

Pomimo niewielkich ilości aktywności dostępnych w naturalnej postaci, opis ich właściwości chemicznych jest ciągle priorytetem i szerokim polem zainteresowań w badaniach naukowych fizyki i chemii teoretycznej. Będąc jednym z najtańszych i zarazem najbardziej obfitych źródeł energii na świecie, energia jądrowa kojarzona jest z wytwarzaniem toksycznych odpadów, których przetwarzanie jest nie tylko uciążliwe, ale też bardzo kosztowne. Pełne zrozumienie fizyko-chemicznych właściwości aktywności jest niezbędne w wielu aspektach cyklu paliwowego reaktora jądrowego, zaczynając od wytworzenia nowych rodzajów paliw, a kończąc na identyfikacji i neutralizacji odpadów jądrowych. Dlatego też, zasadniczym celem badań naukowych nad aktywnościami jest określenie stabilności i właściwości związków chemicznych zawierających aktywność. Ze względu na dużą toksyczność, radioaktywność i niestabilność większości tych związków, badania eksperymentalne mające na celu zrozumienie właściwości termodynamicznych, kinetycznych, czy też mechanizmów reakcji chemicznych są znacznie utrudnione. Wyżej wymienione właściwości aktywności mogą być jednak bez większych przeszkód badane przy użyciu metod chemii teoretycznej. Uzyskane w ten sposób informacje mogą być użyte w celu rozpoznania "co znajduje się w zupie odpadów nuklearnych" i "jak to stamtąd wydostać". Wiarygodne obliczenia kwantowo-mechaniczne muszą jednak spełniać dwa kryteria: (i) uwzględnić efekty relatywistyczne na rzetelnym poziomie oraz (ii) wziąć pod uwagę fakt, że ruch elektronów w molekuły jest skorelowany.

Niestety, wymagania zasobów komputerowych rosną w eksponencjalnym tempie wraz ze wzrostem rozmiarów molekuły, efekt znany jako "klątwa wymiaru". W związku z tym, że związki aktywności odgrywają ważną rolę w procesie separacji i przetwarzania odpadów radioaktywnych zawierają dużą liczbę elektronów, wymagane są nowe metody chemii kwantowej, które poradzą sobie z "klątwa wymiaru". Jednym z rozwiązań wydaje się być użycie funkcji dwu-elektronowych, zwanych również geminalami, do modelowania takich układów wieloelektronowych. Standardowe metody oparte na geminalach nie są przystosowane do chemii aktywności i wymagają pewnych modyfikacji: (i) uwzględnienia faktu, że elektrony poruszają się bardzo szybko w ciężkich jądrach atomowych (szczególna teoria względności), (ii) rozszerzenia korelacji elektronowej poza korelację par elektronowych, (iii) przystosowania do obliczeń stanów wzbudzonych, oraz (vi) rozszerzeń do opisu układów z niesparowaną liczbą elektronów (otwarto-powłokowych). Osiągnięcie wyżej wymienionych zadań jest bardzo skomplikowane i wymaga wyprowadzenia nowych modeli matematycznych, napisania nietrywialnego kodu komputerowego, a także solidnego ich testowania, włączając zastosowanie do chemii aktywności. Zaproponowane w ten sposób modele po raz pierwszy pozwolą na bezpośrednie, atomistyczne, a zarazem jakościowe obliczenia komputerowe w celu głębszego zrozumienia segregacji odpadów nuklearnych i dostarczą użytecznych informacji do syntezy nowych związków chemicznych opartych na aktywnościach, które z kolei będą mogły być użyte do ulepszenia procesu ekstrakcji Plutonu i Uranu z odpadów radioaktywnych. Ponadto, te dokładne i nie wymagające dużych zasobów komputerowych modele będą mogły być użyte w innych dziedzinach chemii i fizyki materiałowej, takich jak chemia lantanowców, chemia metali przejściowych, biochemia, czy fizyka półprzewodników.