

Postęp w inżynierii materiałowej i projektowaniu leków staje się coraz bardziej zależny od dostępności symulacji numerycznych, które pozwalają na wyznaczenie właściwości atomów, cząsteczek, polimerów i kryształów bez konieczności przeprowadzania kosztownych pomiarów eksperymentalnych. Aby konkurować z badaniami doświadczalnymi pod względem efektywności, takie symulacje, nazywane też modelowaniem molekularnym, muszą charakteryzować się zarówno wystarczającą dokładnością, jak i niskimi kosztami obliczeniowymi. Aczkolwiek chemia kwantowa oferuje wiele takich metod numerycznych, czynniki ograniczające dokładność niektórych z nich są nadal nie do końca rozumiane pomimo prowadzonych przez ponad pół wieku badań.

Jednym z tych czynników jest przypuszczalna obecność nieobsadzonych orbitali naturalnych (UNOs, unoccupied natural orbitals) pochodzących z elektronowych funkcji falowych systemów kulombowskich (tzn. atomów, cząsteczek i jonów). Podejrzewa się, że takie orbitale negatywnie wpływają na dokładność wielu przybliżonych teorii struktury elektronowej, takich jak uogólnione twierdzenie Koopmansa, które pozwala na obliczenie potencjałów jonizacji i powinowactw elektronowych z wysoką dokładnością, oraz teoria funkcjonału macierzy gęstości, która jest jedną z najbardziej obiecujących, nowych metod chemii kwantowej.

W niniejszym wniosku o grant opisane są sposoby rozwiązania przedstawionego wyżej problemu. Wykonanie tych badań zaowocuje możliwością prowadzenia szybszych i znacznie dokładniejszych modelowań molekularnych. Ponieważ przyspieszy to prace nad nowymi lekami i materiałami, skorzystają na tym nie tylko naukowcy, ale i ogół społeczeństwa.