

Postęp w inżynierii materiałowej i projektowaniu leków staje się coraz bardziej zależny od dostępności symulacji numerycznych, które pozwalają na znalezienie właściwości atomów, cząsteczek, polimerów i kryształów bez konieczności przeprowadzania kosztownych pomiarów eksperymentalnych. Aby konkurować z badaniami doświadczalnymi pod względem efektywności, takie symulacje, nazywane też modelowaniem molekularnym, muszą charakteryzować się zarówno wystarczającą dokładnością, jak i niskimi kosztami obliczeniowymi. Chociaż chemia kwantowa oferuje wiele takich metod numerycznych, są one często zbyt kosztowne, aby mogły być stosowane w obliczeniach dla dużych układów spotykanych w praktyce.

Jedną z rodzin metod chemii kwantowej jest teoria funkcjonałów. Jej najczęściej używana wersja, czyli teoria funkcjonału gęstości (DFT), pozwala na przeprowadzanie stosunkowo szybkich obliczeń, które jednak często nie dają wyników o wystarczającej dokładności. Dlatego ostatnio daje się zauważyć znaczne zainteresowanie formalizmami wykorzystującymi alternatywne funkcjonały. Wśród nich najbardziej obiecująca wydaje się być DMFT, tzn. teoria funkcjonału 1-macierzy (nazywanej też jednoelektronową zredukowaną macierzą gęstości lub po prostu macierzą gęstości).

W niniejszym wniosku o grant opisane są sposoby zwiększenia dokładności metody DMFT i rozszerzenia zakresu jej stosowalności. W tym celu proponowane jest przeprowadzenie szerokiego spektrum badań obejmujących zarówno metody czysto matematyczne, jak i testowanie numeryczne. Wykonanie tych badań zaowocuje możliwością prowadzenia szybszych i znacznie dokładniejszych modelowań molekularnych. Ponieważ przyspieszy to prace nad nowymi lekami i materiałami, skorzystają na tym nie tylko naukowcy, ale i ogół społeczeństwa.