

Umożliwiając wyznaczanie rozlicznych właściwości układów kulombowskich (tzn. atomów, cząsteczek, polimerów i kryształów) bez konieczności przeprowadzania kosztownych pomiarów eksperymentalnych, symulacje komputerowe odgrywają coraz większą rolę w inżynierii materiałowej i projektowaniu leków. Aby konkurować z badaniami doświadczalnymi pod względem efektywności, takie symulacje muszą charakteryzować się zarówno wystarczającą dokładnością, jak i niskimi kosztami obliczeniowymi. Dostępność odpowiednich metod numerycznych jest niezbędna dla dalszego postępu w tej dziedzinie.

Chemia kwantowa oferuje wiele takich metod. W większości z nich główną rolę odgrywa tak zwana elektronowa funkcja falowa, która zależy w skomplikowany sposób od współrzędnych wszystkich elektronów. Ten złożony opis układów kulombowskich nie jest optymalny pod względem obliczeniowym i interpretacyjnym, co skłania chemików kwantowych do poszukiwania alternatywnych podejść teoretycznych. Wielkością najczęściej występującą w tych podejściach jest gęstość jednoelektronowa, której prosta zależność od trzech współrzędnych kartezjańskich i spinu przyczyniła się do jej dużej popularności w chemii kwantowej.

Ponieważ wiele oddziaływań między atomami i cząsteczkami (np. wiązania kowalencyjne i siły londonowskie) ma inherentnie dwuelektronowy charakter, ich opis wymaga uwzględnienia korelacji elektronowej. Podczas gdy wiązania chemiczne są zwykle opisywane za pomocą wielkości jednoelektronowych (takich jak orbitale i gęstość jednoelektronowa), korelacja elektronowa jest kwantyfikowana wartościami różnorodnych indeksów. Taki odrębny opis oddziaływań międzyatomowych/międzycząsteczkowych i korelacji elektronowej jest sztuczny i nieintuicyjny. Dlatego też celowym jest rozwinięcie nowych formalizmów umożliwiających jednoczesną kwantyfikację tych zjawisk. Naturalnym wyborem dla głównej wielkości fizycznej w takich formalizmach jest gęstość dwuelektronowa. Niestety, jej właściwości nie są znane w takim samym stopniu jak te odnoszące się do gęstości jednoelektronowej.

W niniejszym wniosku o grant opisane są sposoby rozwiązania tego stanu rzeczy. Wprowadzenie nowych pojęć, takich jak densytale i ditopologia, ma na celu umożliwienie dalszego zrozumienia właściwości gęstości dwuelektronowej, której praktyczne obliczenia powinny stać się znacznie dokładniejsze dzięki zaproponowanym nowym technikom numerycznym takim jak podwójna drachmanizacja. Wykonanie tych badań pozwoli na prowadzenie szybszych i bardziej precyzyjnych modelowań molekularnych. Ponieważ przyspieszy to prace nad nowymi lekami i materiałami, skorzystają na tym nie tylko naukowcy, ale i ogół społeczeństwa.