

Metody typu 'embedding' w chemii kwantowej - przesuwać granice modelowania właściwości molekularnych złożonych układów zawierających ciężkie atomy.

Streszczenie popularnonaukowe

Współczesny świat, obecnie bardziej niż kiedykolwiek wcześniej, stawia przed nami wyzwania w obszarze zdrowia, środowiska naturalnego i dobrostanu społeczeństw. Wyzwania te wymagają nowego podejścia, opierającego się na badaniach naukowych nad nowymi funkcjonalnymi materiałami, spersonalizowanymi rozwiązaniami w medycynie czy 'czystymi' rozwiązaniami w przemyśle. Szczególnie ważne są badania podstawowe, których celem jest zrozumienie własności i zachowań złożonych układów molekularnych w różnych warunkach. Istotne dla badań podstawowych i aplikacyjnych są układy molekularne zawierające ciężkie atomy - znajdujące się 'na dole' układu okresowego pierwiastków - które znajdują zastosowanie (na przykład) jako źródła energii, katalizatory, są wykorzystywane w medycynie nuklearnej i w czujnikach na metale ciężkie w żywych tkankach i w atmosferze.

Projektowanie nowych materiałów do tych i wielu innych zastosowań rozpoczyna się od badania zależności między strukturą, funkcją i właściwościami cząsteczek w różnych otoczeniach, np. w roztworach czy na granicach faz, i poddawanych różnym zewnętrznym zaburzeniom. Taką wiedzę dostarczają obliczenia ab-initio, bazujące tylko na prawach fizycznych. Szczególnie przydatne w tym kontekście są obliczenia właściwości molekularnych, które można też zmierzyć w eksperymentalnej spektroskopii, i które łączą informację o tym jak cząsteczki odpowiadają na zaburzenie z ich strukturą elektronową. Niestety obliczenia tych właściwości metodami ab-initio chemii kwantowej są możliwe jedynie dla małych cząsteczek, ze względu na niekorzystne skalowanie tych metod z rozmiarem układu. Źródłem dodatkowych wyzwań obliczeniowych jest obecność ciężkich atomów, które wymagają odpowiedniego opisu tzw. efektów relatywistycznych i efektów korelacji elektronowej, co dodatkowo zwiększa złożoność problemu.

Obiecujące pod tym względem są metody typu 'embedding', które polegają na podziale układu na mniejsze podukłady, które następnie mogą być traktowane osobno przez odpowiednio-dobre metody. Poza możliwością obliczeń na różnych 'poziomach' przy znaczącej redukcji kosztów, metody typu 'embedding' mają też wiele innych zalet. Na przykład pozwalają na modelowanie problemów wychodzących poza jedną skalę czasową czy przestrzenną, pozwalają też na dogłębną analizę układów. Takie podejście jest często stosowane w chemii - zrozumienie właściwości i mechanizmów często odbywa się przez studiowanie wkładów od atomów lub fragmentów do badanej cząsteczki lub układu cząsteczek. Te wszystkie zalety sprawiają, że metody te są coraz bardziej popularne, intensywnie rozwijane i wykorzystywane do wielu różnych aplikacji.

Celem tego projektu jest rozwój metod typu 'embedding' w formalizmie relatywistycznym do opisu właściwości molekularnych różnych rzędów. Istotną częścią projektu jest też wykorzystanie narzędzi analitycznych z pogranicza matematyki stosowanej i analizy danych, i ich adaptacja do chemii kwantowej. Ta część projektu pozwoli na lepsze zrozumienie i zaadresowanie ograniczeń zaproponowanych metod, jak również na lepszą analizę wyników obliczeń. Przykładem metody jaka zostanie tu zastosowana jest topologiczna analiza danych (ang. TDA), która pozwala na zidentyfikowanie, opis i porównanie topologicznych cech gęstości elektronowych (niezaburzonych i zaburzonych) pochodzących z obliczeń na różnych układach i wykorzystujących różne modele.

Projekt ten obejmuje rozwój metod, ich testowanie na dobrze poznanych układach i wykorzystanie do dużych obliczeń typu 'benchmark' na układach z ciężkimi atomami, które charakteryzują się obecnością różnych wiązań niekowalencyjnych między podukładami. Projekt ten wpisuje się w nowy paradygmat w badaniach podstawowych na progu epoki danych poprzez kombinację tworzenia dokładnych modeli, zaawansowanej analizy danych, dużych wieloskalowych obliczeń i możliwości aplikacyjnych do ważnych problemów współczesnego świata.