



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

LPP-0252-07

Štúdium elektrónovej a atomárnej štruktúry kondenzovaných systémov ultrapresnými metódami kvantového Monte-Carla

Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Ivan Štich, DrSc**

Príjemca

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.
- 2.
- 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. M. Dubecký, R. Derian, L. Mitas, and I. Štich, J. Chem. Phys. 133, 244301 (2010) [IF 2009 3.093],
- 2.
- 3.
- 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. Ďalším uplatnením výsledkov bude ďalšia publikácia, ktorá je už v štádiu prípravy, ďalšie pozvané a príspevané príspevky na medzinárodných konferenciách, ktoré očakávame, ďalší doktorandi a diplomanti ktorí už sú alebo budú naviazaní aj na výsledky tohto projektu. Predpokladáme, že sa Dr. Derian po skončení postdoktorandského pobytu na NCSU vráti na FÚ a bude pokračovať vo vývoji a aplikácii techník kvantového Monte-Carla.

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. Projekt bol ukončený predčasne, vzhľadom na odchod Dr. Deriana na NCSU.

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. The project had to be aborted due to departure of Dr. Derian to NCSU.

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

Zodpovedný riešiteľ

prof. Ing. Ivan Štich, DrSc.

V Bratislave 28. 01. 2011

Štatutárny zástupca príjemcu

prof. Ing. Ivan Štich, DrSc.

V Bratislave 31. 01. 2011

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu