

**Projekt NCN Sonata-Bis 9 nr 2019/34/E/ST1/00390**  
*Matematyka obliczeniowa w mechanice kwantowej*

- Kierownik projektu: dr hab. Karolina Kropielnicka
- Okres realizacji: 04.IV.2020-03.IV.2025
- Kwota dofinansowania: 1 575 000,00 PLN

Mechanika kwantowa jest niewątpliwie jednym z największych osiągnięć ludzkiego umysłu, fundamentalnym przełomem w naszym rozumieniu fizyki teoretycznej o szerokim wpływie w nauce i inżynierii: od rewolucji w biochemii i biotechnologii aż po tranzystory, mikroprocesory, komputery, odtwarzacze CD i DVD, telefony komórkowe. . .

Proponowany projekt koncentruje się na dwóch głównych nurtach

### 1. Dyspersyjne równania mechaniki kwantowej

Równania dyspersyjne zdominowały mechanikę kwantową od pionierskiej pracy Erwina Schrodingera, ale ich praktyczne obliczenia stanowią trwałe wyzwanie, nadwyrężają nawet największe zasoby komputerowe i doprowadziły do wielu nagród Nobla w chemii (Walter Kohn, John Pople, Arieh Warschel,...) Problem z równaniami różniczkowymi cząstkowymi w mechanice kwantowej polega na tym, że nie można ich rozwiązać analitycznie.

### 2. Zastosowania w fizyce kwantowej i chemii

Chcemy włączyć zaawansowane narzędzia matematyczne nie tylko do opracowywania i analizy metod numerycznych dla problemów dyspersyjnych, ale także do ich zastosowań w mechanice kwantowej: do chemii fizycznej, teorii struktury elektronicznej, mechaniki ciała stałego i kontroli kwantowej. Teoria sterowania optymalnego, na przykład, jest bardzo pomocnym narzędziem w projektowaniu laserów, które z kolei mają ogromne znaczenie w optyce kwantowej.

Problemy numeryczne w mechanice kwantowej są nie tylko trudne, ale także konieczne; to jest powód, dla którego rozwój tej części nauki jest tak żywy i przyciąga tak wielu międzynarodowych naukowców w fizyce, chemii i matematyce. Wyniki uzyskane w ramach tego projektu z pewnością ustanowią nowy stan wiedzy w dziedzinie obliczeń kwantowych.