

Współczesny kwantowochemiczny obraz atomów i molekuł bazuje na zaproponowanym w 1920 roku równaniu Shröedingera, które jednak nie daje się rozwiązać dokładnie dla ogólnych układów zawierających więcej niż dwa elektrony. Ponieważ najważniejsze układy chemiczne zawierają dziesiątki elektronów, opis tych układów jest trudny i wymaga nietrywialnych rozwiązań. Ponieważ każdy elektron wpływa na ruch pozostałych elektronów, chemicy obliczeniowi robiący symulacje komputerowe muszą opisać oddziaływanie Coulomba każdej pary elektronowej w jej chwilowej pozycji. Ten problem znany jest w chemii kwantowej pod nazwą korelacji elektronowej. Od początku istnienia chemii kwantowej zaproponowano wiele przybliżonych metod próbujących opisać to zagadnienie. Do dziś obliczanie korelacji elektronowej jest wyzwaniem dla chemików obliczeniowych - metody o wysokiej dokładności są kosztowne obliczeniowo i mogą być zastosowane jedynie do obliczeń małych układów, podczas gdy tańsze metody są zbyt mało dokładne aby mogły mieć praktyczne zastosowanie.

Oprócz ładunku, elektrony jako cząstki elementarne posiadają wewnętrzną właściwość nazywaną spinem. Spin może oddziaływać z ruchem elektronu poprzez tzw oddziaływanie spin-orbita. Oddziaływanie to ma wpływ na wiele chemicznych właściwości, takich jak rozszczepienie poziomów energetycznych, istnienie przejść zabronionych czy zjawisko fosforescencji. Obecnie istnieje niewiele metod potrafiących opisać oddziaływanie spin-orbita i korelację elektronową równocześnie. Niektóre z tych metod nie spełniają podstawowych warunków fizycznych, inne nie dają się stosować rutynowo. Metoda zaproponowa w tym projekcie będzie pierwszą metodą na świecie wolną od tych trudności.