旋轨耦合效应的高性能计算研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/40432.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

旋轨耦合效应的高性能计算研究获进展。旋轨耦合效应
是相对论量子力学中的核心现象之一，被广泛应用于现代磁记录介质或拓扑材料研究。

近日，中国科学院计算机网络信息中心在旋轨耦合效应的定量计算研究中取得进展。针对强关联效应与相
对论效应精准描述
的难点，研究团队将自研的基于密度
矩阵重正化群（DMRG）
参考态重构、外收缩多参考（ecMRCI）动态相关处理和自旋—轨道耦合（SOC）
计算结合，实现了DMRG2sCI-ecMR-SOC
计算方案的流程化，同时基于高性能计算深度优化，实现了基于现代异构HPC集群的高效计算。

该研究提出了物理启发的核函数优化策略和并行优化策略
。基于实际场景使用结果显示
该方法的结果与实验数据符合良好，大幅优于文献报道的密度泛函方案DFT的计算结果。

相关计算主要依托“东方”和“元”高性能计算集群完成。相关研究成果被美国化学会*The Journal of Physical Chemistry Letters*接收，并被收录至*Future Leaders in Physical Chemistry*
专刊。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国科学院战略性先导科技专项等的支持。

论文链接

研究团队单位：计算机网络信息中心

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发