

Dokładne i wydajne metody obliczeniowe oparte na formalizmie grupy renormalizacyjnej macierzy gęstości DMRG dla dużych cząsteczek

Obliczenia kwantowo-chemiczne odgrywają obecnie pełnoprawną rolę w badaniach chemicznych. Chemia obliczeniowa pomaga analizować i wyjaśniać obserwacje eksperymentalne, wspomaga projektowanie nowych materiałów i pozwala przewidywać właściwości nowych cząsteczek. Pomimo ogromnego postępu w rozwoju metod obliczeniowych, istnieje wciąż kategoria problemów chemicznych, czekających wiarygodny opis teoretyczny. Od dawna znanym problemem i wyzwaniem dla istniejących metod są tak zwane układy chemiczne z quasidegeneracją, znane również jako układy z silnie skorelowanymi elektronami.

Wiele ważnych problemów chemicznych należy do tej kategorii, np. rozrywanie/tworzenie wiązań homolitycznych, układy otwartopowłokowe i wzbudzone stany elektronowe, kompleksy metali przejściowych i stany przejściowe reakcji chemicznych. Mimo imponującego postępu w rozwoju metod teorii funkcjonału gęstości (DFT), nie są one wiarygodne, gdy stosuje się je do problemów chemicznych z quasidegeneracją. Metoda DMRG (density matrix renormalization group), z drugiej strony, jest dedykowana do efektywnego uwzględniania quasidegeneracji w cząsteczkach. Pomija ona jednak ważny element korelacji elektronowej, tzw. korelację dynamiczną. W konsekwencji, zastosowanie DMRG do układów chemicznych jest nadal ograniczone.

Celem proponowanego projektu jest opracowanie i wdrożenie nowych narzędzi obliczeniowych opartych na DMRG, które są odpowiednie do rozszerzania silnie skorelowanych cząsteczek i ich zastosowanie do trudnych problemów, takich jak struktura elektronowa biologicznie istotnych kompleksów metali przejściowych. Aby osiągnąć ten cel, planujemy opracowanie poprawki na dynamiczną korelację elektronową dopasowaną do DMRG oraz metod kwantowego embeddingu, które znacząco rozszerzą możliwości zastosowania DMRG do dużych układów. Drugim celem projektu są szybkie algorytmy obliczeniowe dla nowych metod i ich wydajna równoległa implementacja w pakiecie obliczeniowym chemii kwantowej.

Nowe narzędzia obliczeniowe pozwolą na przełamanie ograniczeń w dokładności i rozmiarowych obecnie dostępnych metod opartych na DMRG.