówione w następnym akapicie.

Dla cząsteczek THF i pirymidyny można znaleźć w literaturze doświadczalne wartości przekrojów czynnych wyznaczone przez grupy badawcze z Uniwersytetu w Trydencie oraz Australian National University (ANU) w Australii. Wykorzystywane przez obie grupy układy pomiarowe wykazują ten sam błąd, a mianowicie mają problem z rozróżnieniem pozytonów nierozproszonych i pozytonów rozproszonych w kącie bryłowym. Ten problem powoduje tak zwany błąd określenia kątego. Błąd ten jest zdominowany przez odrzut rozproszonych pozytonów przez pola elektryczne i magnetyczne w komorze rozproszeniowej. Obydwa układy pomiarowe wykorzystują różne pola elektromagnetyczne: głównie elektrostatyczne w spektrometrze na Uniwersytecie w Trento oraz głównie magnetyczne w urządzeniu grupy badawczej z ANU. Ponadto natężenie stosowanego pola jest dostosowywane do cząsteczki stanowiącej tarczę dla wiązki pozytonów. Dlatego błędy pomiarowe rozproszenia kątego są różne dla tych dwóch układów pomiarowych, co przekłada się na różne wartości mierzonych przekrojów czynnych. Zakres kątów rozproszenia, pomijanych w pomiarach, można wyrazić poprzez prostą funkcję energii zderzenia i wartości natężeń pól stosowanych w układzie pomiarowym. Kontaktując się z eksperymentatorami w Trydencie i ANU uzyskano szczegółowe informacje na temat błędów pomiarowych dyskryminacji kątowej, jakim obarczone są wyniki badań nad THF i pirymidyną.

Dla obydwu cząsteczek obliczono wartości różniczkowych przekrojów czynnych (DCS, ang. differential cross section) na zderzenia z pozytonami. Na rys. 9 przedstawiono zależność złożonych

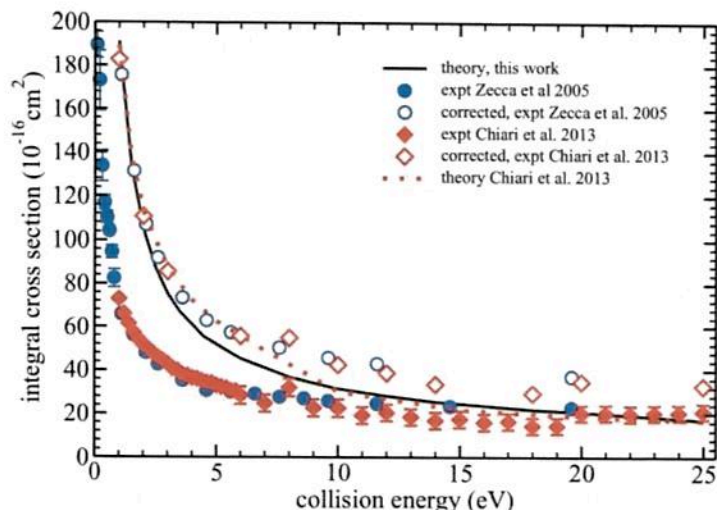


wartości DCS od kąta rozpraszania pozytonów na cząsteczkach THF przy zderzeniach o wartościach energii rzędu 1,0 eV. Wykres przedstawia również wartości doświadczalne DCS, zmierzone przez grupę z ANU [103] oraz obliczone przy użyciu metody IAM-SCAR. Na rys. 9 porównano zależności kątowe złożonych wartości DCS oraz wartości DCS nieobarczonych błędem pomiarowym, ponieważ złożone dane DCS są otrzymywane, jako artefakt układu pomiarowego w aparaturze grupy z ANU. Złożone wartości DCS dla kątów θ uzyskuje się przez dodanie wartości DCS uzyskanych dla kątów θ i $180^\circ - \theta$. Zgodność pomiędzy uzyskanymi na podstawie obliczeń wartościami DCS, a danymi eksperymentalnymi jest zadowalająca. Dla wyższych energii zderzeń, zgodność przewidywań teoretycznych z wynikami pomiarów jest nieco gorsza.



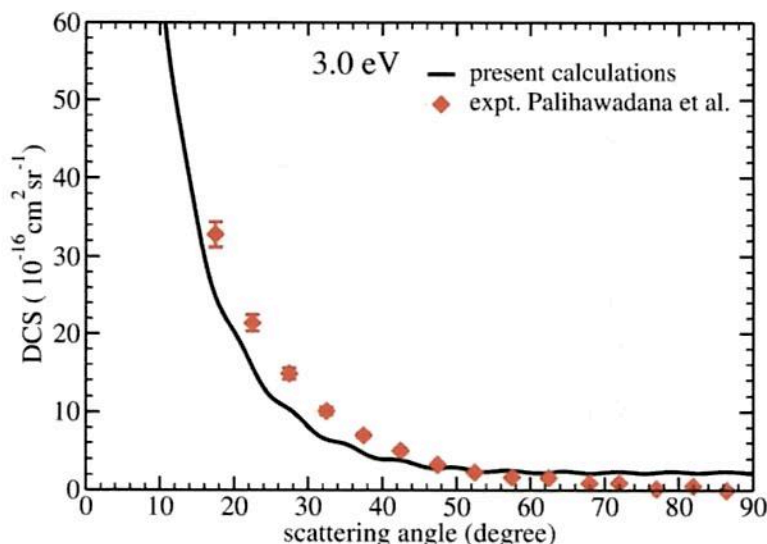
Rysunek 9. Obliczone i zmierzone wartości różniczkowych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach THF w fazie gazowej dla energii zderzeń rzędu 1,0 eV. Wykres przedstawia poprawione dane (ciągła czarna linia) przy zastosowaniu $l_{\max} = 50$ oraz sumowaniu po sprężystych rotacyjnych i niesprężystych kanałach rozproszeń, a także wyniki analizy teoretycznej przy zastosowaniu modelu Borna (przerywana czarna linia) oraz dane eksperymentalne: Chiari i wsp. [103]: wyniki doświadczalne (czerwone romby ze słupkami błędów) oraz wartości teoretyczne (czerwone krzyżyki). Rysunek z publikacji Franz i Gianturco [H5].

Na podstawie obliczonych wartości DCS można uzyskać poprawkę kątową doświadczalnych quasi-sprężystych przekrojów czynnych. Na rys. 10 przedstawiono porównanie uzyskanych na podstawie obliczeń własnych, wartości quasi-sprężystego całkowitego przekroju z poprawką kątową oraz wartości doświadczalnych przekrojów czynnych grupy badawczej z Trento (Zecca i wsp. [102]) oraz grupy z ANU (Chiari i in. [103]), bez uwzględnienia tej poprawki. Doświadczalne wartości przekrojów czynnych zawierają wszystkie niesprężyste kanały rozproszeń oprócz tworzenia pozytonium. Na wykresie przedstawione zostały również wyniki obliczeń przeprowadzone przez Chiari i wsp. [103] przy użyciu metody IAM-SCAR, która obejmuje sprężyste i rotacyjno-niesprężyste kanały rozproszeń. Poprawione wartości doświadczalne i wyniki obliczeń pozostają w dość dobrej zgodności. Najlepszą zgodność prezentują wyniki uzyskane dla małych energii zderzeń. Rezultaty przeprowadzonej analizy wykazują również dobrą zgodność z wynikami uzyskanymi metodą IAM-SCAR.



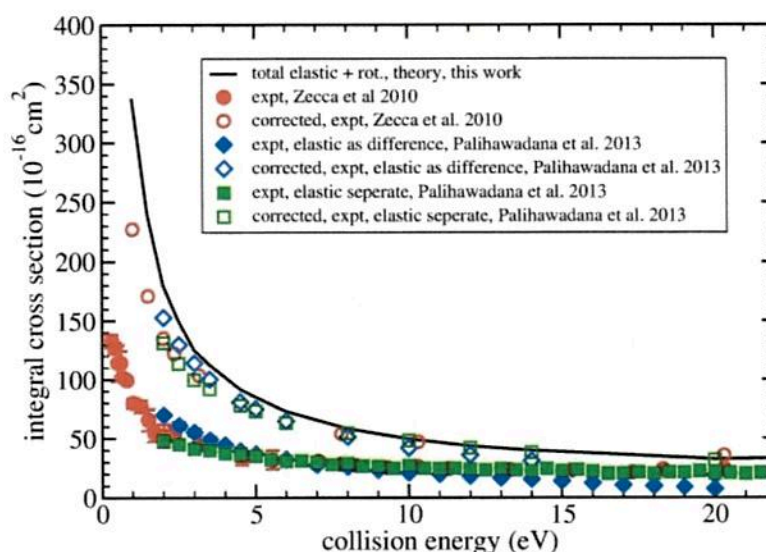
Rysunek 10. Uzyskane na podstawie obliczeń oraz wartości doświadczalne całkowitych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach THF w fazie gazowej. Wartości obliczonych przekrojów czynnych przedstawia czarna ciągła linia. W obliczeniach zastosowano rozwinięcie fal cząstkowych o wartościach aż do $l_{\max} = 50$. Rezultaty analizy teoretycznej zawierają poprawkę Borna w ustalonym układzie odniesienia (SFF, ang. the space-fixed frame) oraz wszystkie sprężyste rotacyjne i niesprężyste kanały rozproszenia. Wyniki doświadczalne uzyskane przez Chiari i wsp. [103] przedstawiają czerwone romby wraz ze słupkami błędów, natomiast romby z czerwonym konturem wyrażają wyniki doświadczalne po poprawce na rozpraszanie w kąt bryłowy do przodu. Wyniki doświadczalne Zecca i wsp. [102] zostały przedstawione w postaci niebieskich kółek wraz ze słupkami błędów, kółka białe z niebieskim konturem to wyniki uwzględniające pozytony rozproszone do przodu. Linia kropkowana przedstawia wyniki obliczeń przeprowadzonych przez Chiari i wsp. [103] przy użyciu metody IAM-SCAR. Rysunek z publikacji Franz i Gianturco [H5].

Na rys. 11 przedstawiono wartości złożone DCS dla rozpraszania pozytonów na cząsteczkach pirymidyny. Na rysunku przedstawiono również dane eksperymentalne uzyskane przez Palihawadana i wsp. [105] przy użyciu układu pomiarowego grupy z ANU. Zgodność przewidywań teoretycznych z danymi eksperymentalnymi jest dobra. Dla większych energii zderzeń zgodność jest gorsza, ale nadal pozostaje w rozsądnych granicach.



Rysunek 11. Różniczkowy przekrój czynny (DCS, ang. differential cross sections) na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach pirymidyny w fazie gazowej dla energii zderzeń 3.0 eV. Wartości obliczone przedstawia ciągła czarna linia. Wartości eksperymentalne uzyskane przez Palihawadana i wsp. [105] przedstawiają czerwone romby. Rysunek z publikacji Franz i Gianturco [H6].

Podobnie jak dla cząsteczki THF, również i dla pirymidyny obliczono poprawkę kątową dla doświadczalnych wartości quasi-sprężystych przekrojów całkowych, wykorzystując teoretyczne wartości DCS. Na rys. 12 przedstawiono porównanie obliczonego całkowitego przekroju quasi-sprężystego wraz z poprawkami i wartościami doświadczalnymi (bez poprawek) uzyskanymi przez grupę z Trento (Zecca i wsp. [104]) oraz dwoma zestawami danych doświadczalnych grupy z ANU (Paliawadana i wsp. [105]). Doświadczalne wartości przekrojów czynnych zawierają wszystkie niesprężyste kanały rozproszeń oprócz tworzenia pozytonium. Poprawione zestawy danych eksperymentalnych i wyniki naszych obliczeń pozostają w dobrej zgodności. Z danych zamieszczonych na rys. 12 wynika również znaczenie poprawki kątowej przy porównywaniu danych doświadczalnych uzyskanych przez różne grupy badaczy. Bez uwzględnienia poprawki kątowej różnica między wartościami doświadczalnymi jest dość duża (patrz pełne symbole na rys. 12). Na przykład dla energii rzędu 2 eV dwie wartości przekroju czynnego, uzyskane przez Paliawadana i wsp., różnią się o 50 procent. Po zastosowaniu poprawki kątowej wszystkie trzy zestawy danych eksperymentalnych są ze sobą zgodne.

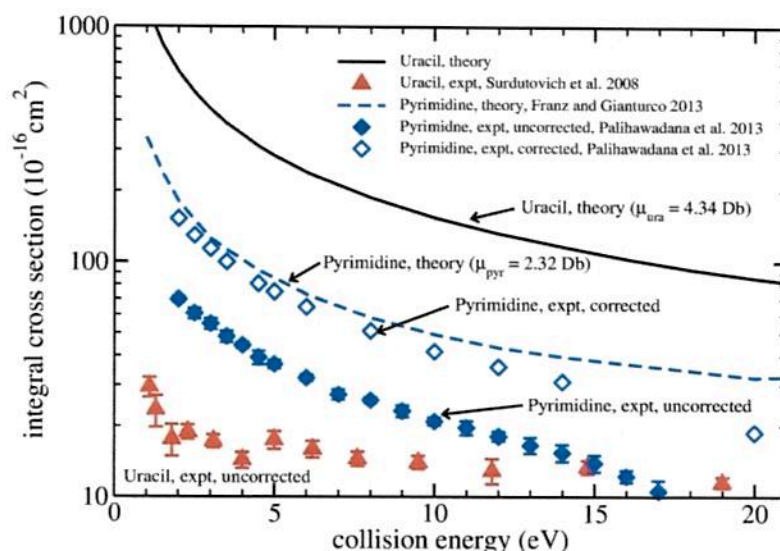


Rysunek 12. Wartości obliczone i doświadczalne całkowitych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach pirymidyny w fazie gazowej. Rezultaty obliczeń przedstawia czarna ciągła linia. W analizie teoretycznej zastosowano rozwinięcie fal parcjalnych aż do wartości $l_{\max} = 50$. Wyniki zawierają poprawkę Borna w ustalonym układzie odniesienia (SFF, ang. the space-fixed frame) oraz sumowanie po wszystkich rotacyjno-sprężystych i niesprężystych kanałach rozproszeń. Wyniki doświadczalne bez poprawki zostały przedstawione na wykresie, jako pełne symbole. Poprawione wartości doświadczalne zostały wyrażone, jako puste symbole (Zecca i wsp. [104]: czerwone kółka, Paliawadana i wsp. [105]: niebieskie romby i zielone kwadraty). Rysunek z publikacji Franz i Gianturco [H6].

4.2. Nisko energetyczne rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach RNA i DNA w fazie gazowej

Uzyskanie, zgodnych z wynikami doświadczalnymi, wartości obliczonych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów, o niskich wartościach energii, na modelowych cząsteczkach związków THF i pirymidyny skłoniło nas do przeprowadzenia badań teoretycznych nad rozpraszaniem pozytonów na rzeczywistych nukleotydach RNA i DNA. Powstanie publikacji [H7] i [H8] było motywowane brakiem danych wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach tych związków. Dokonując przeglądu literatury w roku 2013, podczas pisania publikacji [H7] dotyczącej rozpraszania pozytonów na cząsteczkach uracylu, znalazłem zaledwie jedną publikację dotyczącą rozpraszania pozytonów na nukleotydach RNA i DNA. Była to praca eksperymentalna napisana przez Surdutovicha i wsp. [106] z grupy w Detroit dotycząca zderzeń pozytonów z nukleotydem RNA-uracylem. Zaledwie kilka tygodni po opublikowaniu pracy [H7], zespół Andersona i wsp. [107] z grupy ANU opublikował wyniki dotyczące rozpraszania

pozytonów na cząsteczkach uracylu wraz z danymi eksperymentalnymi i wynikami obliczeń metodą IAM-SCAR.



Rysunek 13. Obliczone i doświadczalne wartości całkowych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach uracylu w fazie gazowej. Obliczone wartości przekrojów czynnych przedstawia czarna ciągła linia. Do obliczeń zastosowano rozwinięcie funkcji parcjalnych do wartości $l_{\max} = 40$. Rezultaty analizy teoretycznej uwzględniają poprawkę Borna w ustalonym układzie współrzędnych przestrzennych (SFF, ang. the space-fixed frame) i sumowanie po wszystkich rotacyjno-sprężystych i niesprężystych kanałach rozproszeń. Dla porównania na wykresie przedstawiono wartości całkowych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach pirymidyny (publikacja [H6]) oznaczone niebieską linią przerywaną. Wartości doświadczalne przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach uracylu uzyskane przez Surdutovicha i wsp. [106] zostały przedstawione, jako czerwone trójkąty. Dla porównania przedstawiono również wyniki doświadczalne przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach pirymidyny uzyskane przez Paliawadana i wsp. [105] (dane eksperymentalne: niebieskie romby, dane z uwzględnioną poprawką na rozpraszanie pozytonów do przodu, uzyskaną z obliczeń: białe romby z niebieskim konturem). Rysunek z publikacji Franz i wsp. [H7].

Rys. 13 przedstawia obliczone wartości quasi-elastycznych przekrojów czynnych wraz z danymi doświadczalnymi uzyskanymi przez grupę badaczy z Detroit. Wyznaczone na podstawie obliczeń wartości quasi-elastycznego przekroju czynnego zawierają sprężyste, rotacyjne i oscylacyjne niesprężyste kanały rozproszeń. Dane eksperymentalne stanowią wartości całkowitych przekrojów czynnych, które zawierają wszystkie możliwe kanały rozproszeń. Prezentowane na rys. 13 wartości przekrojów czynnych stanowią dane doświadczalne bez poprawki kątowej, która w odróżnieniu od wcześniej prezentowanych danych doświadczalnych dla THF i pirymidyny, nie została obliczona ze względu na brak danych o natężeniu pól elektromagnetycznych w komorze rozproszeniowej. Różnica pomiędzy obliczonymi przekrojami czynnymi, a danymi doświadczalnymi to kilka rzędów wielkości. Przybliżoną wartość przekroju czynnego można uzyskać na podstawie porównania z wartościami uzyskanymi dla pirymidyny. Stąd niektóre dane dotyczące pirymidyny również przedstawiono na rys. 13. Rotacyjny, niesprężysty przekrój czynny stanowi główny wkład do całkowitego przekroju w zakresie energetycznym poniżej 10 eV. Ten rozmiar przekrojów czynnych skalowany jest w przybliżeniu do kwadratu momentu dipolowego cząsteczki. Cząsteczka pirymidyny posiada moment dipolowy rzędu 2,32 D. Moment dipolowy cząsteczki uracylu jest równy 4,34 D. Dlatego należy oczekiwać, że przekrój czynny uracylu powinien być około 4 razy większy niż przekrój czynny dla pirymidyny. Z tego powodu dane eksperymentalne wydają się być niedoszacowane w stosunku do rzeczywistych wartości przekrojów czynnych. Wyniki badań rozpraszania pozytonów na cząsteczkach uracylu przeprowadzone przez grupę z ANU (Anderson i wsp. [107]) zostały opublikowane wkrótce po ukazaniu się naszej pracy. Opublikowane rezultaty pomiarów miały zbliżone wartości do uzyskanych przez nas wyników z obliczeń. W publikacji Andersona i wsp. [107] główna niepewność pomiarowa wynika z trudności oszacowania częściowego ciśnienia uracylu w komorze gazowej. Anderson i wsp. rozwiązali ten problem

[Podpis] 24

pośrednio skalując dane doświadczalne do ich wartości wyznaczonych z obliczeń metodą IAM-SCAR. Dane uzyskane przez grupę z Detroit mogą wykazywać podobny problem.

W publikacji [H8] zostały przedstawione wyniki obliczeń całkowitych przekrojów czynnych oraz przekrojów czynnych na przekaz pędu na rozpraszanie pozytonów na nukleotydach DNA: adeniny, guaniny, tyminy i cytozyny dla energii zderzeń o wartościach poniżej 25 eV. Z wyjątkiem tyminy, wszystkie nukleotydy wykazują pewną liczbę stałych tautomerów: 5 dla cytozyny, 6 dla adeniny i 9 dla guaniny.

W przypadku tautomerów, które można znaleźć w DNA, wykonano kwantowe obliczenia dynamiczne w podobny sposób do tych wykonanych dla THF, pirymidyny i uracylu. Uzyskane wartości całkowitych przekrojów czynnych i przekrojów czynnych na przekaz pędu stanowią krzywe gładkie bez cech rezonansowych. Wszystkie przekroje czynne mogą być przybliżone przez pierwsze przybliżenie Borna. Wyrażenia na pierwszy przybliżony dipol Borna użyte do poprawy elementów K-macierzy i przekrojów różniczkowych, całkowych i uwzględniających transfer momentu pędu rotacyjnego sprężystego i niesprężystego rozpraszania, podano w dodatku dołączonym do publikacji [H8]. Wyrażenia te można stosować do asymetrycznych rotatorów takich jak nukleotydy DNA. Przekroje czynne wszystkich tautomerów oblicza się w ramach pierwszego przybliżenia Borna. W celu zwiększenia użyteczności tych danych dla innych badaczy, wszystkie parametry (momenty dipolowe, momenty bezwładności, wartości własne rotacji itp.) zebrano w tabeli zamieszczonej w pracy [H8]. Ponadto, w publikacji zawarto wyrażenia analityczne służące do obliczenia poprawki kątowej do uzyskiwanych eksperymentalnie wartości przekrojów czynnych.

W publikacji [H13] przedstawiono schemat bazy danych zawierającej obliczone wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na biocząsteczkach.

5. Podsumowanie

W autoreferacie opisano 13 prac, których tematyka dotyczy zjawiska rozpraszania pozytonów na cząsteczkach w fazie gazowej. Prezentowane wyniki badań zawierają wyprowadzenia nowych metod teoretycznych, opracowanie programów obliczeniowych oraz ich zastosowanie do przeprowadzenia obliczeń przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów w gazach, a także porównanie otrzymanych rezultatów z wartościami doświadczalnymi. Większość uzyskanych na podstawie metod obliczeniowych wartości przekrojów czynnych stanowi najbardziej kompletną bazę danych spośród dostępnych w literaturze zagadnienia. Osiem z prezentowanych w niniejszym dokumencie publikacji jest cytowanych w przeglądowym artykule Brungera i wsp. [21], który przedstawia najbardziej aktualną kompilację wartości doświadczalnych i teoretycznych przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach.

6. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych (artystycznych).

1. [P1] J. Franz, S. D. Peyerimhoff, M. Hanrath, O.-H. Kwon and D.-J. Jang, *Ab-initio study of the electronic spectrum of 7-hydroxyquinoline*, 2005, Chemistry Letters, volume 34, pages 330-331, DOI: 10.1246/cl.2005.330
IF₂₀₀₅ = 1.734, ilość cytowań: 1.
2. [P2] J. Franz, *Multi-state multi-reference Møller-Plesset second-order perturbation theory for molecular calculations*, 2006, International Journal of Quantum Chemistry, volume 106, pages 773-786, DOI: 10.1002/qua.20848
IF₂₀₀₆ = 1.182, ilość cytowań: 7.



3. [P3] F. A. Gianturco, J. Franz, R. J. Buenker, H.-J. Liebermann, L. Pichl, J.-M. Rost, M. Tachikawa and M. Kimura,
Positron binding to alkali-metal hydrides: the role of molecular vibrations,
2006, Physical Review A, volume 73, article number 022705,
DOI: 10.1103/PhysRevA.73.022705
IF₂₀₀₆ = 3.047, ilość cytowań: 41.
4. [P4] J. Franz and F. A. Gianturco,
Vibrational excitation of acetylene by positron impact: the totally symmetric modes at near-threshold energies,
2006, European Physical Journal D, volume 39, pages 407-413,
DOI: 10.1140/epjd/e2006-00115-2
IF₂₀₀₆ = 1.988, ilość cytowań: 5.
5. [P5] I. Bâldea, J. Franz, P. G. Szalay and H. Köppel,
Multi-mode vibronic interactions in the five lowest electronic states of the fluorobenzene radical cation,
2006, Chemical Physics, volume 329, pages 65-75,
DOI: 10.1016/j.chemphys.2006.07.025
IF₂₀₀₆ = 1.984, ilość cytowań: 24.
6. [P6] I. Bâldea, J. Franz and H. Köppel,
Jahn-Teller and related conical intersections in the benzene radical cation and the monofluoro derivative,
2007, Journal of Molecular Structure, volume 838, pages 94-99,
DOI: 10.1016/j.molstruc.2007.01.018
IF₂₀₀₇ = 1.486, ilość cytowań: 11.
7. [P7] E. Gindensperger, I. Bâldea, J. Franz and H. Köppel,
Multi-state vibronic interactions in the fluorobenzene radical cation: the importance of quadratic coupling terms,
2007, Chemical Physics, volume 338, pages 207-219,
DOI: 10.1016/j.chemphys.2007.03.026
IF₂₀₀₇ = 1.805, ilość cytowań: 32.
8. [P8] K. L. Baluja, R. Zhang, J. Franz and J. Tennyson,
Low-energy positron collisions with water: elastic and rotationally inelastic scattering,
2007, Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics, volume 40, pages 3515-3524,
DOI: 10.1088/0953-4075/40/17/018
IF₂₀₀₇ = 2.012, ilość cytowań: 27.
9. [P9] J. Franz, K. L. Baluja, R. Zhang and J. Tennyson,
Polarisation effects in low-energy positron-molecule scattering,
2008, Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, volume 266, pages 419-424,
DOI: 10.1016/j.nimb.2007.12.055
IF₂₀₀₈ = 0.999, ilość cytowań: 8.
10. [P10] Y.-S. Lee, O.-H. Kwon, H. J. Park, J. Franz and D.-J. Jang,
Excited-state proton transfer and geminate recombination in the molecular cage of beta-cyclodextrin,
2008, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, volume 194, pages 105-109,

DOI: 10.1016/j.jphotochem.2007.07.021

IF₂₀₀₈ = 2.362, ilość cytowań: 11.

11. **[P11]** J. Franz, F. A. Gianturco, K. L. Baluja, J. Tennyson, R. Carey, R. Montuoro, R.R. Lucchese, T. Stoecklin, P. Nicholas and T. L. Gibson,
Correlation-polarization effects in electron/positron scattering from acetylene. A comparisson of computational models,
2008, Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, volume 266, pages 425-434,
DOI: 10.1016/j.nimb.2007.12.019
IF₂₀₀₈ = 0.999, ilość cytowań: 18.
12. **[P12]** J. Franz, J. S. Francisco and S. D. Peyerimhoff,
Production of singlet oxygen atoms by photodissociation of oxywater,
2009, Journal of Chemical Physics, volume 130, article number 084304,
DOI: 10.1063/1.3080808
IF₂₀₀₉ = 3.093, ilość cytowań: 3.
13. **[P13]** R. Zhang, K.L. Baluja, J. Franz and J. Tennyson,
Positron collisions with molecular hydrogen: cross sections and annihilation parameters calculated using the R-matrix with pseudo-states method,
2011, Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics, volume 44, article number 035203,
DOI: 10.1088/0953-4075/44/3/035203
IF₂₀₁₁ = 1.875, ilość cytowań: 28.
14. **[P14]** J. Franz, M. Gustafsson and G. Nyman,
Formation of carbon-monoxide by radiative association: a quantum-dynamical study,
2011, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, volume 414, pages 3547 3550,
DOI: 10.1111/j.1365-2966.2011.18654.x
IF₂₀₁₁ = 4.900, ilość cytowań: 9.
15. **[P15]** M. Gustafsson, S. V. Antipov, J. Franz and G. Nyman,
Refined theoretical study of radiative association: cross sections and rate constants for the formation of SiN,
2012, Journal of Chemical Physics, volume 137, article number 104301,
DOI: 10.1063/1.4750029
IF₂₀₁₂ = 3.164, ilość cytowań: 18.
16. **[P16]** F. Carelli, J. Franz, F. A. Gianturco and M. Satta,
A dipole-driven path for electron and positron attachments to gas-phase uracil and pyrimidine molecules: a quantum scattering analysis,
2015, European Physical Journal D, volume 69, article number 143,
DOI: 10.1140/epjd/e2015-60096-5
IF₂₀₁₅ = 1.208, ilość cytowań: 1.
17. **[P17]** F. Carelli, J. Franz and F. A. Gianturco,
Dipole-driven dynamics for near-threshold electron/positron interactions with pyrimidinic DNA bases: a path to compound formations,
2016, Molecular Physics, volume 114, pages 213-226,
DOI: 10.1080/00268976.2015.1092609
IF₂₀₁₆ = 1.836, ilość cytowań: 1.

6.1. Stany elektronowego wzbudzenia cząsteczek

Tematyka poruszana w publikacji [P2] dotyczy zagadnień analizowanych w mojej rozprawie doktorskiej. W cytowanym artykule przedstawiamy wielokonfiguracyjną metodę rachunku zaburzeń Møllera-Plesseta (MSMRMP2, ang. multi-state Møllera-Plesset second order perturbation theory). Metoda polega na uogólnieniu teorii rachunku zaburzeń drugiego rzędu Møllera-Plesseta (MP2, ang. Møllera-Plesset second order perturbation theory) i pozwala na obliczanie cząsteczek otwartopowłokowych i stanów wzbudzenia elektronowego.

Metoda MSMRMP2 stosowana do obliczeń zawartych w publikacji [P2] została również wykorzystana w analizie teoretycznej przedstawionej w pracy [P1] do wyznaczania widma elektronowego 7-hydroksychinolin. Omówiono również możliwość wystąpienia fotoindukowanych reakcji transferu protonu.

W publikacji [P10] przedstawiono wyniki badań fotoindukowanych reakcji transferu protonu w uwodnionej 6-hydroksychinolinie wewnątrz nano wnęk beta-cyklodekstryny. W pracy omówiono wyniki eksperymentalne uzyskane przez grupę Prof. D.-J. Janga z Uniwersytetu w Seulu i wyniki teoretyczne uzyskane na podstawie obliczeń z wykorzystaniem metody DFT zależnej od czasu.

W publikacji [P12] zastosowano metodę MSMRMP2 do badania fotodysocjacji utlenionej wody do cząsteczki wody i tlenu singletowego. Dyskutowany jest również udział cząsteczek utlenionej wody, jako potencjalnego źródła pojedynczych atomów tlenu w troposferze. Motywacją do powstania tej pracy była publikacja Rohrer i Berresheimera [108], w której autorzy opisują odkrycie silnej korelacji między stężeniem pojedynczych atomów tlenu i grupami hydroksylowymi w troposferze. Czynniki hydroksylowe są wysoce skuteczne odczynniki utleniające. Dlatego też rodniki hydroksylowe są uważane za środki czyszczące w troposferze i chronią warstwę ozonową przed szkodliwymi gazami śladowymi (np. Weatherhead i Andersen [109]).

6.2. Oddziaływanie pozytonów i elektronów z cząsteczkami

W publikacji [P3] dyskutowana jest rola stanów związanych pozytonu w wodorkach alkalicznych: LiH, NaH, KH i RbH. W artykule przedstawiono krzywe potencjałów i położenia oscylacyjnych poziomów energetycznych dla związanego kompleksu pozytonu i czynników neutralnych. Na podstawie danych obliczano wartości czynników Francka-Condon dla pozytonów i powinowactwa pozytonów. Wszystkie obliczenia dotyczące kompleksów z pozytonem i fragmentów neutralnych zostały przeprowadzone za pomocą metody oddziaływań konfiguracyjnych dla układów złożonych.

W publikacjach [P16] i [P17] przedstawiono wyniki obliczeń dipolowych stanów związanych dla elektronów i pozytonów w pirymidynach oraz w pirymidynowych zasadach RNA (uracyl) i DNA (cytozyna i tymina). Dipolowe stany związane są uważane za stany powiązane asymptotycznym potencjałem dipola, analogicznie do stanów Rydberga, które są związane asymptotycznym potencjałem kulombowskim. W artykule omówiono mechanizm formowania się stanów dipolowych w wyniku zderzeń elektronów bądź pozytonów z cząsteczkami przy bardzo małych energiach zderzeń rzędu kilku meV i mniejszych.

W publikacji [P4] przedstawiono wyniki obliczeń wzbudzeń oscylacyjnych cząsteczki acetyleny w wyniku zderzeń z wiązką pozytonów. W przeprowadzeniu obliczeń użyto metody silnego sprzężenia modów oscylacyjnych (ang. the vibrational-close-coupling method) z wieloskładnikową metodą DFT. Zastosowana procedura była zasadniczo taka sama jak ta użyta w publikacji [H4], gdzie znalazła zastosowanie do przeprowadzenia obliczeń wzbudzeń oscylacyjnych cząsteczki CF₄ w wyniku oddziaływania z pozytonami i elektronami.

W publikacji [P11] przedstawiono porównanie kilku różnych modeli obliczeniowych do określenia wpływu polaryzacji i korelacji na sprężyste zderzenia elektronów i pozytonów z cząsteczką acetyleny. Jednym z celów tego artykułu jest wykazanie, że kody komputerowe różnych grup badawczych mogą dać takie same wyniki numeryczne, jeśli stosowane są podobne modele

rozpraszania. Stąd publikacja ta dowodzi poprawności rezultatów otrzymywanych z poszczególnych programów komputerowych.

6.3. *Zależna od czasu i czasowo-niezależna dynamika jąder*

Publikacje [P5], [P6] i [P7] powstały we współpracy z grupą prof. Horsta Köppela z Uniwersytetu w Heidelbergu. W pracach przedstawiono rezultaty badań ultraszybkiej dynamiki kationorodnika fluorobenzenu w procesie jonizacji indukowanej szerokim impulsem laserowym. Impuls laserowy może jonizować cząsteczki w taki sposób, że kilka pierwszych stanów elektronowego wzbudzenia kationu zostaje zapełnionych. Celem tego projektu było wykazanie, że bezpromienisty zanik zachodzi na tyle szybko, że nie może być obserwowany doświadczalnie.

Kwantowe symulacje dynamiczne zależne od czasu zostały przeprowadzone za pomocą bardzo skutecznej, zależnej od czasu wielokonfiguracyjnej metody Hartree (MCTDH, ang. multiconfigurational time-dependent Hartree method). W publikacji [P5] wielofunkcyjne, wielopunktowe oddziaływania oscylacyjne są opisane przez liniowy model sprzężenia oscylacyjnego (LVC, ang. linear vibronic coupling). W podręczniku [P7] została wprowadzona poprawka poprzez wprowadzenie modelu kwadratowego sprzężenia oscylacyjnego (QVC, ang. quadratic vibronic coupling). Wszystkie parametry modelowego Hamiltonianu są obliczane ab initio za pomocą metody sprzężonych klasterów (EOMCC, ang. equation-of-motion coupled-cluster). Uwzględnienie członów kwadratowych w modelu QVC okazuje się kluczowe dla przeprowadzenia symulacji bezpromienistego mechanizmu relaksacji, który zachodzi w czasie rzędu pikosekund. Ponadto przeprowadzono symulację widma fotoelektronowego (PE, ang. Photoelectron) i fotoindukowanego widma Rydberga (PIRI, ang. photoinduced Rydberg ionization) oraz widma MATI (MATI, ang. mass analyzed threshold ionization). Dokładność przeprowadzonych symulacji widm wykazuje poprawę w modelu QVC. W publikacji [P6] dyskutowane są różnice pomiędzy rodnikami kationowymi benzenu i fluorobenzenu.

Prace [P14] i [P15] powstały we współpracy z grupą prof. Gunnara Nymana z Uniwersytetu w Göteborgu. Obliczone zostały stałe szybkości reakcji promienistego wiązania atomów w celu utworzenia cząsteczek dwuatomowych. Wyznaczone stałe szybkości reakcji są ważne przy modelowaniu astrochemicznym w celu zrozumienia tworzenia się cząsteczek w rejonach powstawania gwiazd. Ponieważ szybkość reakcji jest bardzo mała, nie może być zmierzona eksperymentalnie i musi być uzyskiwana teoretycznie. W tym celu zostały opracowane proste, niezależne od czasu, metody obliczeniowe stałych szybkości reakcji.

7. Literatura

- [1] M. Charlton and J. W. Humberston, *Positron Physics*, Cambridge University Press (Cambridge, 2001).
- [2] W. Greiner and J. Reinhardt, *Feldquantisierung*, Verlag Harri Deutsch (Frankfurt am Main, 1993).
- [3] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* 126 (1930) 360.
- [4] C. D. Anderson. *Science* 67 (1932) 238.
- [5] C. D. Anderson. *Phys. Rev.* 43 (1933) 491.
- [6] C. D. Anderson, The production and properties of positrons, in *Nobel Lectures, Physics 1922-1941*, Elsevier Publishing Company (Amsterdam, 1965).
- [7] P. M. S. Blackett and G. P. S. Occhialini, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* 139 (1933) 699.
- [8] F. Close, *Antimatter*, Oxford University Press (Oxford, 2010).
- [9] H. Alfven, *Worlds-Antiworlds, Antimatter in Cosmology*, W. H. Freeman (San Francisco, 1966).
- [10] H. Alfven, *Rev. Mod. Phys.*, 37 (1965) 652.
- [11] T. Piran, *Rev. Mod. Phys.* 76 (2005) 1143.



- [12] N. Prantzos, C. Boehm, A. M. Bykov, R. Diehl, K. Ferrière, N. Guessoum, P. Jean, J. Knoedlseder, A. Marcowith, I. V. Moskalenko, A. Strong, and G. Weidenspointner. *Rev. Mod. Phys.* 83 (2011) 1001.
- [13] O. E. Mogensen, *Positron Annihilation in Chemistry*, Springer-Verlag (Berlin, 1995).
- [14] R. Krause-Rehberg and H. S. Leipner, *Positron Annihilation in Semiconductors*, Springer-Verlag (Berlin, 1999).
- [15] S. R. Cherry, J. A. Sorensen, M. E. Phelps, *Physics in Nuclear Medicine*, Elsevier Saunder (Philadelphia, 2012).
- [16] A. Zecca, G. P. Karwasz, R. S. Brusa, *La Rivista del Nuovo Cimento* 19 No. 3 (1996) 1.
- [17] G. P. Karwasz, R. S. Brusa, A. Zecca, *La Rivista del Nuovo Cimento* 24, No. 1 (2001) 1.
- [18] G. P. Karwasz, R. S. Brusa, A. Zecca, *La Rivista del Nuovo Cimento* 24, No. 4 (2001) 1.
- [19] C. M. Surko and F. A. Gianturco (Editors), *New Directions in Antimatter Chemistry and Physics*, Kluwer (Dordrecht, 2001).
- [20] J. R. Danielson, D. H. E. Dubin, R. G. Greaves, C. M. Surko, *Rev. Mod. Phys.* 87 (2015) 247.
- [21] M. J. Brunger, S. J. Buckman, K. Ratnavelu, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 46 (2017) 023102.
- [22] A. Jain and F. A. Gianturco, *J. Phys. B* 24 (1991) 2387.
- [23] E. Boroński and R. M. Nieminen, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 3820.
- [24] E. Boroński and H. Stachowiak, *Phys. Rev. B* 57 (1998) 6215.
- [25] N. D. Drummond, P. López Ríos, C. J. Pickard, and R. J. Needs, *Phys. Rev. B* 82 (2010) 035107.
- [26] N. D. Drummond, P. López Ríos, C. J. Pickard, and R. J. Needs, *Phys. Rev. Lett.* 107 (2011) 207402.
- [27] J. Mitroy, B. Barbiellini, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 235103.
- [28] J. Mitroy, I.A. Ivanov, *Phys. Rev. A* 65 (2002) 042705.
- [29] J. Arponen, *J. Phys. C* 11 (1978) L739.
- [30] C.M. Surko, G.F. Gribakin, S.J. Buckmann, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 38 (2005) R57.
- [31] K. Iwata, R.G. Greaves, T.J. Murphy, M.D. Tinkle, C.M. Surko, *Phys. Rev. A* 51 (1995) 73.
- [32] M.T. do N. Varella, C.R.C. de Carvalho, M.A.P. Lima, *Nucl. Instr. and Meth. B* 192 (2002) 225.
- [33] E.A.G. Armour, D.J. Baker, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 17 (1986) L871.
- [34] J. P. Marler and C. M. Surko, *Phys. Rev. A* 72 (2005) 062702.
- [35] A. Mann and F. Linder, *J. Phys. B* 25 (1992) 545.
- [36] R. A. Bonham, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1* 33 (1994) 4157.
- [37] N. Moiseyev, *Phys. Rep.*, 302 (1998) 211.
- [38] N. Moiseyev, *Non-Hermitian Quantum Mechanics*, Cambridge University Press (Cambridge, 2011).
- [39] F. Calogero, *Variable Phase approach to Potential Scattering*, Academic Press (New York, 1967).
- [40] W. N. Sams, D. J. Kouri, *J. Chem. Phys.*, 51 (1969) 4809.
- [41] W. N. Sams, D. J. Kouri, *J. Chem. Phys.*, 51 (1969) 4815.
- [42] W. N. Sams, D. J. Kouri, *J. Chem. Phys.*, 52 (1970) 4144.
- [43] W. N. Sams, D. J. Kouri, *J. Chem. Phys.*, 53 (1970) 496.
- [44] W. Eastes, D. Secrest, *J. Chem. Phys.*, 56 (1972) 640.
- [45] B. H. Choi, K. T. Tang, *J. Chem. Phys.*, 63 (1975) 1775.
- [46] F. A. Gianturco, *The Transfer of Molecular Energies by Collision: Recent Quantum Treatments*, Springer-Verlag (Berlin, 1979).
- [47] G Staszewska, D. W. Schwenke, D. Thirumalai, D. G. Truhlar, *Phys. Rev. A*, 28 (1983) 2740.

- [48] F. Blanco, G. Garcia, Phys. Lett. A, 255 (1999) 147.
- [49] F. Blanco, G. Garcia, Phys. Lett. A, 295 (2002) 178.
- [50] D. D. Reid, J. M. Wadehra, J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29 (1996) L127.
- [51] D. D. Reid, J. M. Wadehra, J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 (1997) 2318.
- [52] T. Mukherjee and N. K. Sarkar, J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. 41 (2008) 125201.
- [53] M. C. Zammit, D. V. Fursa, and I. Bray, Phys. Rev. A 87 (2013) 020701(R).
- [54] G. P. Karwasz, D. Pliszka, and R. S. Brusa, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B 247 (2006) 68.
- [55] A. Zecca, L. Chiari, A. Sarkar, K. L. Nixon, and M. J. Brunger, Phys. Rev. A 80 (2009) 032702.
- [56] J. R. Machacek, E. K. Anderson, C. Makochekeanwa, S. J. Buckman, and J. P. Sullivan, Phys. Rev. A 88 (2013) 042715.
- [57] J.-Y. Zhang, J. Mitroy, and K. Varga, Phys. Rev. Lett. 103 (2009) 223202.
- [58] R.P. McEachran, A.G. Ryman, A.D. Stauffer, J. Phys. B 12 (1979) 1031.
- [59] A.C.L. Jones, C. Makochekeanwa, P. Caradonna, D.S. Slaughter, J.R. Machacek, R.P. McEachran, J.P. Sullivan, S.J. Buckman, A.D. Stauffer, I. Bray, D.V. Fursa, Phys. Rev. A 83 (2011) 032701.
- [60] D.V. Fursa, I. Bray, New J. Phys. 14 (2012) 035002.
- [61] D.G. Green, J.A. Ludlow, G.F. Gribakin, Phys. Rev. A 90 (2014) 032712.
- [62] W.E. Kauppila, T.S. Stein, G. Jesion, Phys. Rev. Lett. 36 (1976) 580.
- [63] G. Sinapius, W. Raith, W.G. Wilson, J. Phys. B 13 (1980) 4079.
- [64] G.P. Karwasz, D. Pliszka, R.S. Brusa, Nucl. Instrum. Methods B 247 (2006) 68.
- [65] A. Zecca, L. Chiari, E. Trainotti, D.V. Fursa, I. Bray, A. Sarkar, S. Chattopadhyay, K. Ratnavelu, M.J. Brunger, J. Phys. B 45 (2012) 015203.
- [66] A. Zecca, L. Chiari, A. Sarkar, and M. J. Brunger, New J. Phys. 13 (2011) 115001.
- [67] M. Charlton, G. Laricchia, T. C. Griffith, G. L. Wright, and G. R. Heyland, J. Phys. B 17 (1984) 4945.
- [68] K. R. Hoffman, M. S. Dababneh, Y. F. Hsieh, W. E Kauppila, V. Pol, J. H. Smart, and T. S. Stein, Phys. Rev. A 25 (1982) 1393.
- [69] O. Sueoka and A. Hamada, J. Phys. Soc. Jpn. 62 (1993) 2669.
- [70] E. P. Wigner, Phys. Rev. 70 (1946) 15.
- [71] E. P. Wigner, Phys. Rev. 70 (1946) 606.
- [72] E. P. Wigner, L. Eisenbud, Phys. Rev. 72 (1947) 29.
- [73] L. A. Morgan, J. Tennyson, C. J. Gillan, Comput. Phys. Comm. 114 (1998) 120.
- [74] J. Tennyson, Phys. Rep. 491 (2010) 29.
- [75] C. Bloch, Nuclear Phys. 4 (1957) 503.
- [76] J. Tennyson and G. Danby, The ab initio inclusion of polarisation effects in low-energy positron- molecule collisions using the R-matrix method, in "Atomic Physics with Positrons", E. A. G. Armour and J. W. Humberston (Eds.), NATO ASI series B, 169, pages 111-121 Plenum Press (New York, 1988).
- [77] G. Danby and J. Tennyson, Phys. Rev. Lett., 61 (1988) 2737.
- [78] G. Danby and J. Tennyson, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 24 (1991) 3517.
- [79] J. Tennyson, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29 (1996) 1817.
- [80] J. Tennyson, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 37 (2004) 1061.
- [81] O. Sueoka, S. Mori, Y. Katayama J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 (1987) 3237.

- [82] A. Zecca, D. Sanyal, M. Chakrabarti, M. J. Brunger, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39 (2006) 1597.
- [83] Beale J, Armitage S and Laricchia G, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39 (2006) 1337.
- [84] M. Kimura, O. Sueoka, A. Hamada, Y. Itikawa, Adv. Chem. Phys. 111 (2000) 537.
- [85] Y. Okamoto, K. Onda, Y. Itikawa, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 26 (1993) 745.
- [86] A. Hamada and O. Sueoka, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27 (1994) 5055.
- [87] N. Sanna and F. A. Gianturco, Comput. Phys. Commun. 114 (1998) 142.
- [88] W. Tattersall, L. Chiari, J. R. Machacek, E. Anderson, R. D. White, M. J. Brunger, S. J. Buckman, G. Garcia, F. Blanco, J. P. Sullivan, J. Chem. Phys., 140 (2014) 44320.
- [89] A. Zecca, C. Perazzolli, N. Moser, D. Sanyal, M. Chakrabarti, M. J. Brunger, Phys. Rev. A 74 (2006) 012707.
- [90] E. A. G. Armour and J. W. Humberston, Phys. Rep. 204 (1991) 165.
- [91] J. Noga, W. Klopper, and W. Kutzelnigg. CC-R12 An explicitly correlated coupled cluster theory. in: Recent Advances in Coupled-Cluster Methods, R. J. Bartlett (Ed.), pages 1-48, World Scientific (Singapore, 1997).
- [92] S. Ten-no, Chem. Phys. Lett., 398 (2004) 56.
- [93] S. Ten-no, J. Chem. Phys., 126 (2007) 014108.
- [94] G. F. Gribakin and J. Ludlow, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 35 (2002) 339.
- [95] J. Mitroy and M. W. J. Bromley, Phys. Rev. A 73 (2006) 052712.
- [96] Armour E A G, Baker D J and Plummer M, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23 (1990) 3057.
- [97] M. T. do N. Varella, C.R.C. de Carvalho, M.A.P. Lima, Nucl. Instr. and Meth. B, 192 (2002) 225.
- [98] G. Laricchia, M. Charlton, C. D. Beling and T. C. Griffith, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 (1987) 1865.
- [99] N. Sanna, I. Baccarelli, G. Morelli, Comp. Phys. Comm. 180 (2009) 2544.
- [100] N. Sanna, I. Baccarelli, G. Morelli, Comp. Phys. Comm. 180 (2009) 2550.
- [101] A. Jain, D. G. Thompson, Comp. Phys. Comm. 32 (1984) 367.
- [102] A. Zecca, C. Perazzolli, M. J. Brunger, J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 38 (2005) 2079.
- [103] L. Chiari, E. Anderson, W. Tattersall, J. R. Machacek, P. Paliawadana, C. Makochekeanwa, J. P. Sullivan, G. Garcia, F. Blanco, R. P. McEachran, M. J. Brunger, S. J. Buckman J Chem. Phys. 138 (2013) 074301.
- [104] A. Zecca, L. Chiari, G. Garcia, F. Blanco, E. Trainotti, M. J. Brunger, J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 (2010) 215204.
- [105] P. Paliawadana, R. Boadle, L. Chiari, E. K. Anderson, J. R. Machacek, M. J. Brunger, S. J. Buckman, J. P. Sullivan, Phys. Rev. A 88 (2013) 012717.
- [106] E. Surdutovich, G. Setzler, W. E. Kauppila, S. J. Rehse, T. S. Stein, Phys. Rev. A 77 (2008) 054701.
- [107] E. K. Anderson, R. A. Boadle, J. R. Machacek, L. Chiari, C. Makochekeanwa, S. J. Buckman, M. J. Brunger, G. Garcia, F. Blanco, O. Ingolfsson, and J. P. Sullivan J. Chem. Phys. 141 (2014) 034306.
- [108] F. Rohrer and H. Berresheim, Nature 442 (2006) 184.
- [109] E. C. Weatherhead and S. G. Andersen, Nature 441 (2006) 39.

III. Inna działalność

A. Działalność dydaktyczna

Doświadczenie w pracy nauczyciela akademickiego zdobyłem pracując na uczelniach wyższych w Niemczech, Wielkiej Brytanii oraz Polsce. Szczegółowo, działalność dydaktyczno-organizacyjną przedstawiona została w dołączonym do wniosku wykazie osiągnięć.

Za pracę dydaktyczną zostałem wyróżniony w 2017 roku zespołową nagrodą Rektora Politechniki Gdańskiej II stopnia. Nagrodę otrzymałem wspólnie z dr hab. J. Guthmullerem za stworzenie kursu w języku angielskim pt. Computational chemistry. Kurs zawierał wykłady, seminarium oraz laboratorium komputerowe. Na potrzeby kursu zostały przygotowane materiały do wykładów i ćwiczeń oraz moduły zdalnego nauczania, które umieszczono na platformie Moodle. Wykłady przedstawiają przegląd metod teoretycznych i algorytmów komputerowych stosowanych w chemii kwantowej. Na zajęciach w laboratorium komputerowym, studenci mają możliwość zdobycia doświadczenia w posługiwaniu się pakietem obliczeniowym Orca. Uczą się również analizy otrzymywanych wyników, która odbywa się poprzez ich porównanie z wartościami zebranymi w bazach danych, takich jak te wyszczególnione przez National Institute of Standards and Technology (NIST) np. NIST Chemistry Webbook, czy też The Computational Chemistry Comparison and Benchmark Data Base (CCCBDB). Oprogramowanie komputerowe wykorzystywane podczas zajęć jest instalowane przez studentów na komputerach w laboratorium studenckim. Ponadto zachęcamy studentów do instalowania oprogramowania obliczeniowego na własnych komputerach, tak, aby mogli uzyskać pełną niezależność. Kurs został oceniony bardzo dobrze w ankietach studenckich.

Do prowadzonych przeze mnie na Politechnice Gdańskiej kursów z programowania dla studentów kierunku fizyka techniczna specjalność informatyka stosowana, przygotowałem komplet materiałów dydaktycznych w formie elektronicznej, które zostały zamieszczone na platformie Moodle. Materiały zawierają min. odnośniki do stron internetowych oraz ćwiczenia wraz z rozwiązaniami. W sumie dla wszystkich kursów, które prowadzę przygotowałem w ramach ćwiczeń, kilkaset małych programów komputerowych. Ponadto materiały zamieszczone na platformie Moodle zawierają, krótkie quizy oraz zadania dla studentów, które sprawdzają ich postępy w nauce, dając szybką informację zwrotną. Kilka wybranych zagadnień zostało przygotowanych w formie kompletnych modułów do zdalnego nauczania. Format zdalnego nauczania zajęć laboratoryjnych pozwala studentom uczestniczyć w zajęciach nawet wówczas, gdy łączą studiowanie z pracą w pełnym bądź niepełnym wymiarze godzin. Materiały dydaktyczne zamieszczone na platformie Moodle cieszą się wśród uczestników kursu szczególnym zainteresowaniem.

Oprócz pracy w charakterze nauczyciela akademickiego, przez okres 18 miesięcy byłem zatrudniony, jako nauczyciel fizyki, chemii, nauk przyrodniczych oraz matematyki i informatyki w szkole średniej dla dzieci w wieku 11 - 18 lat w Niemczech. Proces nauczania, który realizowałem odbywał się zgodnie z zasadą nauczanie poprzez doświadczenie. Nauczanie przedmiotów odbywało się, zatem poprzez przeprowadzanie z dziećmi wielu doświadczeń, które były wykonywane przez uczniów indywidualnie bądź w grupach. Środki finansowe potrzebne na utrzymanie szkolnego zaplecza laboratoryjnego uzyskiwałem w ramach dotacji od firm chemicznych Evonik i BASF. Ponadto, w czasie tej pracy, założyłem koło młodych wynalazców, w którym uczniowie mogli rozwijać swój talent poprzez realizację własnych projektów.

B. Działalność organizacyjna

Obecnie jestem podwykonawcą projektu o numerze 2014/15/D/ST2/02358 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki pt. Rozpraszanie nisko-energetycznych elektronów i pozytonów na atomach i molekułach – eksperyment i teoria. Kierownikiem projektu jest dr hab. K. Fedus z Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu.



W przeszłości kierowałem kilkoma projektami obliczeniowymi. Obecnie zarządzam dwoma grantami komputerowymi we Wrocławskim Centrum Sieciowo-Komputerowym (WCSK) oraz Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej (TASK).

Aktywnie uczestniczyłem w kilku europejskich projektach European COST Actions. Otrzymałem dofinansowanie na wykonanie krótkich projektów naukowych (STSMs) w ramach COST Actions „Our Astrochemical History”, XLIC (XUV/X-ray Light and Fast Ions for Ultrafast Chemistry), Nano-IBCT (Nanoscale Insights into Ion Beam Cancer Therapy), ECCL (Electron Controlled Chemical Lithography) oraz EIPAM (Electron Induced Processing at the Molecular Level). Uczestnicząc w projekcie ECCL byłem członkiem komitetu zarządzającego projektem. Obecnie jestem członkiem grupy proponentów zgłaszających nowy projekt w ramach akcji COST pt. EDICS (Energy Deposition In Complex Biomolecular Systems).

W ciągu ostatnich kilku lat byłem członkiem komitetów organizacyjnych międzynarodowych konferencji naukowych oraz pracowałem, jako recenzent dla kilku międzynarodowych czasopism naukowych. Pełna lista mojej działalności organizacyjnej została przedstawiona w dołączonym do wniosku wykazie osiągnięć.



34