

Méthode de Galerkin en base mixte ondelettes/gaussiennes pour le calcul de structures électroniques en chimie quantique

Dinh Huong PHAM, IFP Energies nouvelles

Valérie PERRIER, Laboratoire Jean-Kuntzmann

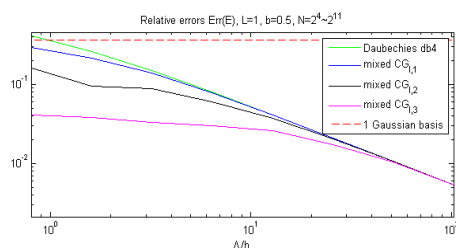
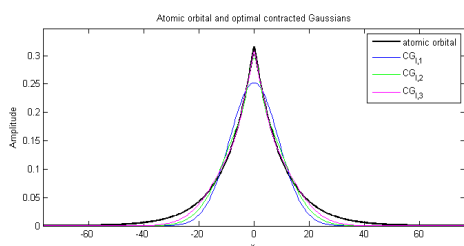
Quang Huy TRAN, IFP Energies nouvelles

Luigi GENOVESE, Inac-CEA

Laurent DUVAL, IFP Energies nouvelles

Mots-clés : Équation de Schrödinger, ondelettes, orbitales atomiques, gaussiennes contractées

Les simulations moléculaires en chimie quantique de type *ab initio* sont issues de l'équation de Schrödinger via des formalismes d'approximation bien connus, comme la théorie de Hartree-Fock ou celle de la fonctionnelle de la densité [1]. Parmi les nombreux logiciels destinés à l'usage des chimistes, le code massivement parallèle BigDFT [2] utilise des bases d'ondelettes pour la discrétisation des orbitales atomiques. Afin de mieux capturer les singularités de rebroussement apparaissant dans les calculs *tous électrons* sans augmenter la complexité de BigDFT, nous proposons d'enrichir cette base d'ondelettes par des gaussiennes contractées $CG_I(x) = \sum_q d_{I,q} \exp(-|x - X_I|/2\sigma_{I,q}^2)$ (figure de gauche) centrées sur chaque position de noyau X_I . Comme proposé par F. Longo [3], chaque orbitale atomique est alors approchée par $\phi_i(x) = \sum_I \alpha_{i,I} CG_I(x) + \sum_k \beta_{i,k} \chi_k(x)$, où χ_k désignent les fonctions d'échelles d'une analyse multirésolution. Nous présentons les résultats obtenus pour une équation modèle en dimension 1 de type Schrödinger avec potentiel delta (figure de droite). L'intérêt des bases mixtes ondelettes-gaussiennes est attesté par un gain significatif en précision et un très faible coût marginal dû au petit nombre de degrés de liberté supplémentaires.



Références

- [1] É. CANCÈS, M. DEFRANCESCHI, W. KUTZELNIGG, C. LE BRIS, AND Y. MADAY, *Computational quantum chemistry: A primer*, in Special Volume Computational Chemistry, P. G. Ciarlet and C. Le Bris, eds., vol. X of Handbook of Numerical Analysis, North-Holland, Elsevier, Amsterdam (2003), pp. 3–270.
- [2] L. GENOVESE, A. NEELOV, S. GOEDECKER, T. DEUTSCH, S. A. GHASEMI, A. WILLAND, D. CALISTE, O. ZILBERBERG, M. RAYSON, A. BERGMAN, AND R. SCHNEIDER, *Daubechies wavelets as a basis set for density functional pseudopotential calculations*, J. Chem. Phys., 129 (2008), p. 014109.
- [3] F. LONGO, *Gaussian and wavelet bases in electronic structure calculations*, PhD thesis, Politecnico di Torino, March 2011.

Dinh Huong PHAM, IFP Energies nouvelles, 1 et 4, avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison
dinh-huong.pham@ifpen.fr

Valérie PERRIER, Université Grenoble-Alpes, Laboratoire Jean Kuntzmann, F-38000 Grenoble
Valerie.Perrier@imag.fr

Quang Huy TRAN, IFP Energies nouvelles, 1 et 4, avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison
quang-huy.tran@ifpen.fr

Luigi GENOVESE, Institut Nanosciences et Cryogénie, SP2M/L-Sim, CEA cedex 9, 38054 Grenoble
luigi.genovese@cea.fr

Laurent DUVAL, IFP Energies nouvelles, 1 et 4, avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison
laurent.duval@ifpen.fr