

Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

LPP-0031-07

Vlnové funkcie s explicitným zahrnutím elektrónovej korelácie: alternatívne prístupy a ich využitie pri výpočtoch spektroskopických parametrov malých molekúl.

Zodpovedný
riešiteľ**Prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc**

Príjemca

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Eotvos Loránd University, Faculty of Science, Budapest, Maďarsko
2. Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, SRN
- 3.

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. J. Noga, S. Kedzuch, J. Simunek and S. Tenno: Explicitly correlated coupled cluster F12 theory with single and double excitations. J. Chem. Phys. 128, 174103-1 - 174103-11 (2008)
2. G. Czako, B. Nagy, Gy. Tasi, A. Somogyi, J. Simunek, J. Noga, B. J. Braams, J. M. Bowman, and A. G. Csaszar: Proton Affinity and Enthalpy of Formation of Formaldehyde. Int. J. Quantum Chem. 109 2393-2409 (2009)
3. J. Noga, J. Simunek: On the one-particle basis set relaxation in R12 based theories. Chem.

4. E. Matyus, J. Simunek and A. G. Csaszar; On variational computation of a large number of vibrational energy levels and wave function for medium-sized molecules. J. Chem. Phys. 131, art.no. 074106-14 (2009)

5. J. Noga and J. Simunek: Solving the Independent-Particle Model via Nonunitary Transformation Based on Variational Coupled Cluster Singles, J. Chem. Theory Comput. 6, 2706-2713 (2010).

Uplatnenie výsledkov projektu

Vyvinutá teória a softvérový produkt DIRCCR12-OS sa už v súčasnosti uplatňujú v oblasti veľmi presných výpočtov molekulárnych vlastností, s predpovednou hodnotou.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

Hlavným výsledkom projektu je návrh a implementácia metódy pre veľmi presné výpočty energií a vlastností molekúl s predpovednou hodnotou. Vyvinutý prístup je založený na explicitnom zahrnutí medzielektrónovej koordináty do vlnovej funkcie, s využitím geminálu Slaterovho typu ako korelačného faktora. V rámci projektu sa tiež značná časť venovala štúdiu jedoelektrónovej relaxácii, v prípade, že sa pri samotných výpočtoch majú používať menšie výpočtové bázy. Neočakávane sa pri tom ukázala možnosť úplne nového prístupu pri orbitálovej optimalizácii založenej na nami navrhutej metóde postupných neunitárnych transformácií, ktoré nevyžadovali diagonalizačný krok v rámci riešenia modelu nezávislých častíc. Tento prístup sa ďalej rošíl i do druhého poriadku poruchovej teórie. V oblasti aplikácií týchto, ale aj iných ab initio metód sa hlavná pozornosť venovala presným výpočtom potenciálovej hyperplochy, ako i výpočtom protónovej afinity a enthalpie tvorby molekuly formaldehydu z hľadiska astrochémie. Moderné metódy sa tiež využili pri interpretácii vodíkových väzieb v dvojjadrových komplexoch vanádu.

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

The main result of this project is the development and implementation of a new method for highly accurate calculations of energies and properties of molecules, when a predictive power is expected. The developed approach is based on an explicit inclusion of the interelectronic coordinate into the wave function expansion, employing Slater type geminal as a correlation factor. In this context we have also turned our attention to the one-particle relaxation effects that become important as soon as smaller orbital basis sets are used within the computations. Unexpectedly, during this study, we encountered a new way of energy optimization procedure that is based on a sequence of non-unitary transformations, and, in the orbital optimization no diagonalization step was needed. This method has been first implemented within the independent particle approximation and later extended to second order perturbation theory. In the field of applications of these and related accurate ab initio methods, the main concern was calculation of accurate potential hypersurface together with the proton affinity and enthalpy of formation of the formaldehyde molecule, which was interesting from the astrochemical point of view. Up to date methods have been applied to interpret the hydrogen bond in binuclear complexes of vanadium, as well.

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

Zodpovedný riešiteľ

Prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.

V Bratislave 27.09.2012

Štatutárny zástupca príjemcu

Prof. RNDr. Karol Mičieta, PhD.

V Bratislave 27.09.2012

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu