

Nowoczesne symulacje kwantowe osiągnęły niezwykle poziom opisu atomów i cząsteczek oraz ich właściwości. Podejścia teoretyczne są szczególnie pomocne, gdy badania eksperymentalne są utrudnione lub spowolnione z powodu podejścia prób i błędów. Wada ta pociąga za sobą duże obciążenie pracą i wyczerpuje wiele czasu i materiałów eksploatacyjnych. W takich przypadkach symulacje obliczeniowe mogą zapewnić bardzo pożądane zrozumienie cząsteczek i ich wzajemnych oddziaływań. Niestety, konwencjonalne kwantowe modele teoretyczne są zbyt drogie dla realistycznych problemów na dużą skalę lub wymagają kontroli użytkownika na poziomie eksperckim. Aby przełamać obecny paradygmat badań obliczeniowych, pożądane są nowe i zgrabne przybliżenia. Jednym z takich innowacyjnych podejść jest modelowanie cząsteczek przy użyciu funkcji par jako elementów składowych bardziej skomplikowanych struktur kwantowych. Obecnie takie metody są jednak niewystarczające do rozwiązywania trudnych problemów w elektronice organicznej, takich jak organiczne ogniwa słoneczne czy organiczne diody elektroluminescencyjne (OLEDy). Niniejszy projekt ma na celu zaradzenie tym wadom poprzez dostarczenie wyuczonych maszynowo receptur, które przyspieszą ich optymalizację i sprawią, że będą one miały zastosowanie w większych, bardziej realistycznych skalach. Proponowane modele zostaną zaimplementowane w PyBEST i (i) poprawią nasze zrozumienie cząsteczek i ich właściwości, (ii) pomogą w rozwoju symulacji typu black-box oraz (iii) przyspieszą odkrywanie nowych materiałów.