

Implementacja i zastosowanie metody Hylleraasa-CI w dokładnych obliczeniach atomów i molekuł dwuatomowych – opis popularnonaukowy.

Badania nad atomami oraz molekułami dwuatomowymi mają bardzo długą historię, w przypadku molekuł dwuatomowych sięgającą początków XIX wieku. Najbardziej rozpowszechnione na ziemi pierwiastki, takie jak azot, tlen czy wodór występują właśnie w postaci cząsteczek dwuatomowych. Pomimo wielu lat badań, nadal kryją one w sobie wiele tajemnic. Dzięki odkryciu oraz rozwojowi laserów możliwe jest badanie ich z niezwykłą wręcz dokładnością. Najnowszy przełom w tej dziedzinie związany jest z chłodzeniem atomów oraz cząsteczek do nieprawdopodobnie niskich temperatur. Okazało się, że w temperaturach bliskich zeru bezwzględnemu – 0 K (-273.15°C) – atomy i cząsteczki zachowują się zupełnie inaczej niż w wysokich temperaturach. Badanie ich w takich warunkach temperaturach wymaga jednak ich schłodzenia. Aby otrzymać ultrazimne cząsteczki trzeba bardzo dokładnie znać ich strukturę, to znaczy wiedzieć w jaki sposób są zbudowane. Pomimo, że pomiary z użyciem laserów pozwalają bardzo dokładnie poznać energie przejść pomiędzy różnymi stanami cząsteczek, zrozumienie budowy cząsteczki na podstawie interpretacji tych przejść jest trudnym zadaniem.

Pomoc w tym wyzwaniu może dokładny model teoretyczny. Równanie opisujące dokładnie zjawiska chemiczne, zwane równaniem Schrodingera, znane jest już od 1926 roku. Niestety, jego rozwiązanie jest bardzo skomplikowane i we wszystkich przypadkach poza kilkoma najprostszymi musimy się uciec do używania przybliżeń i korzystania z komputerów lub nawet superkomputerów. Nawet wtedy, w wielu wypadkach rozwiązania nie są na tyle dokładne, żeby rywalizować z dokładnością pomiarów doświadczalnych. Problemem w rozwiązaniu tego równania dla atomów i molekuł jest trudność w opisie tak zwanej korelacji elektronowej. Korelacja elektronowa jest to efekt tego, że ruch każdego z elektronów w atomie czy cząsteczce jest powiązany z ruchem pozostałych elektronów. Powoduje to, że do opis stają się bardzo skomplikowane, ponieważ gdy chcemy policzyć zachowanie pierwszego z elektronów musimy znać dokładnie zachowanie elektronu drugiego, a żeby znać dokładnie zachowanie drugiego potrzebujemy wiedzieć jak zachowuje się elektron pierwszy, którego zachowanie chcemy przecież policzyć.

Chemicy kwantowi mierzą się z tym problemem już od niemal stulecia. Udało się znaleźć sposoby jego bardzo dokładnego rozwiązania (z dokładnością porównywalną lub przewyższającą dokładność doświadczalną), jednak ograniczają się one do atomów i cząsteczek z dwoma, trzema, lub czterema elektronami. Sposoby te nazywa się metodami jawnie skorelowanymi, ponieważ uwzględniają korelację elektronową w sposób bezpośredni, poprzez włączenie odległości między elektronami do funkcji falowej. Istnieją również metody, które pozwalają opisać setki lub nawet większe ilości elektronów, jednak ich dokładność jest wielokrotnie niższa, niż dokładność pomiarów przy pomocy laserów. Opierają się one na tak zwanym przybliżeniu orbitalnym, gdzie każdy z elektronów traktowany jest niezależnie, dlatego też nazywa się metodami opartymi na przybliżeniu jednoelektronowym.

W projekcie tym będziemy rozwijać oraz implementować metodę hybrydową, łączącą zalety metod jawnie skorelowanych oraz opartych na przybliżeniu jednoelektronowym. Podejście to nazywa się podejściem Hylleraasa-Oddziaływania Konfiguracji, ponieważ łączy ono metodę jawnie skorelowaną wymyśloną przez Hylleraasa, z opartą na orbitalach metodą Oddziaływania Konfiguracji. Połączenie to ma na celu zachować dokładność metod jawnie skorelowanych, pozwalając jednocześnie na obliczenia z większą liczbą elektronów. Ze względu na to, że dla atomów oraz cząsteczek dwuatomowych istnieją najbardziej dokładne pomiary doświadczalne, właśnie te dwa typy układów będziemy badać przy pomocy napisanego przez nas programu komputerowego.

Ponieważ wiadomo, że metody tego typu są tym bardziej wymagające obliczeniowo, im więcej elektronów branych jest pod uwagę, konieczne będzie zaimplementowanie jej w sposób równoległy. Oznacza to, że program będzie napisany tak, aby obliczenia mogły wykonywać setki procesorów jednocześnie. Ze względu na powyższe wymagania dokładne obliczenia zostaną przeprowadzone w polskich centrach obliczeniowych, w których znajdują się jedne z najszybszych superkomputerów w tej części Europy. Dzięki nim możliwe będzie wielokrotne skrócenie czasu obliczeń. Na przykład obliczenia, które trwałyby kilka lat na zwykłym laptopie zostaną ukończone w czasie kilku dni na superkomputerze. Umożliwi to zbadanie układów atomowych i molekularnych z dokładnością, której otrzymanie nie było by możliwe ze względu na zbyt długi czas trwania obliczeń.