

Streszczenie Popularnonaukowe

Opracowanie nowych metod chemii obliczeniowej odgrywa znaczącą rolę w dzisiejszej nauce. Badania teoretyczne wdrażane są jako kody obliczeniowe, a następnie za pomocą superkomputerów, wydajnie dostarczane są odpowiedzi na stawiane pytania. Takie działania pozwalają na modelowanie związków chemicznych, które są skomplikowane ze względu na ewentualne niestabilności, toksyczność lub radioaktywność. Głównym celem chemii obliczeniowej jest prawidłowy opis efektów korelacji elektronowej, dlatego nadrzędną kwestią jest wypracowanie nowego modelu teoretycznego, który da wiarygodne przybliżenie badanego problemu przy rozsądnych kosztach obliczeniowych. Standardowe metody pochłaniają wiele zasobów obliczeniowych, które zwiększają się wykładniczo wraz z rozmiarem systemu. Stąd możliwość ich stosowania do dużych i skomplikowanych molekuł jest znacznie ograniczona.

W poniższym projekcie, wnioskodawca proponuje opracowanie nowych metod, które będą hybrydą istniejących podejść opartych na geminalach z teorią oddziaływania konfiguracji. Geminalowe metody opierają się na funkcjach dwuelektronowych, które są podstawowym blokiem budulcowym funkcji falowej. Badania numeryczne pokazały, że podejścia te mogą dokładnie modelować część efektów korelacji elektronowej, powszechnie znanych jako silne. Efekty te zostały rozpoznane, na przykład w cząsteczkach z rozciągniętymi wiązaniami, jak również w kompleksach lub klastrach zawierających atomy aktywności. Jedną z nich jest metoda AP1roG (ang. Antisymmetric Product of 1-reference orbital Geminal). Aby uchwycić większość elektronowych efektów korelacyjnych, należy jednak rozszerzyć wspomnianą metodę o oddziaływania słabe pomiędzy elektronami. Wnioskodawca zaproponował nowe metody AP1roG-CI, które mają za zadanie dokładnie uchwycić silne i brakujące słabe efekty korelacji. Planowane metody hybrydowe będą solidnymi i niedrogimi metodami obliczeniowymi. Zostaną w pierwszej kolejności przetestowane dla małych cząsteczek (atomy z grupy głównej). Pozytywne wyniki poprowadzą do realizacji głównego celu, jakim będzie modelowanie chemii pierwiastków ciężkich, zwłaszcza związków zawierających aktywność. Nadrzędną korzyścią proponowanego projektu będzie możliwość wykorzystania opracowanych metod, które zostaną zaprogramowane w bezpłatnym, otwarto-źródłowym oprogramowaniu Piernik.