

Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV- 0091-07**Ultrapresné simulácie kondenzovaných systémov**Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Ivan Štich, DrSc.**Príjemca **Fyzikálny ústav SAV****Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený**

1. Fyzikálny ústav SAV
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. North Carolina State University, U.S.A.
2. Ruhr-Universität Bochum, SRN
3. Kings College London, U.K.

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. M. Dubecký, R. Derian, L. Mitas, and I. Štich, J. Chem. Phys. 133, 244301 (2010) [IF 2009 3.093]
2. R. Turanský, M. Konôpka, N. L. Doltsinis, I. Štich, D. Marx, ChemPhysChem 11, 345 (2010) [IF 2009 3.453],
3. R. Turanský, M. Konôpka, N. L. Doltsinis, I. Štich, D. Marx, PhysChemChemPhys 12, 13853 (2010) [IF 2009 4.116]
- 4.
- 5.

Uplatnenie výsledkov projektu

Jedná sa o typické výsledky základného výskumu a tým je určené aj ich uplatnenie, t.j. najmä budovanie poznatkovej bázy, ktorá je základom budovania poznatkovej spoločnosti. Dalším uplatnením výsledkov sú ďalšie publikácie, minimálne štyri, ktoré sú už v štádiu prípravy, ďalšie pozvané a príspevané príspevky na medzinárodných konferenciách, ktoré očakávame, ďalší doktorandi a diplomanti ktorí už sú alebo budú naviazaní na výsledky tohto projektu.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Jadrom projektu boli ultrapresné výpočty elektrónovej štruktúry kondenzovaných systémov metódami kvantového Monte-Carla. Tieto metódy umožňujú dosiahnuť chemickú presnosť (0.04eV) pre základný stav a za istých podmienok aj pre excitované stavy. Metódami QMC sme získali unikátne výsledky pre singletné a tripletné stavy (základný stav a excitované stavy) molekuly azobenzénu, t.j. veľkého systému s cca. 100 explicitne korelovanými elektrónmi. Tieto výsledky výrazne prevyšujú najlepšie výsledky získané pre tento systém metódami kvantovej chémie. Metódami QMC sme tiež riešili systémy TM-arenav, konkrétne vanadbenzén. Zistili sme, že základný stav vanadbenzénu je spinový kvintet. Z disociačnej krivky je zrejmé, že dynamické korelácie výrazne ovplyvňujú geometriu tohto systému. DMC metódy výrazne skracujú dĺžku V+ - Bz oproti metódam, kde sú dynamické korelácie zahrnuté poruchovo a ešte viac v porovnaní s metódami CAS SCF. Na systéme vanadbenzénu prebiehajú testy optimalizácie geometrie metódami korelovaného vzorkovania. Získali sme tiež najpresnejšie odhady D->F prechodu vo V+ a ionizačnú energiu V atómu. Prekvapivo, obidve veličiny sú silne ovplyvnené relativistickými efektami. Jednoduchšími DFT (ROKS) metódami sme študovali sme tiež jednomolekulové zariadenia na báze azobenzénu ukotveného na zlate: optický a mechanický molekulový spínač a určili podmienky, za akých môže pracovať v reverzibilnom cyklickom režime. Pracovali sme tiež na kvantovom transporte metódami QMC z korelačnej funkcie nábojovej hustoty a na vodivosti molekulového prechodu molekuly azobenzénu ukotvenej na zlatých elektródach.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

The project focussed on ultra accurate treatment of electronic structure using quantum Monte-Carlo methods. Chemical accuracy (0.04eV) can be reached by QMC methods for ground-state and frequently also for excited states. Using QMC methods we have obtained unique results for singlet and triplet states (ground- and excited states) of azobenzene molecule, i.e. for a large system with approx. 100 explicitly correlated electrons. Our results clearly surpass the best results obtained for this system by quantum chemistry methods. We have applied QMC methods also to TM-arenes, specifically vanadium benzene. We have found that the ground state is a spin quintet. From the calculated dissociation curve we conclude that dynamical correlation significantly affect the geometry of the system. DMC methods appreciably shorten the V+ - Bz length, compared to methods with perturbational treatment of dynamical correlation and even more so compared to CAS SCF method. This system is used to test calculation of ionic forces using correlated sampling methods. We have also obtained the most accurate estimates available of the energy of the D->F transition in V+ and ionization energy in the V atom. Using simpler DFT (ROKS) methods we have studied single molecule devices based on azobenzene anchored on gold: optical and mechanical molecular switch and determined conditions necessary for its reversible cyclic operation. We have also worked on quantum transport from electronic density correlation function sampled by QMC methods and on conductivity of azobenzene anchored to gold electrodes.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Štatutárny zástupca príjemcu

V dd. mm. rrrr

V dd. mm. rrrr

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu