

Navzdory obrovskému pokroku v posledních desetiletích zůstává přesný popis silně korelovaných molekul dodnes výzvou. Abychom to změnili, vyvinuli jsme masivně paralelní implementaci metody DMRG, program MOLMPS. Pro takové nerelativistické systémy, které vyžadují přesný popis jak statické tak i dynamické korelace jsme rozšířili MOLMPS na téměř lineárně škálující metodu DLPNO-TCCSD. V relativistické oblasti jsme první, kdo použil čtyřkomponentní metodu CCSD ke korekci popisu dynamické korelace v DMRG. Výsledná metoda se nazývá 4c-TCCSD. Použití programu MOLMPS jsme demonstrovali na obtížných systémech, např. pro  $\pi$ -konjugovaný tetramer anthracenu s aktivním prostorem CAS(63,63) a kofaktor FeMoco s CAS(113,76). Tyto výpočty ukázaly, že paralelizace v vykazuje dobré škálování až na úroveň přibližně 2000 procesorových jader. Na příkladu modelu molekuly porfyrinu jsme demonstrovali, že metoda DLPNO-TCCSD dokáže popsat 99,9 % korelační energie získané původní metodou TCCSD. Naše relativistická studie spektroskopických vlastností těžkých biatomik ukázala, že metoda 4c-TCCSD zvyšuje přesnost oproti CCSD až na řád CCSD(T), a že má v relativistické oblasti potenciál. Tato práce pojednává o třech různých implementacích kvantově chemických metod založených na QC-DMRG.