

Использование суперкомпьютеров для надёжного квантовохимического моделирования

Медведев Михаил Геннадьевич

E-mail: medvedev.m.g@gmail.com

Институт Элементоорганических Соединений РАН (ИНЭОС РАН)

Квантовохимическое моделирование широко используется практически во всех областях химии. Особое значение оно имеет в решении задач биохимии и катализа, где требуется адекватное описание химических реакций в крупных динамических системах. Наиболее широко используемым методом для таких задач является теория функционала плотности (DFT), методы которой способны корректно описывать процессы возникновения/разрыва химических связей, а также имеют оптимальное соотношение ресурсоёмкость/точность. Для получения надёжных результатов с помощью DFT, в расчётах необходимо внимательно подходить к выбору используемых функционала и модели системы.

В докладе будет рассмотрена проблема выбора адекватного функционала^{1,2}, модели³ и других параметров расчёта для осуществления надёжного моделирования. Также будут приведены примеры проведённых докладчиком моделирований⁴⁻⁶ и разобрана необходимость применения суперкомпьютеров в моделировании сложных систем.

- (1) Medvedev, M. G.; Bushmarinov, I. S.; Sun, J.; Perdew, J. P.; Lyssenko, K. A. *Science* **2017**, *355*, 49–52.
- (2) Peverati, R.; Truhlar, D. G. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Math. Phys. Eng. Sci.* **2014**, *372*, 20120476.
- (3) Pidko, E. A. *ACS Catal.* **2017**, *7*, 4230–4234.
- (4) Medvedev, M. G.; Panova, M. V.; Chilov, G. G.; Bushmarinov, I. S.; Novikov, F. N.; Stroganov, O. V.; Zeifman, A. A.; Svitanko, I. V. *Mendeleev Commun.* **2017**, *27*, 224–227.
- (5) Medvedev, M. G.; Zeifman, A. A.; Novikov, F. N.; Bushmarinov, I. S.; Stroganov, O. V.; Titov, I. Y.; Chilov, G. G.; Svitanko, I. V. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 3942–3945.
- (6) Cruchter, T.; Medvedev, M. G.; Shen, X.; Mietke, T.; Harms, K.; Marsch, M.; Meggers, E. *ACS Catal.* **2017**.