Д. Л. Винокурский (Ставрополь, СевКавГТУ). **Решение уравнений Кона–Шэма для молекул методом конечных элементов.**

В представленном докладе рассматривается решение самосогласованных уравнений функционала электронной плотности с использованием метода конечных элементов. Этот подход стал популярен в последнее время, потому что может быть легко реализован при параллельных вычислениях.

Гамильтониан молекулярной системы записывается в виде

$$\widehat{H}_{KS} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V + V_{xc}.$$

Здесь V — электростатический потенциал Хартри, V_{xc} — обменно-корреляционный потенциал, который описывает многочастичные квантовые эффекты. Уравнения Кона–Шэма могут быть записаны в виде

$$\widehat{H}_{KS}\varphi_i(x) = \varepsilon_i \varphi_i(x), \quad n(x) = \sum |\varphi_i(x)|^2, \tag{1}$$

где $n(x)$ — электронная плотность. Уравнения (1) решаются самосогласованно.

Для численного решения задачи выбирались многочлены третьей степени

$$b_k(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{4}\left(2 + \dfrac{x - x_k}{h}\right)^3, & -2 < \dfrac{x - x_k}{h} \leqslant -1, \\ 1 - \dfrac{3}{2}\left(\dfrac{x - x_k}{h}\right)^2 - \dfrac{3}{4}\left(\dfrac{x - x_k}{h}\right)^3, & -1 < \dfrac{x - x_k}{h} \leqslant 0, \\ 1 - \dfrac{3}{2}\left(\dfrac{x - x_k}{h}\right)^2 + \dfrac{3}{4}\left(\dfrac{x - x_k}{h}\right)^3, & 0 < \dfrac{x - x_k}{h} \leqslant 1, \\ \dfrac{1}{4}\left(2 - \dfrac{x - x_k}{h}\right)^3, & 1 < \dfrac{x - x_k}{h} \leqslant 2. \end{cases}$$

Волновые функции задачи $\varphi_i(x)$ представлялись в виде суммы по данным многочленам $\varphi_i(x) = \sum_k a_k b_k(x)$. Матричные элементы гамильтониана были представлены в виде $H_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} b_n(x)\widehat{H}_{KS} b_m(x)\,dx$.

Базис из сплайнов не ортогонален, поэтому следует решать следующую задачу на отыскание собственных значений: $\sum_m H_{nm} a_m = \varepsilon_i \sum_m S_{nm} a_m$. Здесь $S_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} b_n(x) b_m(x)\,dx$ есть матрица перекрывания. Задача решалась самосогласованно с относительной ошибкой $\Delta \leqslant 10^{-6}$.