



Latvijas Zinātnes padome

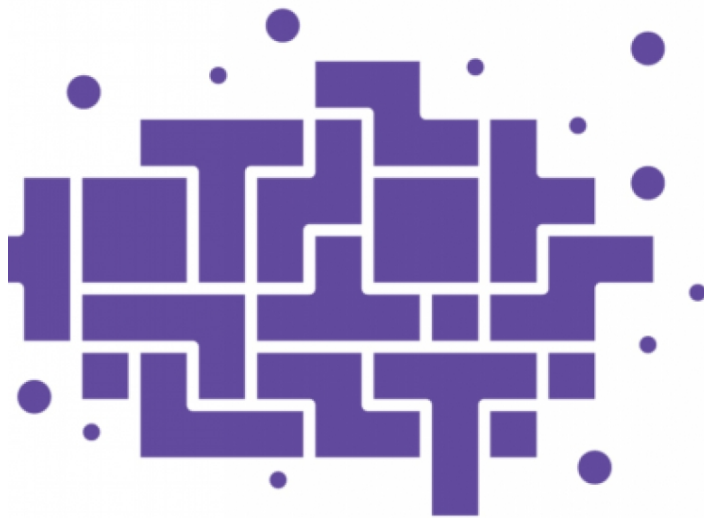
Skaitliski precīza Foka apmaiņa (PREFEX)

Statuss: Noslēdzies

Publicēts: 09.05.2023.

Dabaszinātnes

Fundamentālo un lietišķo pētījumu projekti
(FLPP)



FLPP

FUNDAMENTĀLO UN LIETIŠĀO PĒTĪJUMU PROJEKTI

Skaitliski precīza Foka apmaiņa (PREFEX)

Sākums: 12/2020 Noslēgums: 12/2021

Projekta numurs

Izp-2020/2-0251

Finansējums

100 389 EUR

Projekta vadītājs

Andris Guļāns

Projektu īsteno

Latvijas Universitāte

Zinātnes nozare

Kopsavilkums

Elektronu struktūras aprēķiniem, izmantojot blīvuma funkcionāla teoriju (BFT), ir milzīga ietekme uz mūsdienu materiālzinātne. Pirmo principu metožu pareģošanas spējas aizvien pieaug, un tas ne tikai palīdz uzlabot mūsu izpratni par fizikāliem un ķīmiskiem procesiem, bet arī paver iespējas atklāt jaunus materiālus. Būtisks iemesls šīm pieaugošajām iespējām ir jauni apmaiņas un korelācijas funkcionāļi, piemēram, hibrīdi, kuri apvieno puslokālu BFT un Hartri-Foka apmaiņu. Taču mūsdienu elektronu struktūras simulāciju programmatūra izmanto tuvinājumus, tādus kā pseidopotenciāli, līdz ar to rodas šaubas par mūsdienu rīku skaitlisko precizitāti un to radīto rezultātu reproducējamību. Turklāt dotajā brīdī nav tādu pirmo principu etalondatu un pieeju, kuras varētu efektīvi un droši izmantot šādu etolandatu radīšanai. PREFEX sniegs ieguldījumu aprakstītās problēmas risināšanā, (i) izveidojot un demonstrējot augstas precizitātes un augstas veiktspējas rīku aprēķiniem ar hibrīdiem funkcionāļiem pievienoto plakano viļņu metodes ietvaros, (ii) izveidojot etalondatu bibliotēku, kuru varēs izmantot citu elektronu struktūras kodu precizitātes novērtēšanai.

Projektu konkurss:

Fundamentālo un lietišķo pētījumu 2020. gada zinātnieku individuālo projektu konkurss

<https://www.lzp.gov.lv/lv/projekts/skaitliski-preciza-foka-apmaina-prefex>