

## Квантово-механические расчеты в компьютерном материаловедении

А.В.Янилкин  
ВНИИА

В докладе будет рассмотрено применение квантово-механических расчетов на суперкомпьютерах для различных задач материаловедения. В качестве таких задач рассмотрены исследования термоэлектрических свойств материалов, построение фазовых диаграмм, диффузионных свойств, а также разработка классических межатомных потенциалов взаимодействия. Обсуждаются основные вычислительные требования для таких расчетов, а также использования суперкомпьютера ВНИИА.