

## Obliczenia Ab initio parametrów spektroskopowych nitryli dla modelowania obserwacji atmosfery Tytana.

### Tytan: unikatowe laboratorium w układzie słonecznym.

Tytan, największy księżyc Saturna, jest jedynym obiektem poza Ziemią posiadającym gęstą atmosferę bogatą w związki organiczne. Od czasu misji Cassini–Huygens wiadomo, że w jego atmosferze zachodzą niezwykle złożone procesy chemiczne, mogące prowadzić do powstawania cząsteczek istotnych z punktu widzenia chemii prebiotycznej. Najnowsze obserwacje z teleskopów Atacama Large Millimeter Array (ALMA) i James Webb Space Telescope (JWST) ujawniły obecność wielu nitryli, związków zawierających grupę  $-CN$ , takich jak acetonitryl ( $CH_3CN$ ), akrylonitryl ( $C_2H_3CN$ ) czy propionitryl ( $C_2H_5CN$ ). **Molekuły te odgrywają kluczową rolę w transporcie pionowym pomiędzy atmosferą a powierzchnią Tytana, fotochemii oraz w procesach prowadzących do powstawania bardziej złożonych cząsteczek organicznych.**

### Analiza obserwacji: Brak niezbędnych danych

Pomimo ogromnego postępu technologicznego, interpretacja tych obserwacji pozostaje niezwykle trudna. Aby z widma odczytać, ile danej cząsteczki rzeczywiście znajduje się w atmosferze, potrzebna jest bardzo dokładna wiedza o tym, jak cząsteczki zachowują się podczas zderzeń z dominującym składnikiem atmosfery, cząsteczkami azotu ( $N_2$ ). **Zderzenia te wpływają na szerokość i kształt linii widmowych, a bez ich prawidłowego opisu nie da się przeprowadzić wiarygodnych analiz. Niestety, dla najważniejszych nitryli takie dane po prostu nie istnieją lub są bardzo niedokładne.**

### Metodologia badań

Celem projektu jest wypełnienie tej luki poprzez obliczenie z zasad pierwszych brakujących parametrów opisujących wpływ zderzeń na kształt linii widmowych. W tym celu zostaną wykorzystane zaawansowane metody chemii kwantowej oraz modelowania zderzeń między cząsteczkami. Najpierw zostaną zbudowane bardzo dokładne powierzchnie energii potencjalnych opisujące oddziaływania pomiędzy cząsteczkami nitryli a azotem. Następnie, na ich podstawie, zostaną przeprowadzone obliczenia rozpraszania kwantowego, które pozwolą wyznaczyć szereg parametrów spektroskopowych potrzebnych do stworzenia modeli linii widmowych.

### Spodziewane wyniki

Wyniki te zostaną następnie użyte do modeli transferu promieniowania i wykorzystane do ponownej analizy widm z ALMA i JWST. Pozwoli to po raz pierwszy uzyskać wiarygodne wartości obfitości tych związków i lepiej zrozumieć procesy chemiczne zachodzące w atmosferze Tytana. Projekt przyczyni się także do rozwoju baz danych spektroskopowych, z których korzystają naukowcy modelujący atmosfery egzoplanet. **Ostatecznie projekt pomoże odpowiedzieć na jedno z najbardziej intrygujących pytań współczesnej planetologii: jak z prostych cząsteczek w środowiskach bogatych w azot mogą powstawać bardziej złożone, potencjalnie prebiotyczne struktury chemiczne?**