

Dalton

Dalton – это программная система общего назначения для продвинутых квантово-химических расчетов на основе молекулярной электронной структуры, распространяемая по лицензионному соглашению без каких-либо затрат для пользователя. С помощью Dalton молекулярные системы могут быть проанализированы с использованием различных методов электронной структуры, включая методы самосогласованного поля (SCF, self consistent field) Хартри-Фока (HF, Hartree-Fock) и Кон-Шама (KS, Kohn-Sham) для широкого применения, многоконфигурационный SCF (MCSCF, multiconfigurational SCF) метод высокой гибкости и различные методы связанных кластеров (CC, coupled cluster) для высокой точности. На всех этих уровнях можно рассчитать множество молекулярных свойств, что позволяет пользователю программы изучать, например, молекулярную структуру, энергетику, реакционную способность, спектроскопические параметры, линейные и нелинейные оптические процессы. Небольшие системы могут быть точно сопоставлены с использованием методов полного взаимодействия конфигурации (FCI, full configuration interaction). Экологические эффекты могут быть включены на разных уровнях модели. Для некоторых моделей электронной структуры большие молекулы могут быть изучены с использованием линейного масштабирования и массивно-параллельных алгоритмов. В качестве встроенного визуализатора Dalton поддерживает VRML (Virtual Reality Modeling Language).

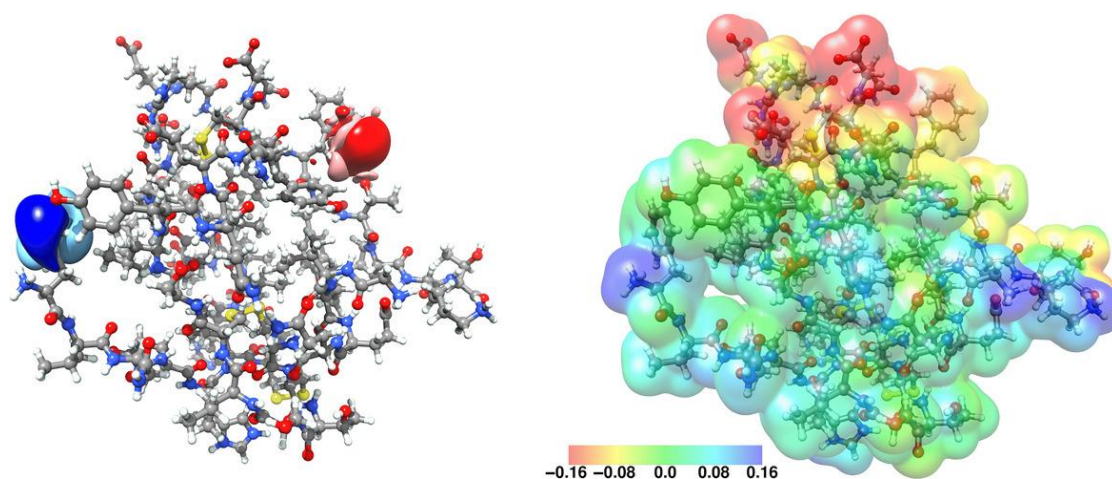


Рисунок 1. Иллюстрация работы программного модуля Dalton. Рисунок взят с ресурса <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/wcms.1172>.

Место установки программы:

/opt/lib/dalton/

Книги и статьи:

- Aidas K., Angeli C., Bak K. L. *The Dalton quantum chemistry program system*. // Wires computational molecular science, 2014, V. 4, Issue 3, P. 269–284.
- Kristensen K. *Self-Consistent Field Response Theory and Coupled-Cluster Theory*. // PhD dissertation, 2011.
- Ettenhuber P. *Size matters: Enabling large-scale coupled cluster calculations*. // PhD dissertation, 2015.
- Carey R., Bell G. *The Annotated VRML 2.0 Reference Manual*. // Addison-Wesley Professional, 1997.

Сетевые ресурсы:

- Dalton and LSDalton. <https://www.daltonprogram.org>
- Dalton on Gitlab. <https://gitlab.com/dalton/daltonprogram.org>
- Dalton Developers's Guide. <https://dalton-devguide.readthedocs.io>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscs.ru