

 Contenuto archiviato il 2024-06-18



Coupled Cluster Calculations on Large Molecular Systems

Risultati in breve

Simulazioni computerizzate più accurate per i grandi sistemi molecolari

I traguardi raggiunti dal progetto LCC, finanziato dall'UE, sanciranno l'inizio di una nuova era di calcoli quantistici di precisione su sistemi molecolari di grandi dimensioni, come nanoparticelle e proteine.



RICERCA DI BASE



© science photo, Shutterstock

Nel corso degli ultimi tre decenni, è diventata pratica sempre più diffusa interpretare vari fenomeni di chimica macroscopica e meccanismi di reazione in termini di specifiche interazioni inter e intramolecolari. Oggigiorno, tale aspetto non riguarda esclusivamente i settori classici di fisica e chimica, ma si estende anche alle aree moderne di scienze naturali come la biologia molecolare e le nanotecnologie. Ciò ha fatto sì che la chimica quantistica o l'applicazione della meccanica

quantistica ai sistemi e ai fenomeni molecolari diventasse parte integrante dell'intero panorama di scienze chimiche, biologiche e dei materiali.

Oltre a fornire informazioni qualitative sulle molecole e sulle rispettive interazioni, la chimica quantistica moderna potrebbe anche offrire un quadro più completo dei processi molecolari che non è possibile ricavare da questi lavori sperimentali soltanto come intermedi elusivi di reazioni chimiche. "Gran parte dei risultati sperimentali è

sostenuta da moderni lavori computazionali e ora più che mai gli aspetti teorici vengono impiegati come una base da cui partire per guidare i futuri lavori sperimentali nell'ambito dell'industria farmaceutica e delle scienze dei materiali", afferma Poul Jorgensen, ricercatore del progetto LCC finanziato dall'UE. "Ciò ha fatto sì che non solo il mondo accademico, ma anche svariati laboratori di ricerca industriale puntassero sempre più spesso su simulazioni computerizzate ad alta precisione su sistemi molecolari sempre più grandi."

Tuttavia, secondo quanto afferma Jorgensen, il problema consiste nel fatto che i lavori computazionali crescono in modo esponenziale di pari passo con le dimensioni del sistema molecolare contestualmente alla richiesta di livelli di precisione sempre più elevati. "Per superare questo problema di natura computazionale, sono stati concepiti i cosiddetti "metodi di correlazione locale" che descrivono le interazioni repulsive fondamentali tra i singoli elettroni in una dimensione spaziale locale anziché nella tipica dimensione canonica delocalizzata," afferma l'esperto.

Potenziare il codice LSDalton

Jorgensen faceva parte del team di ricerca che si è occupato dello sviluppo di un codice di chimica quantistica chiamato LSDalton, un programma di adattamento lineare a parallelismo massivo impiegato per la determinazione puntuale delle energie e di altre proprietà molecolari per i sistemi molecolari di grandi dimensioni. Oggi, grazie al progetto LCC, Jorgensen e il suo team sono stati in grado di sviluppare ulteriormente il codice LSDalton. "Il principale obiettivo del progetto consisteva nell'ottenere metodi di raggruppamento in grado di adattarsi in modo lineare alle dimensioni del sistema e basati su calcoli a parallelismo massivo che consentono, ad esempio, ai sistemi molecolari di piccole e grandi dimensioni di richiedere lo stesso 'wall time' computazionale," afferma Jorgensen.

L'elemento chiave per raggiungere questo obiettivo consisteva nell'espressione della funzione d'onda dei cluster accoppiati in una base di orbitali localizzati Hartree-Fock (HF). "Siamo stati in grado di dimostrare la possibilità di ottenere questa base di HF localizzati e di descrivere i metodi di generazione di energie di cluster accoppiati a parallelismo massivo e ad adattamento lineare," spiega Jorgensen. "Abbiamo effettuato con successo calcoli a parallelismo massivo per l'energia e il gradiente molecolare a diversi livelli della teoria dei raggruppamenti accoppiati. In futuro, la stessa tecnologia sarà applicata a metodi di cluster accoppiati di livello ancora superiore per ottenere non solo l'energia e il gradiente di una molecola di grandi dimensioni, ma anche altre proprietà molecolari, tra cui le energie di eccitazione e i momenti di transizione, la schermatura nucleare, le polarizzabilità e il dichroismo circolare elettronico e vibrazionale."

Una nuova era di calcoli quantistici

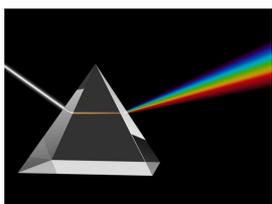
Gli sviluppi raggiunti dal progetto LCC sanciranno l'inizio di una nuova era di calcoli quantistici di precisione su sistemi molecolari di grandi dimensioni, come nanoparticelle e proteine. "Il potenziamento delle prestazioni potrebbe avvantaggiare tutte le aree della scienza e dell'ingegneria molecolare attraverso lo sviluppo sia delle dimensioni massime dei sistemi molecolari che è possibile simulare, sia del livello di precisione generale raggiungibile," spiega Jorgensen.

Gli sviluppi si rivelano particolarmente interessanti nel contesto dei supercomputer, per i quali il "wall time" alla soluzione rappresenta la misura più importante e potrebbe essere possibile utilizzare in modo efficiente il programma LSDalton. Questi traguardi hanno ricevuto il riconoscimento dell'Oak Ridge National Laboratory (ORNL) negli Stati Uniti, dove è disponibile uno dei più grandi supercomputer, il TITAN, e dove il supercomputer più grande al mondo, chiamato SUMMIT, sarà operativo nel giro di un anno circa. In questa struttura il codice LSDalton è stato utilizzato con successo per l'esecuzione di calcoli computazionali estremamente complessi su TITAN. "Oggi giorno, il programma LSDalton è oggetto di ulteriori perfezionamenti presso l'ORNL e sarà ben presto pronto per l'esplorazione di nuove e complesse applicazioni su SUMMIT relative, ad esempio, ai nanotubi di carbonio, al grafene e alla forma cristallina preferita delle molecole organiche," afferma Jorgensen.

Parole chiave

LCC, Unione europea, UE, LSDalton, supercomputer, chimica quantistica

Scopri altri articoli nello stesso settore di applicazione

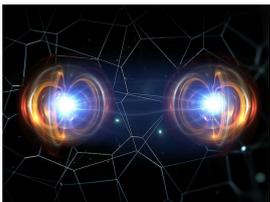


[La ricerca rivela indizi sulla geometria nascosta di importanti categorie matematiche](#)

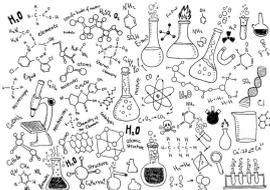




Una ricerca analizza il modo in cui il confinamento determina il comportamento della materia soffice



Applicare la meccanica quantistica a sistemi complessi



Un annoso dilemma di chimica fisica è finalmente risolto



Informazioni relative al progetto

LCC

ID dell'accordo di sovvenzione: 291371

Progetto chiuso

Data di avvio

1 Maggio 2012

Data di completamento

30 Aprile 2017

Finanziato da

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

Costo totale

€ 1 738 432,00

Contributo UE

€ 1 738 432,00

Questo progetto è apparso in...



Ultimo aggiornamento: 10 Ottobre 2017

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/203859-more-accurate-computer-simulations-for-bigger-molecular-systems/it>

European Union, 2025