

Molpro

Pakiet Molpro jest zbiorem programów służących wyznaczaniu struktury elektronowej cząsteczek. Pakiet został zaprojektowany przez Hansa-Joachima Wernera i Petera Knowlesa, przy udziale innych autorów.

Główna siła pakietu leży w wysoce dokładnych metodach obliczeniowych, zaprojektowanych do wyznaczania energii korelacji elektronowej z dużą precyzją. W szczególności, pakiet oferuje obliczenia za pomocą takich metod chemii kwantowej jak oddziaływania konfiguracji CI (częściowa i pełna), wielokonfiguracyjna metoda Hartee Focka z aktywną przestrzenią (CASSCF) wraz z poprawką perturbacyjną drugiego i trzeciego rzędu (CASPT2 i CASPT3) oraz kilkunastu metod wykorzystujących teorię sprzężonych klasterów.

W szczególności, niedawno zaimplementowana metoda CCSD(T) daje wyniki bliskie limitowi bazy już przy wykorzystaniu funkcji prymitywnych typu double- ζ or triple- ζ , redukując w ten sposób nakłady obliczeniowe o ok. dwa rzędy wielkości. Większość metod dostępnych w pakiecie Molpro została zrównoleglona, dzięki czemu mogą one być użyte również do obliczeń dużych układów.

Strona producenta: www.molpro.net

Dokumentacja producenta: [Molpro Users Manual](#)

Sposób użycia: kdm.cyfronet.pl/portal/Molpro