**Реализация метода CASSCF для решения**

**многоэлектронного уравнения Паули**

***Бодунов А.А.***

*аспирант, 4 года*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E–mail:* *artembodunov@mail.ru*

Квантово-механическое описание электрона в сильном магнитном поле появилось практически одновременно с зарождением самой квантовой механики, став одним из первых успешных приложений новой теории [1]. Однако изучение атомов в условиях сильных магнитных полей началось значительно позже, и во многом эти исследования были инициированы необходимостью понимания природы экзотических астрофизических объектов, таких как белые карлики и нейтронные звезды. Эти объекты, обладающие экстремально сильными магнитными полями, представляют собой уникальные природные лаборатории, где можно наблюдать эффекты, недостижимые в земных условиях.

В настоящее время теоретическое описание атомов в сильных магнитных полях базируется на адаптации хорошо зарекомендовавших себя методов квантовой химии, таких как решение многоэлектронного уравнения Шрёдингера, модифицированного для учёта магнитных эффектов через уравнение Паули. В рамках этого подхода был реализован метод неограниченного Хартри-Фока, который позволяют рассчитывать спектр атомов с учётом влияния непертурбативного магнитного поля [2]. В настоящее время значительное внимание уделяется развитию пост-Хартри-Фоковских методов, позволяющих учесть электронную корреляцию. В частности были модифицированы методы, опирающиеся на теорию связанных кластеров, которая зарекомендовала себя как мощный инструмент для описания сложных многоэлектронных систем [3-4].

Данная работа вносит значительный вклад в расширение арсенала для расчёта электронной структуры в условиях сильных магнитных полей. В частности, мы демонстрируем, как метод многоконфигурационного самосогласованного поля в его варианте CASSCF (Complete Active Space Self-Consistent Field) может быть эффективно применён для моделирования атомных спектров в таких экстремальных условиях. В рамках исследования представлено детальное описание разработанного нами подхода, который включает в себя модификацию ключевых компонентов метода: как блока расчёта коэффициентов конфигурационного взаимодействия, так и блока оптимизации молекулярных орбиталей в рамках многоконфигурационного самосогласованного поля.

 Особое внимание уделено анализу различий в поведении ограниченного и неограниченного вариантов метода CASSCF. Эти различия представляют значительный научный интерес даже в отсутствие внешнего магнитного поля, поскольку они позволяют глубже понять природу электронной корреляции и её влияние на свойства многоэлектронных систем.

**Литература**

1. Landau, L. D. "Diamagnetismus der metalle." *Zeitschrift für Physik* 64 (1930): 629-637.

2. Jones, Matthew D., Gerardo Ortiz, and David M. Ceperley. "Hartree-Fock studies of atoms in strong magnetic fields." *Physical Review A* 54.1 (1996): 219.

3. Stopkowicz S. et al. Coupled-cluster theory for atoms and molecules in strong magnetic fields //The Journal of Chemical Physics. – 2015. – Т. 143. – №. 7. – С. 074110.

4. Hampe F., Stopkowicz S. Equation-of-motion coupled-cluster methods for atoms and molecules in strong magnetic fields //The Journal of Chemical Physics. – 2017. – Т. 146. – №. 15. – С. 154105.