

## POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU (W JĘZYKU POLSKI)

Dokładny numeryczny opis złożonych układów wieloelektronowych stał się ważnym narzędziem wspomagającym badania eksperymentalne chemii i inżynierii materiałowej. Metody obliczeniowe mogą być bezpośrednio wykorzystane do weryfikacji hipotez naukowych, w celu uzyskania wglądu do danych niedostępnych bezpośrednio w pomiarach doświadczalnych, a także dla wyznaczenia pewnych prognoz. W ciągu ponad 50 lat wiele metod obliczeniowych zostało stworzonych w celu zbadania struktury elektronowej, fizycznych i chemicznych właściwości najprostszej materii (atomów, cząsteczek i ciał stałych). Pośród tych metod, teoria funkcjonałów gęstości (DFT) posiada najlepszy stosunek dokładność/ koszt numeryczny, dlatego też zyskała tak dużą popularność. W rzeczywistości, obliczenia DFT mocno przyczyniły się do nowej rewolucji w dziedzinie nauki i technologii, prowokując tym samym nowe badania i wpływając na postęp nano-/bio-nauki. Formalnie DFT jest teorią ścisłą, jednak w praktyce końcowa jakość wyników silnie zależy od stosowanych aproksymacji funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych (XC) oraz niektórych sformułowanych teorii, funkcjonałów energii kinetycznej (KE). W przypadku tych pierwszych zostało zaproponowanych wiele przydatnych przybliżeń. Z drugiej jednak strony, dla funkcjonałów i potencjałów KE, pomimo ciągłego wysiłku badawczego, wciąż brak jest dokładnych i wydajnych aproksymacji. Z tego też powodu, najbardziej popularna realizacja metody DFT, metoda Kohn-Sham'a, unika bezpośredniego wykorzystania funkcjonałów KE poprzez wprowadzenie pomocniczych jedno-cząstkowych orbitali. Niemniej jednak funkcjonał KE pozostaje nadal kluczową wielkością w metodzie DFT, ponieważ jego badanie i zrozumienie ma istotne konsekwencje zarówno na poziomie koncepcyjnym jak i praktycznym. W rzeczywistości, funkcjonał KE jest jednym z najważniejszych składowych energii całkowitej, dlatego tak ważny jest postęp w tej dziedzinie. Jest to szczególnie istotne, z uwagi na ostatnio wzmożone zainteresowanie rozwojem metod, w których wykorzystywany jest zależny explicite od gęstości funkcjonał i potencjał KE, na przykład „orbital-free” DFT, czy metod typu „embedded” takich jak „subsystem” DFT.

Głównym celem projektu jest opracowanie nowych i dokładnych funkcjonałów KE zależnych od gęstości oraz ich implementacja i zastosowanie w ważnych, rzeczywistych nano- i bio-układach. W tym celu wykorzystane zostaną narzędzia i metody, do tej pory stosowane w tworzeniu funkcjonałów i potencjałów XC. W realizacji tych zadań planujemy zastosować metodę optymalnego potencjału efektywnego (the optimized effective potential method - OEP) w celu uzyskania dokładnych, przestrzennych reprezentacji potencjałów KE, dla różnych atomów i cząsteczek. Następnie potencjały te będą zmapowane na przestrzeń zdefiniowaną przez kilka (semi)lokalnych deskryptorów gęstości (np. energię kinetyczną Thomasa-Fermi'ego, zredukowany gradient oraz laplasjan gęstości) w celu otrzymania dokładnych, semi-lokalnych zależnych od gęstości przybliżeń potencjałów KE. W celu rekonstrukcji funkcjonału KE wykorzystana zostanie technika całek po trajektoriach stosowana do tej pory w kontekście funkcjonałów XC. Dodatkowo zbadamy także nie-addytywne potencjały i funkcjonały KE używane w metodach typu „subsystem” DFT, za pomocą tzw. warunków gęstości, wcześniej stosowanych w ramach *ab initio* DFT.

Wyniki projektu (nowe, zależne od gęstości funkcjonały i potencjały KE, narzędzia i metody badawcze) z pewnością znajdą praktyczne zastosowanie w teoretycznej i obliczeniowej chemii i fizyce. Ponadto, projekt przyczyni się do pogłębienia aktualnej wiedzy w tej dziedzinie, znacząco podnosząc tym samym zdolność aplikacyjną metod (tj. metod typu „subsystem” DFT). Ustanowi to również nowy standard w dziedzinie teoretycznego rozwoju metod oraz zapewni silne i praktyczne narzędzia dla wielu przyszłych zastosowań w dziedzinach tj. chemia obliczeniowa czy inżynieria materiałowa. Dodatkowo, projekt ten pozwoli na głębsze zrozumienie metod, używanych do opisu własności układów wieloelektronowych.