

Abstrakt popularnonaukowy

Modelowanie oddziaływań międzycząsteczkowych jest niezbędne do zrozumienia procesów chemicznych i biologicznych takich jak wiązanie leków do receptorów, zwijanie białek czy adsorpcja cząsteczek na powierzchniach. Jedną z najdokładniejszych i najczęściej stosowanych metod analizy takich oddziaływań jest rachunek zaburzeń o adaptowanej symetrii (SAPT). Metoda ta pozwala nie tylko obliczyć całkowitą energię oddziaływania, ale także rozłożyć ją na wkłady o jasnym znaczeniu fizycznym, co umożliwia zrozumienie natury sił działających między cząsteczkami.

Jednym ze składników energii oddziaływania jest tzw. *energia wymienna* – efekt wynikający z kwantowej natury elektronów. Zgodnie z postulatami mechaniki kwantowej elektrony są nierozróżnialne i nie mogą być jednoznacznie przypisane do jednej z oddziałujących cząsteczek. W miarę zmniejszania odległości między molekułami efekty wymienne stają się coraz bardziej znaczące, a uproszczone modele ich opisu tracą na dokładności. Stosowane dotychczas, wydajne obliczeniowo przybliżenia zakładają, że między oddziałującymi cząsteczkami dochodzi do tunelowania co najwyżej jednej pary elektronów. Choć w ostatnich latach opracowano metody pozwalające uwzględnić efekty tunelowania w sposób ścisły, nadal pomijają one inny ważny aspekt: korelację ruchu elektronów wewnątrz każdej z cząsteczek.

Celem projektu jest stworzenie bezkompromisowej wersji metody SAPT - takiej, która z jednej strony w pełni opisuje efekt tunelowania elektronów między molekułami, a z drugiej uwzględnia rolę korelacji ruchu elektronów wewnątrz każdej z cząsteczek. Umożliwi to zarówno ścisłe zbadanie wzajemnego wpływu efektów tunelowania i korelacji elektronowej, jak również dokładniejsze modelowanie oddziaływań międzycząsteczkowych.