

## STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE

W ostatnich latach nastąpił znaczący wzrost zainteresowania niewielkimi układami molekularnymi, które są intensywnie badane w dziedzinach nauki znajdujących się na styku chemii i fizyki np. astrochemii, czy fizyce zimnych molekuł. Znaczna część technik eksperymentalnych we wspomnianych dziedzinach wymaga obszernego wsparcia teoretycznego. Często z wyprzedzeniem konieczna jest znajomość wielu przewidywań teoretycznych m. in. informacji geometrycznej, częstości drgań, czy energii względnych. Dodatkowo, obliczenia teoretyczne wykonywane przy pomocy metod chemii kwantowej na potrzeby tego typu badań muszą cechować się dużą precyzją, aby na ich podstawie możliwe było zaplanowanie lub wierna interpretacja eksperymentu.

Niemal wszystkie metody obliczeniowe w chemii teoretycznej oparte są na pojęciu bazy funkcyjnej, w przestrzeni których poszukuje się przybliżonej funkcji falowej. Dlatego też wybór rodzaju i wielkości bazy jest kluczowy dla dokładności rozwiązania problemu. Naturalną bazą funkcyjną dla obliczeń kwantowochemicznych wydaje się baza tzw. orbitali Slatera. Ma ona wiele zalet w stosunku do baz powszechnie stosowanych, między innymi zapewnia poprawne zachowanie się funkcji falowej kiedy elektron znajduje się w otoczeniu jądra atomowego. Niestety, zastosowanie orbitali Slatera w dokładnych obliczeniach kwantowochemicznych było dotychczas mocno ograniczone, głównie ze względu na trudności w obliczaniu niezbędnych całek molekularnych.

Głównym celem niniejszego projektu jest wykonanie pierwszego kroku w kierunku powszechnego zastosowania orbitali Slatera do wspomnianych wyżej obliczeń. Punktem startowym dla proponowanej przez nas metody są techniki stworzone przez nas dla cząsteczek dwuatomowych. Przedstawiamy sposób ich uogólnienia, co pozwala stosować nowe techniki także dla większych układów. Dodatkowo, proponujemy szereg innych usprawnień, które przyczynią się do stworzenia algorytmów o znaczenie większej ogólności i niezawodności. Ostatecznie, doprowadzi to do znacznego wzrostu jakości przewidywań teoretycznych i do ułatwienia współpracy na styku doświadczenia i teorii.