

 Zawartość zarchiwizowana w dniu 2024-06-18

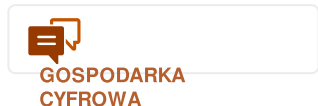


New Propagation Techniques for the simulation of dynamical processes in extended systems

Wyniki w skrócie

Nowe metody i algorytmy atomistycznych symulacji komputerowych

Dzięki badaniom finansowanym przez UE obliczenia kwantowo-mechaniczne widm optycznych stały się szybsze i bardziej wydajne.



© sakkmeisterke, Shutterstock

W ciągu ostatnich dwóch dekad metody odpowiedzi liniowej oparte na funkcjonale gęstości stały się faktycznym standardem obliczeń właściwości optycznych cząsteczek o małej i średniej wielkości. W centrum tych metod znajduje się równanie wartości własnych w przestrzeni rozwiązania z przeskokami na jednym orbitalu.

Problemem tego rozwiązania jest fakt, iż jego szybko rosnąca wartość sprawia, że takie

obliczenia są kosztowne, jeśli nie nieosiągalne, dla większych cząsteczek. Szczególnie dotyczy to zależnego od czasu funkcjonu gęstości w modelu ciasnego wiązania (TD-DFTB), gdzie ocena elementów macierzy jest niedroga. W przypadku stosunkowo dużych systemów, które mogą być badane, rozwiązanie równania wartości własnych określa koszt obliczeń.

Aby rozwiązać ten problem, finansowany przez UE projekt PROPAGATE wykorzystał oparte na sile oscylatora obcinanie przestrzeni przeskoków na jednym orbitalu, aby zmniejszyć moc wymaganą do obliczeń widm absorpcji w oparciu o funkcjonał TD-DFTB.

Nowe metody badań

Badacze uczestniczący w projekcie PROPAGATE postawili sobie za cel opracowanie zaawansowanych metod dla pierwszych zasad atomistycznych symulacji komputerowych i zastosowanie ich do takich ważnych dla środowiska tematów, jak nanotechnologia i biofizyka. „Chcieliśmy pokazać, że nawet znaczne obciążenie nie niszczy głównych cech widma absorpcyjnego, w ten sposób naturalnie unikając niepotrzebnych obliczeń wzbudzeń z małymi mocami oscylatora” — wyjaśnia koordynator projektu Thomas Heine. „Naszą tezę było to, że zmniejszony koszt obliczeniowy funkcjonału TD-DFTB dobranej na bazie intensywności wraz z łatwością użycia w porównaniu z innymi metodami obniża barierę wykonywania obliczeń własności optycznych dużych cząsteczek i potencjalnie umożliwi wykonanie takich obliczeń w szerszej gamie zastosowań.”

W trakcie badań prowadzonych w ramach projektu opracowano metody pozwalające na badanie dynamiki molekularnej ziemi z pierwszych zasad, stanów termo- i fotowzbudzonych, wraz z rozbudowanymi symulacjami z wykorzystaniem metod hybrydowych łączących mechanikę kwantową i klasyczną. Sposoby te zostały następnie zastosowane w dwóch aspektach nanotechnologii i biofizyki — do badania powstawania wysokiej temperatury oraz rozpuszczalności mieszanych (heteroatomowych) cząsteczek tlenków metali.

„Technologia komputerowa stała się jeszcze bardziej skomplikowana — zarówno w zakresie oprogramowania, jak i sprzętu — a użytkownicy końcowi oczekują wygodnego graficznego interfejsu użytkownika (GUI)” — wyjaśnia Heine. Aby nadążyć za nowoczesnymi standardami oprogramowania, projekt użył kombinacji nowoczesnego języka skryptowego (Python) z tradycyjnym językiem Fortran. Jeśli chodzi o rozwój sprzętu, gdzie moc pojedynczych procesorów tylko nieznacznie wzrastała w ostatnich latach, trzeba było zastosować kompletny paradygmat równoległej implementacji. „W rezultacie oprogramowanie może być zarówno używane przez GUI, jak i uruchamiane z wiersza poleceń, co pozwala na wykorzystywanie skryptów i automatyczne przetwarzanie danych wyjściowych” — dodaje Heine.

Najwydajniejsze obliczenia

Końcowym wynikiem tych badań jest pomyślny rozwój nowych metod i algorytmów atomistycznych symulacji komputerowych dla procesów dynamicznych w systemach

w skali nano na poziomie mechaniki kwantowej. Te metody i algorytmy zostały zaimplementowane w ADF Modeling Suite — nowoczesnym pakiecie oprogramowania naukowego gotowego do komercjalizacji. „Dzięki projektowi PROPAGATE obliczenia kwantowo-mechaniczne widm optycznych są wydajniejsze, szybsze i mogą być badane” — mówi Heine.

W ramach projektu opracowano również oprogramowanie do komputerowego wspomagania projektowania (CAD) takich struktur molekularnych, jak struktury metaloorganiczne (MOF) i kowalencyjne organiczne (COF). Obie te struktury to nowe, obiecujące materiały zbudowane z pojedynczych cząsteczek.

Słowa kluczowe

PROPAGATE

obliczenia kwantowo-mechaniczne

równanie wartości własnych

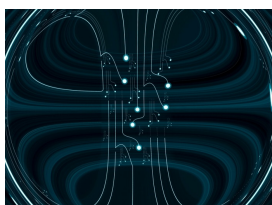
zależny od czasu funkcjonal gęstości w modelu ciasnego wiązania (TD-DFTB)

atomistyczne symulacje komputerowe

nanotechnologia

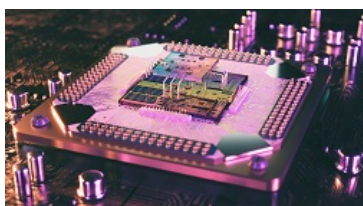
biofizyka

Znajdź inne artykuły w tej samej dziedzinie zastosowania



Źródła światła na mikroukładach i „kudity”: nowe oblicze komputerów kwantowych?

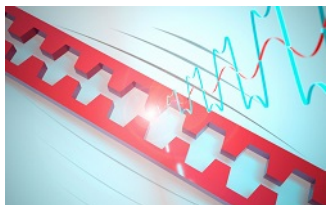
28 Czerwca 2019



Sieci kwantowe kluczem do przyszłości komunikacji

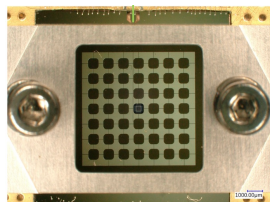
23 Marca 2018





Nanoskalowe urządzenie łączące światło i ruch mechaniczny może znaleźć zastosowanie w komputerach kwantowych

20 Sierpnia 2018



Urządzenie pomostowe łączy obwody kwantowe i urządzenia mechaniczne

17 Grudnia 2021



Informacje na temat projektu

PROPAGATE

Identyfikator umowy o grant: 316897

Projekt został zamknięty

Data rozpoczęcia

1 Listopada 2012

Data zakończenia

31 Października 2016

Finansowanie w ramach

Specific programme "People" implementing the Seventh Framework Programme of the European Community for research, technological development and demonstration activities (2007 to 2013)

Koszt całkowity

€ 693 388,41

Wkład UE

€ 693 388,41

Koordynowany przez

UNIVERSITAET LEIPZIG



Germany

Ten projekt został przedstawiony w...

MAGAZYN RESEARCH*EU



The grand plan for carbon capture

Ostatnia aktualizacja: 18 Kwietnia 2017

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/197374-new-methods-and-algorithms-for-atomistic-computer-simulations/pl>

European Union, 2025