

Wiarygodne modelowanie struktur elektronowych za pomocą chemii kwantowej odgrywa znaczącą rolę w zrozumieniu i przewidywaniu właściwości fizyko-chemicznych atomów, molekuł i materiałów. Przykładami są teoretycznie wyznaczone struktury geometryczne, modele wiązań, energie kompleksacji, energie reakcji, widma wibracyjne i elektronowe, przesunięcia chemiczne oraz orbitale molekularne. Ogólnie obserwuje się trend w którym to chemia kwantowa pozwala na badanie coraz to większych układów molekularnych i dostarcza coraz dokładniejszych wyników. Tak szybki postęp jest napędzany trzema czynnikami: (i) wzrastającą mocą obliczeniową komputerów, to jest, klastrów obliczeniowych wyposażonych w coraz to większą ilość pamięci operacyjnej oraz bardziej wydajne i zrównoleglone procesory, wspomagane kartami graficznymi, (ii) postępach w rozwoju pakietów obliczeniowych chemii kwantowej, oraz (iii) rozwoju nowatorskich metod chemii kwantowej. Na przestrzeni ostatnich dziesięcioleci, wyodrębniły się dwie główne grupy metod chemii kwantowej. Jedna z nich oparta jest na teorii funkcjonału gęstości (ang. Density Functional Theory (DFT)), czy też jej przybliżonych wariantów i używa gęstości elektronowej jako podstawowego składnika budulcowego. Druga z grupy metod jest znana jako teoria funkcji falowej (ang. Wave Function Theory (WFT)), która zgodnie ze swoją nazwą używa funkcji falowych jako głównych składników. Podczas gdy DFT jest, w ogólności, bardziej wydajne i nadaje się do stosowania dla rozmiarowo większych układów, WFT dostarcza bardziej wiarygodnych wyników. Jednym ze sposobów połączenia zalet obu tych grup metod jest sprzężenie WFT z DFT w ramach tzw. *technik embeddingu*. Niestety, zadanie to jest bardzo trudne gdyż musimy połączyć wydajność i solidność metod typu WFT w taki sposób aby były one jednocześnie obliczeniowo możliwe dla większych układów. Głównym celem zaproponowanego projektu badawczego jest wyprowadzenie i wydajna implementacja nowej rodziny metod typu WFT-in-DFT, która używa różnych modeli uproszczonej metody sprzężonych klastrów z parami wzbudzeń podwójnych jako komponentu WFT. W szczególności, zostało pokazane, że metoda sprzężonych klastrów z parami wzbudzeń podwójnych dostarcza wiarygodnych i dokładnych struktur elektronowych i ich właściwości dla wielu skomplikowanych układów. W porównaniu z tradycyjnymi metodami WFT, takimi jak metoda sprzężonych klastrów, wyżej wymienione metody charakteryzują się mniejszymi kosztami obliczeniowymi i nie zawodzą w sytuacji, gdy efekty korelacyjne są trudne do opisu, jak ma to miejsce w przypadku tradycyjnej metody sprzężonych klastrów. W proponowanym projekcie badawczym, zalety metod typu DFT zostaną połączone z różnymi wariantami metody sprzężonych klastrów z parami wzbudzeń podwójnych, co utoruje drogę do badania wielu trudnych dla obecnej chemii kwantowej problemów, włączając w to wielkorozmiarowe modelowanie oddziaływań międzycząsteczkowych i związków o znaczeniu przemysłowym, takich jak klastry uranylu obecne w odpadach radioaktywnych.