

Создание программного комплекса квантово-химических расчетов, обладающих повышенной точностью и быстродействием

Даншин Артем Александрович

НИИЦ “Курчатовский институт”

`danshin_aa@nrcki.ru`

Соавторы: А. А. Ковалишин

Секция: Прикладная математика и математическое моделирование

Существующие методы квантовой химии обладают большой вычислительной сложностью в большинстве приложений в химии, физике конденсированного состояния, биохимии и фармакологии, что ограничивает их область применимости. Поэтому необходимо развивать новые численные методы и математические модели, которые позволят на порядки ускорить вычисления, не теряя в точности. В докладе рассматриваются методы квантового Монте-Карло, Хартри-Фока, пост-Хартри-Фока и теории функционала плотности как с точки зрения численной реализации [1], так и методологических аспектов [2, 3]. Представленные результаты легли в основу программного комплекса, предназначенного для расчета структуры и свойств многоэлектронных систем.

- [1] A. A. Danshin, A. A. Kovalishin, *Operator Spectrum Transformation in Hartree–Fock and Kohn–Sham Equations*, Doklady Mathematics, 107 (2023), 17–20.
- [2] A. A. Danshin, A. A. Kovalishin, M. I. Gurevich, *Approach to determine nodal surfaces of some s-electron systems*, Physical Review E, 108 (2023), 015305.
- [3] A. A. Danshin, A. A. Kovalishin, *High-Performance Computing in Solving the Electron Correlation Problem*, Lecture Notes in Computer Science, 13708 (2022), 140-151.