**Модификация метода МКССП для решения уравнения Паули**

**в сильных магнитных полях**

***Бодунов А.А.,***

*Аспирант, 3 года обучения*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

*E–mail:* [*artembodunov@mail.ru*](mailto:artembodunov@mail.ru)

Теоретическое исследование спектров астрофизических объектов на сегодняшний день является основным способом изучения их строения, эволюции и протекающих в них процессах. Качественно отличающимися от привычных нам в повседневной жизни объектов являются, исследуемые в данной работе, белые карлики и нейтронные звезды. Знание о химическом составе звезды является важным для понимания устройства её жизненного цикла. В литературе описан анализ качественного химического состава белых карликов [1].

В данный момент единственным способом изучения таких объектов является компьютерное моделирование. Подход, используемый в опубликованных работах основывается на применении вариационного метода для решения многоэлектронного уравнения Паули [2]. В настоящий момент опубликованы результаты применения данного подхода для некоторых однореференсных методов [3]. Существенным недостатком такого подхода является принципиальная невозможность количественного описания возбужденных состояний. Настоящая работа является продолжением исследования моделирования электронных структуры атомов второго периода в сильных магнитных полях. Нами были предложены различные способы расчета электронной структуры в варианте методов UHF, UMP2, полного КВ и метода МКССП в рамках аналогичного формализма.

В настоящей работе рассматриваются технические детали реализации данных алгоритмов. Существенными модификациями стандартных квантово-химических алгоритмов являются использование комплексных матриц, а также орбитально неограниченных вариантов данных методов. Рассмотрена модификация стандартного метода UHF для эрмитовых матриц в варианте метода Рутана-Холла, а также с использованием унитарных преобразование матриц плотности а также молекулярных орбиталей. Описана модификация метода МКССП, также подразумевающая неограниченный вариант, а также использующая комплексные матрицы.

**Литература**

1. Kepler S. O., Koester D., Ourique G. A white dwarf with an oxygen atmosphere // Science. 2016. Vol. 352. P. 67-69.

2. Stopkowicz S. et al. Coupled-cluster theory for atoms and molecules in strong magnetic fields // The Journal of Chemical Physics. 2015. Vol. 143. P. 074110.

3. Hampe F., Stopkowicz S. Equation-of-motion coupled-cluster methods for atoms and molecules in strong magnetic fields // The Journal of Chemical Physics. 2017. Vol. 146. P. 154105.