

Jednym z ważnych zadań chemii teoretycznej jest opracowywanie nowych metod obliczeniowych, które umożliwiłyby przewidzenie różnych właściwości cząsteczek chemicznych. Na przykład, znajomość momentu dipolowego pozwala na określenie, jak silnie będą przyciągały się cząsteczki polarne, a wielkość polaryzowalności daje możliwość przewidzenia, jak bardzo gęstość elektronowa danej cząsteczki może zostać zdeformowana pod wpływem pola elektrostatycznego. Mimo że podstawowe równania mechaniki kwantowej znane są od dawna, wykorzystanie ich do obliczeń dla dużych cząsteczek wymaga dokonywania wielu przybliżeń ze względu na ograniczone możliwości dostępnych komputerów. Dlatego też ciągle trwają prace nad takim uproszczeniem problemu obliczeń właściwości, aby można było daną metodę zastosować w praktyce dla cząsteczek o dużych rozmiarach. Jedną z potencjalnych możliwości, rozpatrywanych w literaturze naukowej, jest podzielenie cząsteczki na mniejsze nakładające się fragmenty (tzw. metoda fragmentacji). Dotychczas ta metoda była stosowana głównie do obliczeń energii cząsteczki. Obliczenie takie polegało na znalezieniu wkładów do energii pochodzących od fragmentów oraz dodanie ich do siebie, przy czym zdublowane fragmenty wchodziły do tej sumy z ujemną wagą. W obecnym projekcie proponujemy rozszerzenie tej metody na właściwości cząsteczek i zamierzamy opracować podejście, umożliwiające obliczenie gęstości elektronowej oraz tzw. podatności gęstościowej na podstawie modelu fragmentacji. Wykorzystanie metody fragmentacji spowoduje, że powstające fragmenty będą na tyle małe, żeby dało się do nich wykorzystać istniejące zaawansowane metody chemii kwantowej, przez co uzyskamy dokładne wartości dla pożądanych właściwości molekularnych. Proponowana metoda będzie wykorzystana do przeanalizowania zmian we właściwościach cząsteczkowych, spowodowanych oddziaływaniem z inną cząsteczką, która częściowo otacza pierwszą cząsteczkę. Cząsteczkowe kompleksy tego typu występują bardzo często w chemii i biologii, więc możliwość wykonania obliczeń dla takich układów i przewidywania zmian ich właściwości jest ważna zarówno z teoretycznego, jak i z praktycznego punktu widzenia.