

Celem tego projektu jest opracowanie wydajnego i dokładnego protokołu opartego na metodach kwantowo-mechanicznych do opisanie solwatowanych kompleksów aktynowców. Aktynowce będące ciężkimi atomami (^{88}Ac - ^{103}Lr) stanowią fascynujący obszar badań ze względu na ich zdolności koordynacyjne, właściwości katalityczne i nietypowe schematy wiązań. Związki te zyskały także ogromne znaczenie ze względu na szybko rozwijający się sektor energetyki jądrowej. Dzięki dokładnym obliczeniom kwantowo-mechanicznym możemy otrzymać właściwości elektronowe cząsteczek lub kopleksów aktynowców, co jest niezwykle trudne przy użyciu eksperymentalnych metod ze względu na ich radioaktywność. Jednakże opis solwatowanych związków aktynowców oparty wyłącznie na metodach mechaniki kwantowej nie jest możliwy ze względu na znaczące wymagania obliczeniowe tak dużych układów. W związku z proponowanym projektem opracowanie zostanie nowe, hybrydowe podejście, w których kompleksy aktynowców będą opisywane bardzo dokładnymi metodami kwantowo-mechanicznymi (np. uproszczoną metodą sprzężonych klasterów taką jak pCCD), a środowisko rozpuszczalnika będzie modelowane za pomocą efektywnego potencjału fragmentu (EFP). pCCD była szeroko stosowana dla aktynowców w ostatnich latach dając dla nich bardzo dokładne wyniki w fazie gazowej. Natomiast, EFP jest niedawno opracowanym modelem solwatacyjnym, gdzie cząsteczki rozpuszczalnika są opisane używając znacznie mniej dokładnych ab initio metod. Każda cząsteczka rozpuszczalnika będzie opisana przez modelowy potencjał obliczony z uwzględnieniem oddziaływań elektrostatycznych, polaryzacyjnych, dyspersyjnych i wymiany ze wszystkimi innymi cząsteczkami obecnymi w układzie. W szczególności oddziaływanie polaryzacyjne będzie obliczane w sposób samouzgodniony, co znacznie poprawi obrazowanie efektów solwatochromowych w roztworach kompleksów aktynowców, które do tej pory były badane za pomocą dielektrycznych ciągłych modeli solwatacji. W tym projekcie interfejs pomiędzy pCCD i EFP zostanie wyprowadzony i implementowany w pakiecie oprogramowania PyBEST. Metoda zostanie rozszerzona na stany wzbudzone z uwzględnieniem efektów rozpuszczalnika. Połączenie pCCD i EFP zapewni znacznie dokładniejsze badanie struktury elektronowej, ligacji, i procesów fotochemicznych kompleksów aktynowców (AnO_2^{n+}) w różnych rozpuszczalnikach. W szczególności, opracowana metoda zostanie wykorzystana do badania wodnych roztworów związków aktynowców, które są budulcami wielu ważnych komponentów w jądrowym cyklu paliwowym. Badania te bezpośrednio doprowadzą do efektywnego projektowania zarządzania odpadami jądrowymi i czujników do wykrywania skażenia jądrowego.