

## **Projekt 6.4. Teoria funkcjonału fazy-amplitudy - implementacja i rozwój**

**Promotor:** dr hab. Paweł Strąk

**Instytut:** Instytut Wysokich Ciśnień PAN

**Jednostka organizacyjna:** NL-3

**WWW:** [www.unipress.waw.pl](http://www.unipress.waw.pl)

### **Opis:**

Teoria funkcjonału amplitudy-fazy oparta jest na równaniach mechaniki kwantowej i pozwoli rozwiązywać problemy układów wielocząstkowych przy mniejszym wysiłku obliczeniowym niż typowa teoria funkcjonału gęstości elektronowej w przybliżeniu gradientu funkcjonału GGA DFT. Mniejsza złożoność obliczeniowa metody pozwoli na symulację większych systemów, tj. np. stopni atomowych kryształów lub większej powierzchni urządzeń elektronicznych. Zmniejszenie złożoności obliczeniowej wynika bezpośrednio z charakteru nowych równań, w których funkcje bazowe są używane do zapisania rozwiązań dla fazy funkcji falowej i jej amplitudy. Funkcje bazowe mogą być mniejsze, ponieważ rozwiązania równań fazy-amplitudy są znacznie mniej „oscylujące” niż rozwiązania funkcji falowej jednoelektronowej w typowej teorii funkcjonału gęstości elektronowej DFT. Projekt najpierw zakłada implementację równań teorii. Po udanym wdrożeniu następnym punktem będzie sprawdzenie, czy metoda daje dobre wyniki, tzn. porównamy wyniki symulacji przy użyciu metody PAFT i wyniki uzyskane przy użyciu DFT zaimplementowanej w SIESTA i VASP dla małych układów molekularnych. Po pomyślnym przetestowaniu metody przystąpimy do symulacji i uzyskania właściwości większych układów, tj. krystalicznych stopni atomowych lub dużego obszaru aktywnego urządzeń elektronicznych. W wyniku realizacji projektu uzyskana zostanie metoda lepsza pod względem obliczeniowym niż DFT.

### **Cel:**

Celem naukowym projektu „Teoria funkcjonału amplitudy-fazy - implementacja i rozwój” PAFT będzie skonstruowanie równań metody, implementacja ich w programie komputerowym i sprawdzanie właściwości uzyskanych przy jej pomocy dla prostych układów molekularnych, a także przewidywanie właściwości urządzeń optoelektronicznych takich jak elektroluminescencyjne diody LED, diody laserowe LD i detektory promieniowania elektromagnetycznego.

### **Wymagania:**

- symulacje DFT, doświadczenie w analizie danych
- licencjat lub magister lub odpowiednie doświadczenie zawodowe
- umiejętności pisania i mówienia w języku angielskim
- Doświadczenie w programowaniu w C / C ++ w środowisku Linux
- Znajomość języka skryptowego, jednego z Python, Perl, bash, cs