

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **LPP-0343-09**
Multireferenčná teória spriahnutých klastrov v R12 priblížení.

Zodpovedný riešiteľ **Prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc**
Príjemca **Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta,
84536 Bratislava**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta, 84536 Bratislava
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, v.v.i. AV CR, Prague, Czech Republic
2. Graduate School of System Informatics, Kobe University, Kobe, Japan
- 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. S. Kedzuch, O. Demel, J. Pittner and J. Noga: Multireference R12 Coupled Cluster Theory. "Recent Progress in Coupled Cluster Methods: Theory and Applications", eds. J. Pittner, P. Carsky and J. Paldus, (Springer, New York, Berlin, 2010), pp. 251-266
2. S. Kedzuch, O. Demel, J. Pittner, S. Ten-no and J. Noga: Multireference F12 Coupled Cluster Theory: The Brillouin-Wigner Approach with Single and Double Excitations, Chem. Phys. Letters, 511, 418-423 (2011)
3. O. Demel, S. Kedzuch, M. Svana, J. Pittner, and J. Noga: Explicitly correlated Mukherjees state specific coupled cluster method: Development and pilot applications,

- 4.
- 5.

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)

Cieľom práce postdoktoranda bola kombinácia multireferenčného prístupu v rámci teórie spriahnutých klastrov s explicitným zahrnutím elektrónovej korelácie do rozvoja vlnovej funkcie na úrovni MR-CCSD-R12 s uvažovaním rôznych korelačných faktorov. Tento zámer sa podarilo realizovať v štyroch postupných krokoch, i keď vývoj v tejto oblasti zďaleka nie je ukončený. V prvom kroku sme sa zamerali na kombináciu Brillouin-Wignerovej (BW) MR CC teórie, s využitím jednoduchej inter-elektrónovej koordináty (r_{12}) ako korelačného faktora. Metódu sme aplikovali na úrovni BW-MR-CCSD teda so zahrnutím mono a bi excitácií v exponenciálnom rozvoji vlnovej funkcie. V druhej fáze sme metódu implementovali s korelačným faktorom typu Slaterovho geminálu. V tretej fáze sme našu teóriu prepojili na multireferenčný prístup presadzovaný indickou školou D. Mukherjeeho (Mk), ktorá má tú výhodu, že výsledky nie sú zaťažené chybou závislou od počtu častíc. Na úrovni Mk-MR-CCSD sme použili Slaterov geminál ako korelačný faktor s parametrami zafixovanými na podmienku korelačného hrotu, čo umožňuje prechod k menším výpočtovým bázam. Konečne v poslednom období sme túto metódu rozšírili i o zahrnutie triexcitácií na aproximovanej úrovni cez zovšeobecnenú poruchovú teóriu s presnosťou do štvrtého poriadku. Metódy sme testovali na potenciálových krivkách a spektroskopických parametroch malých molekúl, pričom sa jasne ukázali výhody prístupu s explicitným zahrnutím elektrónovej korelácie na výrazne rýchlejšej konvergencii výsledkov s veľkosťou bázy smerom k presnej limite.

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

The aim of the work of the postdoctoral fellow was to combine the coupled cluster multireference approach with an explicit inclusion of the electron correlation into the wave function expansion at the level of MR-CCSD-R12 using diverse correlation factors. This aim has been fulfilled in four consecutive steps. Nevertheless, development in this field is yet not finished. The first phase was focused to a combination of Brillouin-Wigner MR-CC theory, where we used a linear inter-electronic coordinate as the correlation factor. The method has been implemented at the BW-MR-CCSD level, i. e. with inclusion of single and double excitations in the exponential expansion of the wave function. In the second step, we have implemented this method with the correlation factor of Slater type geminal. Third stage has been devoted to interconnection of our method with a multireference approach suggested by the Indian school of D. Mukherjee (Mk), whose great advantage is its size extensive property, i. e. proper dependence of the error on the system size. We have employed the cusp conditioned Slater-type geminal correlation factor, which enables using of smaller basis computational sets in explicitly correlated calculations. Finally, in the last period we have extended this method by approximate inclusion of the effects of triply-excited configurations within the generalized perturbation theory correct to fourth order. Methods have been tested on potential curves and spectroscopic parameters of small molecules, while the advantage of the explicit treatment of the electron correlation has been clearly demonstrated on the much better convergence pattern of the results with the size of the basis set towards the exact limit.

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 28.09.2012

Štatutárny zástupca príjemcu

Prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.

V Bratislave 28.09.2012

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu