

V této práci studujeme kvantové simulace na klasických počítačích z pohledu kvantové teorie informace. Zaměřujeme se zejména na silně korelované mnohočásticové vlnové funkce.

Ukazujeme, jak je možné pomocí ztrátové kvantové komprese zredukovat množství dat potřebných pro datovou reprezentaci stavu a zkoumáme strukturu entanglementu silně korelovaných chemických systémů.

Pro tento účel popisujeme různé míry entanglementu pro metodu DMRG (metoda Density Matrix Renormalization Group). V rámci DMRG metody implementujeme výpočet zobecnění vzájemné informace (mutual information)

pro systém rozdělený na tři části. Uvádíme několik způsobů jak optimalizovat výpočet základního stavu v rámci DMRG.

Teoretické závěry jsou podpořeny numerickou simulací molekuly diboranu, jenž vykazuje chemicky zajímavou elektronovou strukturu, jako např. 3-centrové 2-elektronové vazby.

V teoretické části uvádíme do problematiky kvantové teorie informace v souvislosti s kvantově chemickými systémy, vysvětlujeme motivaci, jenž stojí za naším výběrem toho systému a prezentujeme výsledky svých vlastních výpočtů tříčásticové vzájemné informace (tripartite mutual information).