

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ХАРТРИ-ФОКА И КОНА-ШЭМА БЕЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БАЗИСНЫХ НАБОРОВ

Даншин Артем Александрович

Аспирант

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: danshin_aa@nrcki.ru

Научный руководитель — Ковалишин Алексей Анатольевич

Описание основного состояния многоэлектронных систем, таких как атомы или молекулы, требует вычисления собственной функции, соответствующей наименьшему собственному значению уравнения Шредингера. Однако из-за размера рассматриваемого гильбертова пространства, а также из-за двухчастичного оператора, описывающего взаимодействие между электронами, эта задача чрезвычайно сложна и невозможна без применения некоторых приближений. Решение полной задачи на собственные значения трехмерных интегродифференциальных функциональных уравнений применяемых на практике методов Хартри-Фока и теории функционала плотности — самая затратная часть вычислений, поэтому обычно используется разложение орбиталей по базисному набору. Однако это является дополнительным допущением и вносит существенную ошибку при расчете не центрально-симметричных систем (молекул), а в случае атомов отсутствует универсальный набор базисных функций для всех элементов таблицы Менделеева.

Идея проводить расчеты без базисного набора, а опираясь только на конечные разности, исследовалась довольно давно [1,2]. Основная проблема, с которой сталкивались исследователи — это то, что получающаяся в результате система линейных уравнений оказывалась довольно большой размерности, которая обусловлена тем, что для достижения нужной точности необходимо использовать очень мелкий шаг сетки. Решение полной задачи на собственные значения требует вычислительных затрат, а в конечном итоге и расчетного времени существенно выше, чем при использовании базисных наборов. Использование различных приемов для ускорения, как введение в рассмотрение только валентных электронов [3,4], или использование чебышевских методов для ускорения поиска собственных значений [5,6], не привело к тому, что безнаборные методы стали бы эффективнее наборных.

Целью настоящей работы является создание асимптотически точ-

ного в смысле шага расчетной сетки алгоритма решения уравнений метода Хартри-Фока и теории функционала плотности без использования базисных наборов, вычислительная сложность которого будет сопоставима со сложностью алгоритмов, реализующих подход базисных наборов. Достигнут линейный рост вычислительных затрат как с размерностью сетки, так и с числом частиц в системе. Прежде всего, этого удалось достичь за счет предварительного тождественного преобразования спектра конечно-разностного оператора, благодаря которому задача сводится к частичной проблеме собственных значений (вместо полной проблемы), и собственные функции упорядочены наиболее удобным для расчета способом. Расчет собственных функций осуществляется последовательно, начиная с основного состояния. Используемые при этом математические приемы хорошо известны из задач переноса нейтронов в физике ядерных реакторов. Представленный алгоритм верифицирован на полном наборе атомов таблицы Менделеева, однако очевидно, что его потенциал выходит за рамки центрально-симметричных систем.

Литература

1. Beck T. L. Real-space mesh techniques in density functional theory // *Rev. Mod. Phys.*. 2000. V. 72, P. 1041.
2. Torsti T. et al Three real-space discretization techniques in electronic structure calculations // *physica status solidi (b)*. 2006. V. 243, P. 1016.
3. Kronik L. et al Parsec — the pseudopotential algorithm for real-space electronic structure calculations: recent advances and novel applications to nano-structures // *physica status solidi (b)*. 2006. V. 243, P. 1063.
4. Marques M. A. et al octopus: a first-principles tool for excited electron-ion dynamics // *Computer Physics Communications*. 2003. V. 151, P. 60.
5. Zhou Y. et al Parallel self-consistent-field calculations via Chebyshev filtered subspace acceleration // *Phys. Rev. E*. 2006. V. 74, P. 066704.
6. Zhou Y. et al Chebyshev filtered subspace iteration method free of sparse diagonalization for solving the Kohn-Sham equation // *Journal of Computational Physics* 2014. V. 274, P. 770.