

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Reakcje chemiczne stanowią istotę chemii. W najprostszym ujęciu, reakcja chemiczna to proces związany z rozrywaniem i tworzeniem wiązań chemicznych pomiędzy atomami. Z kwantowochemicznego punktu widzenia to wyjątkowo skomplikowany proces z jednoczesnym uwzględnieniem ruchu jąder i elektronów, który w większości przypadków nie może być szczegółowo badany z wykorzystaniem przybliżenia Borna-Oppenheimera. Ze względu na złożoność sprzężenia pomiędzy ruchem jąder i elektronów w czasie reakcji chemicznej niemal dokładne modelowanie kwantowochemiczne reakcji chemicznych jest cały czas ograniczone do niewielkich układów zawierających co najwyżej trzy, cztery atomy. Tym nie mniej, obliczenia teoretyczne są często niezbędne do interpretacji wyników eksperymentalnych, które w dzisiejszych czasach mogą się cechować bardzo dużą precyzją. Ponadto, wiedza o dokładnej dynamice i mechanizmach reakcji przeciera szlak do kontrolowania tych procesów, teoretycznie nawet w stopniu pozwalającym osiągnąć dużą populację tylko w jednym z wielu możliwych kanałów. Osiągnięcie tego typu kontroli, pozwalającej uzyskać tylko jeden pożądaný produkt, może być uznane za ostateczny cel badań chemii i fizyki nad tymi podstawowymi procesami molekularnymi.

Innym zjawiskiem o kluczowym znaczeniu w chemii, fizyce i biologii są oddziaływania międzymolekularne. Potencjały oddziaływań między molekułami determinują własności gazów nieidealnych, cieczy, roztworów, kryształów molekularnych i innych. Ponadto, opisują tak zwane wkłady niezwiązane i szczególne wkłady od wiązań wodorowych, które są częścią składową pól siłowych używanych w symulacjach wielu procesów o znaczeniu biologicznym. Spośród wielu wkładów do oddziaływań międzymolekularnych, wkłady dyspersyjne odgrywają szczególną rolę. Dalekozasięgowe oddziaływania dyspersyjne odgrywają główną rolę w opisie wielu własności fizycznych, takich jak geometrie równowagowe molekuł, własności transportowe i termofizyczne gazów, widma spektroskopowe o wysokiej rozdzielczości i inne. Mimo, że teoria stojąca za oddziaływaniami dyspersyjnymi jest dobrze poznana, metody obliczeniowe napotykają ogromne problemy m. in. ze względu na trudności w uzyskaniu wyników uzbieżnionych z rozmiarem bazy funkcyjnej.

Dwa problemy naukowe stawiane w niniejszym projekcie mają punkt wspólny - konieczność dokładnego opisu korelacji elektronowej, zarówno statycznej jak i dynamicznej. Naturalnym podejściem do rozwiązania tego problemu jest użycie jawnie skorelowanych metod chemii kwantowej z nową postacią tzw. czynnika korelacyjnego. Zatem głównymi celami projektu jest opracować, zaimplementować, przetestować i zaprezentować pilotażowe aplikacje tzw. zasięgowo rozdzielonego czynnika korelacyjnego w jawnie skorelowanych obliczeniach kwantowochemicznych, i zastosować nowo opracowane metody do przewidywania i interpretacji danych doświadczalnych o wysokiej dokładności.