



## Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

**APVV-18-0161**

**Kvantové Monte Carlo pre silne korelované elektrónové systémy**

Zodpovedný riešiteľ **Ing. Matúš Dubecký, PhD.**

Príjemca

**Slovenská technická univerzita v Bratislave -  
Materiálovotechnologická fakulta, Trnava**

**Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený**

Slovenská technická univerzita v Bratislave

**Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení**

-

**Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu**

-

**Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače**

\*M. Ditte, M. Dubecký: Phys. Rev. Lett. 123, 156402, 2019

\*R. Fanta, M. Dubecký: J. Chem. Theory Comput. 17, 4242-4249, 2021

\*V. Kolesár, M. Dubecký: J. Chem. Theory Comput. 19, 1170-1176, 2023

\*M. Šulka, M. Dubecký: J. Comp. Chem. 42, 1-9, 2020

\*M. Dubecký, F. Karlický, S. Minárik, L. Mitas: J. Chem. Phys. 153, 184706, 2020

\*F. Karlický, S. Minárik, M. Dubecký: J. Chem. Phys. 158, 054703, 2023

**Uplatnenie výsledkov projektu**

Poznatky získané pri riešení projektu prispievajú k hlbšiemu pochopeniu elektrónových korelačných efektov v komplexných mnoho-elektrónových systémoch ako aj k účelnejšiemu použitiu mnohočasticovej metódy FNDMC a získaniu lepšej kontroly nad jej presnosťou.

**Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)**

Cieľom projektu bolo prispieť k systematickému mapovaniu presnosti FNDMC v silne korelovaných systémoch v závislosti na kritických technických parametroch, vývinu konceptného pochopenia kľúčových zdrojov chýb tejto metódy, a prispieť k jej metodickému vývoju. Cieľom tiež bolo prehĺbenie pochopenia vzťahu medzi štruktúrou fermónových vlnových funkcií v reálnom priestore a okupačnými číslami 1-časticovej redukovanej matice hustoty (1RDM) a nakoniec dekompozícia elektrónovej korelačnej energie na empiricky aj fyzikálne odlišné komponenty (dynamická a nedynamická zložka). Konštatujeme že projekt

prispel k pokroku vo všetkých navrhovaných oblastiach a cieľoch a tiež k vzniku kvalitných publikácií v časopisoch s impakt faktorom. Poznatky získané pri riešení projektu prispievajú k hlbšiemu pochopeniu elektrónových korelačných efektov v komplexných mnoho-elektrónových systémoch ako aj k účelnejšiemu použitiu mnohočasticovej metódy FNDMC a získaniu lepšej kontroly nad jej presnosťou.

**Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)**

The aim of the project was to contribute to the systematic mapping of FNDMC accuracy in strongly correlated systems as a function of critical technical parameters, to develop a conceptual understanding of the key sources of error in this method, and to contribute to its methodological development. The goal was also to deepen the understanding of the relationship between the structure of fermionic wave functions in real space and the occupation numbers of the 1-particle reduced density matrix (1RDM), and finally to decompose the electron correlation energy into empirically and physically distinct components (dynamical and non-dynamical components). We note that the project has contributed to the advancement of all the proposed areas and objectives and also to the production of high quality publications in journals with impact factor. The knowledge gained from the project will contribute to a deeper understanding of electron correlation effects in complex many-electron systems as well as to a more purposeful use of the FNDMC many-particle method and to obtain better control over its accuracy.