Projekt dotyczy rozwoju nowej metodologii opisu i analizy wiązania chemicznego w oparciu o różnicowy molekularny potencjał elektrostatyczny (DMEP), zdefiniowany jak różnica molekularnego potencjału elektrostatycznego (MEP) obliczonego dla molekuły/układu molekularnego oraz sumy MEP dla rozważanych fragmentów (atomowych lub wieloatomowych), analogicznie do szeroko stosowanej różnicowej gęstości elektronowej. W l. 2004-2009 w zespole wnioskującym rozwinięta została metoda opisu wiązania ETS-NOCV, w której różnicowa gęstość elektronowa rozkładana jest na przyczynki orbitalne (NOCV) o prostej interpretacji, odpowiadające składowym wiązania chemicznego (np. sigma / pi / delta czy donacja / donacja zwrotna); metoda ETS-NOCV pozwala określić także także miarę energetyczna poszczególnych przyczynków. W najnowszych publikacjach (Adv. Quantum. Chem. 2023, 87, 375; J.Mol. Model. 2025, 31,6; J.Mol. Model. 2025, 31,33) pokazano, że DMEP wyznaczany dla fragmentów zdefiniowanych jak w metodzie ETS-NOCV prowadzi do wartościowego, komplementarnego opisu, w szczególności w sposób wyraźny obrazując polaryzację fragmentów / przepływ ładunku pomiędzy nimi. Głównym celem projektu jest rozwój metodologii opartej na DMEP, który obejmie: (i) opracowanie oraz implementacje podejścia teoretycznego prowadzącego do rozkładu DMEP na przyczynki NOCV; podejście to pozwoli na analizę zmian MEP związanych z utworzeniem poszczególnych składowych wiązania, a także na dyskusje wpływu danego fragmentu molekularnego na rozkład ładunku i reaktywność układu molekularnego (ii) analiza własności oraz wypracowanie interpretacji różnicowego MEP wyznaczanego dla promolekuły atomowej, do tej pory nie dyskutowanego w literaturze; (iii) rozwój analizy topologicznej DMEP oraz skondensowanych (fragmentowych, atomowych) deskryptorów DMEP, mający na celu który ułatwienie ilościowej interpretacji DMEP oraz ilościowego porównania DMEP w różnych układach molekularnych; (iv) rozwój metody dekompozycji DMEP na przyczynki pochodzące od poszczególnych atomów oraz fragmentów molekularnych. W ramach projektu planowane są szerokie zastosowania rozwijanej metodologii w opisie wiązań chemicznych różnego typu (wiązania kowalencyjne, wiązania donorowo-akceptorowe, oddziaływania niekowalencyjne) w charakterystyce własności donorowo-akceptorowych grup funkcyjnych / ligandów w układach metaloorganicznych, w opisie reaktywności chemicznej, w szczególności – opisie podatności na atak nukleofilowy / wiązanie nukleofila, a także w badaniu efektów podstawnikowych. Planowane jest także zastosowania rozwijanej metodologii, w polaczeniu z metoda ETS-NOCV, w szerokich badaniach nad wpływem oddziaływań wewnątrzcząsteczkowych i międzycząsteczkowych w zasadach Schiffa na relacje pomiędzy ich strukturą a własnościami. Rozwijane podejście będzie także zastosowane w opisie oddziaływań w polimerowych materiałach do zastosowań w membranach dla ogniw paliwowych.