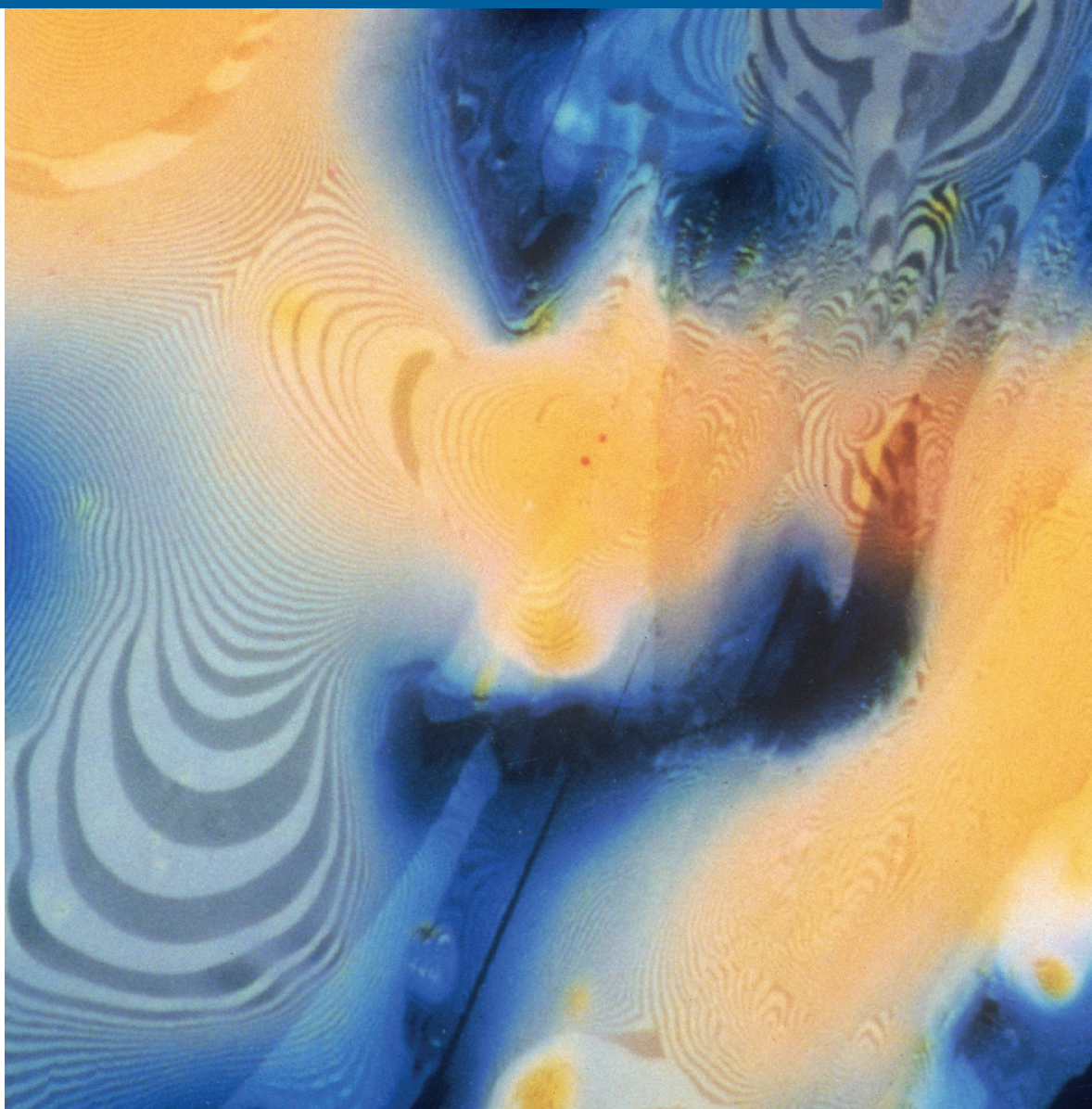




INC

**LES GROUPEMENTS
DE RECHERCHE
EN CHIMIE**

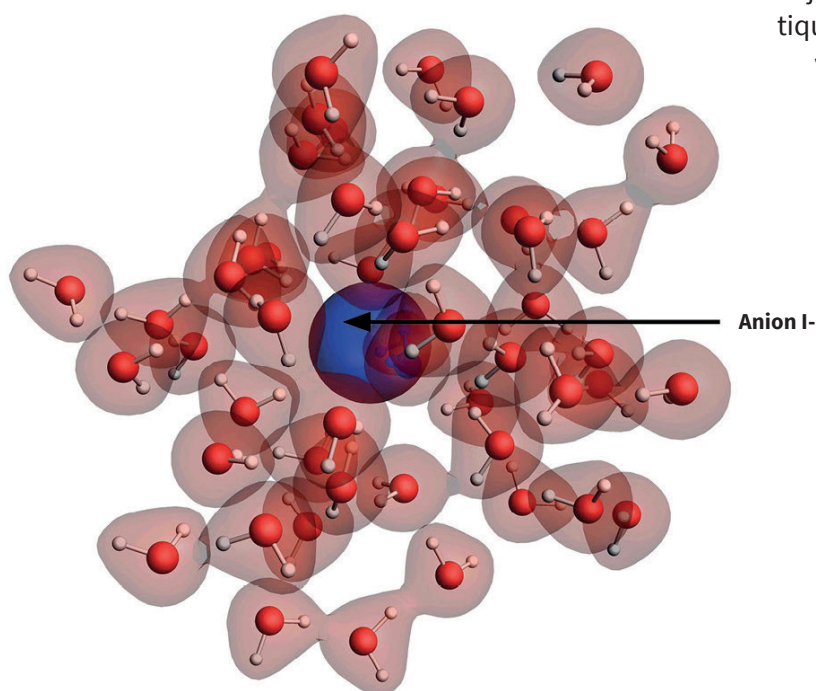


GDR NBODY

Problème quantique à N corps en chimie et physique

OBJECTIFS

Le GDR NBODY a pour objectif de rassembler la communauté travaillant sur le problème quantique à N corps, en majorité du point de vue de la chimie quantique, mais en intégrant aussi les points de vue de la physique de la matière condensée, de la physique nucléaire, et des mathématiques. L'idée est de favoriser le développement de nouvelles méthodes de calculs en mécanique quantique, le transfert de ces méthodes d'une discipline à une autre, et leur mise en œuvre informatique efficace. Pour cela, le Groupement de recherche organise des congrès et ateliers interdisciplinaires. Il est particulièrement impliqué dans la formation des étudiants et des chercheurs via l'organisation de plusieurs écoles interdisciplinaires internationales.



Calcul quantique du système $I-(H_2O)_{50}$

THÉMATIQUES

- Chimie quantique
- Physique de la matière condensée
- Physique nucléaire
- Mathématiques

$$E_{c,J}^w[n^w] = \mathcal{E}_{c,J}^w[n^w] + \sum_{K \geq 0} w_K \sum_{I > 0} (\delta_{IJ} - w_I) \frac{\partial (\mathcal{E}_{c,K}^w[n^w])}{\partial w_I} + \sum_{K \geq 0} w_K \int d\mathbf{r} \frac{\delta \mathcal{E}_{c,K}^w[n^w]}{\delta n(\mathbf{r})} (n_{\Phi_J^{KS,w}}(\mathbf{r}) - n_{\Psi_J}(\mathbf{r}))$$

Développement d'une théorie de la fonctionnelle de la densité pour les états excités.

100 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 37 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

Nous assistons à une évolution remarquable de la chimie quantique au niveau international. De nouvelles approches basées sur des méthodes provenant d'horizons différents sont proposées. C'est le cas par exemple pour les méthodes basées sur la fonction d'onde où de nouvelles approches permettant de dépasser les limites des méthodes actuelles sont développées. Par exemple, des calculs CASSCF où des espaces actifs correspondant à une cinquantaine d'électrons dans une cinquantaine d'orbitales peuvent maintenant être réalisés. De nouvelles représentations de la fonction d'onde issues de la physique (Tensor Network) sont utilisées et fournissent une vision beaucoup plus profonde du contenu physique de la fonction d'onde. Le développement des approches stochastiques est aussi très actif. Par exemple, la méthode FCI-QMC introduite il y a quelques années permet d'échantillonner des espaces actifs inaccessibles jusque-là. Le développement de variantes déterministes des méthodes FCI-QMC, telle que l'interaction de configurations sélectionnée, est également un domaine de recherche très actif. Il faut noter que pour toutes ces méthodes la partie HPC devient maintenant essentielle. Des implémentations très efficaces adaptées à l'architecture des supercalculateurs actuels, en particulier en ce qui concerne le parallélisme massif, doivent être développées. Dans le cas de calculs systématiques de nombreux systèmes moléculaires on assiste à une explosion spectaculaire des techniques de *machine learning*. À un niveau plus fondamental, il est maintenant proposé d'utiliser le *machine learning* pour le choix des configurations importantes dans les calculs d'interaction de configurations.

Au-delà des méthodes de fonction d'onde, il faut également citer l'évolution des techniques de fonction de Green, un outil central des physiciens, et leur application à la chimie quantique qui se développe. Dans le même esprit, on peut aussi mentionner les méthodes d'*embedding* qui incluent l'effet de l'environnement à la manière des méthodes DMFT. Du côté de la DFT, on peut citer la combinaison des méthodes de fonction d'onde



© Cyril Fréillon, Photothèque CNRS

Supercalculateur CURIE.

avec des fonctionnelles de la densité de courte portée afin de corriger les effets de bases incomplètes et inclure la corrélation dynamique à faible coût calculatoire.

Cette effervescence autour des méthodes de calcul *ab initio* nécessite de mobiliser des méthodologies variées et encore peu connues de tous. Le GDR NBODY a pour mission de structurer ces développements grâce à une interaction renforcée entre chimistes, physiciens et mathématiciens.

CONTACT

Directeur

Julien Toulouse (LCT Paris)

toulouse@lct.jussieu.fr

wiki.lct.jussieu.fr/gdrnbody