

## Od metody sprzężonych klasterów w kierunku semi-lokalnego funkcjonału korelacyjnego Kohna-Shama

Większość badań prowadzonych w ramach projektu koncentrować się będzie na efektywnym opisie korelacji elektronowej w układach wieloelektronowych w ramach metod opartych na funkcji falowej (ang. Wave Function Theory - WFT) jak i na gęstości elektronowej (ang. Density Functional Theory - DFT) w implementacji Kohna-Shama (KS).

Metody opracowane w ramach KS-DFT są obecnie najbardziej popularnymi i efektywnymi metodami stosowanymi w obliczeniowej chemii kwantowej, chemii teoretycznej, fizyce ciała stałego, czy nanotechnologii. Implementacje tych metod znalazły się już w zdecydowanej większości pakietów programów przeznaczonych do obliczeń kwantowo-chemicznych i wykorzystywane są w wielu obliczeniach prowadzonych dla układów atomowych, molekularnych, krystalicznych a także dużych układów biologicznych i nanostruktur. Podstawową zaletą metod typu DFT, jest znacznie niższy koszt obliczeniowy, w porównaniu z metodami typu *ab initio* WFT, pozwalający na obliczenia dla znacznie większych układów. Dokładność i efektywność metod typu DFT bezpośrednio zależy od przybliżeń i jakości funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych używanych w tych metodach. Niestety większość znanych, popularnych i powszechnie stosowanych funkcjonałów korelacyjnych i wymiennych daje zadowalające wyniki tylko w pewnych obszarach zastosowań, a poprawność wyników otrzymanych dla innych (zbliżonych) zagadnień jest często nieprzewidywalna. Dlatego też poszukiwanie poprawnych, bardziej dokładnych, opartych na ugruntowanych podstawach teoretycznych i relatywnie prostych funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych stało się priorytetowym zadaniem dla chemików kwantowych i fizyków wykorzystujących metody DFT.

Jednym z możliwych rozwiązań powyższych problemów jest wykorzystanie zależnych od orbitali funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych w metodach Kohn-Sham DFT. To prowadzi bezpośrednio do metody potencjału efektywnego (ang. Optimized Effective Potential – OEP), która razem z KS DFT definiuje *ab initio* DFT. Kombinacja wydajności metod DFT oraz dokładności i możliwości systematycznego poprawiania metod typu WFT daje nadzieję i gwarancję na przeniesienie chemii obliczeniowej na nowy poziom pozwalający na dokładny opis własności elektronowych realistycznych układów. Niestety możliwości *ab initio* DFT są ciągle ograniczone przez wiele praktycznych i technicznych problemów, blokujących szerokie stosowanie tych metod w chemii obliczeniowej. Jednym z głównych problemów jest koszt obliczeniowy tych metod, który jest nawet o 3 rzędy wyższy niż koszt standardowych, zależnych od gęstości metod KS-DFT.

Zakładamy, że w naszym projekcie rozwiążemy problem zbyt wysokiego kosztu numerycznego metod typu *ab initio* DFT poprzez opracowanie nowe klasy zależnych od gęstości funkcjonałów semi-lokalnych, bazujących i kompatybilnych z zależnymi od orbitali funkcjonałami wymiennymi typu OEPx/KLI/LHF. Pozwoli to na stosowanie powyższych metod do nowej znacznie szerszej klasy problemów w chemii obliczeniowej.

Wszystkie rozwiązania zostaną zaimplementowane w programach do obliczeń kwantowych-chemicznych np. ACES2 a także utworzona zostanie biblioteka libxc. Oczywiście, na etapach pośrednich a w szczególności na etapie końcowym przeprowadzona zostanie walidacja nowo opracowanych metod poprzez wykonanie szerokiej klasy testów dla standardowych benchmarków kwantowo-chemicznych. Projekt pozwoli to także na poszukiwanie nowych, bardziej zaawansowanych metod opisujących efekty korelacyjne i pozwalających na definiowanie nowych funkcjonałów zarówno w *ab initio* DFT jak i standardowym KS-DFT.