

Jednym z najistotniejszych zagadnień całej chemii kwantowej jest opis oddziaływań molekuł między sobą. Każda reakcja chemiczna która polega na zrywaniu i formowaniu nowych wiązań rozpoczyna się gdy molekuly są daleko, zbliżają się do siebie powoli i czują wzajemny wpływ na siebie. Okazuje się że opis takich oddziaływań dla dzisiejszej nauki jest bardzo trudny: ponieważ wiąże się to z tym, że mechanika kwantowa dopuszcza to, że molekula jest w stanie „zmieszanym” - „nie wie” dokładnie jaką ma konfigurację elektronową, jak rozmieszczone są niej elektony.

W tym projekcie postaramy się dostarczyć narzędzia które w szczególach dostarczą informacji o oddziaływaniu takich właśnie „skonfundowanych molekuł” które w chemii teoretycznej określamy mianem „molekuly o wieloreferencyjnym charakterze”. Proponujemy rozwinięcie takiej metody badania oddziaływań między molekułami która wyłapuje wszystkie szczegóły energii oddziaływania. Jest to szczególnie ważne dlatego, że energia oddziaływania jest niezwykle mała, wiele rzędów wielkości mniejsza niż całkowita energia układu molekuł. Metoda ta zwana jest rachunkiem zaburzeń o adaptowanej symetrii (w skrócie SAPT) i polega na potraktowaniu oddziaływania między układami jako małego zaburzenia całego układu. Dzięki tej metodzie lepiej rozumiemy jak molekuly oddziałują: możemy dokładnie wskazać jak duża część oddziaływania bierze się z oddziaływań ładunków chmur elektronowych, jak duża z polaryzowania się molekuł pod wpływem ładunków, jak duże jest odpychanie molekuł gdy zbliżają się do siebie itd. Metoda SAPT doskonale się sprawdza dla „normalnych” molekuł, natomiast wciąż nie powstała jej wersja dla molekuł o „skonfundowanej” naturze.

Dzisiejsza chemia kwantowa wypracowała szereg doskonałych metod opisu molekuł począwszy od cząteczki wodoru, kończąc na makromolekułach z blisko setką atomów. Aby metoda zaistniała w świadomości szerszej grupy badaczy potrzebna jest jej dobra implementacja komputerowa. Wymiernym efektem projektu będzie więc program komputerowy (na bazie istniejącego programu do badania oddziaływań SAPT). Wierzmy, że projekt wyznaczy nowe ścieżki badań zbliży nas do nowej kategorii uniwersalnych metod badań oddziaływań między molekułami.