

Rozwój i zastosowanie wieloreferencyjnych metod sprzężonych klasterów w opisie stanów podstawowych i wzbudzonych układów atomowych i molekularnych

Justyna Cembrzyńska

Zakład Mechaniki Kwantowej
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

9 września 2015

Główne cele pracy

- efektywne zastosowanie metody IH-FS-CC do opisu PEC;
- rozwój metody IH-FS-CC poprzez opracowanie i zaimplementowanie nowych modeli przybliżonych;

Metoda sprzężonych klasterów w ujęciu przestrzeni Focka (FS-CC)

Metoda sprzężonych klasterów:

- podejście jednoreferencyjne (CC):

$$H |\Psi_0\rangle = E_0 |\Psi_0\rangle$$

$$|\Psi_0\rangle = e^T |\Phi_0\rangle$$

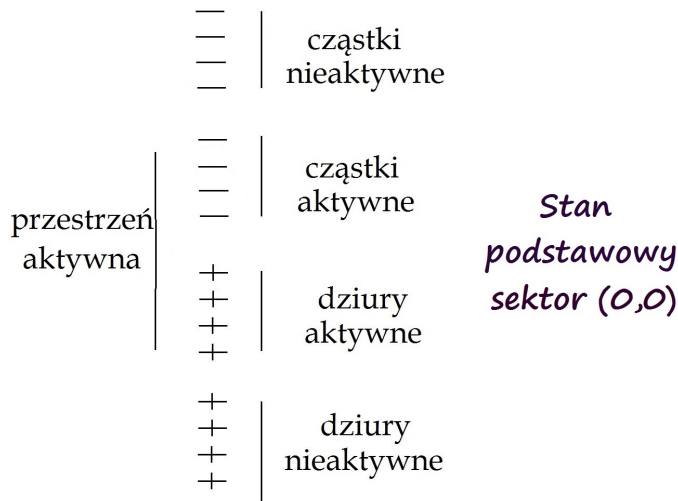
- podejście wieloreferencyjne (FS-CC):

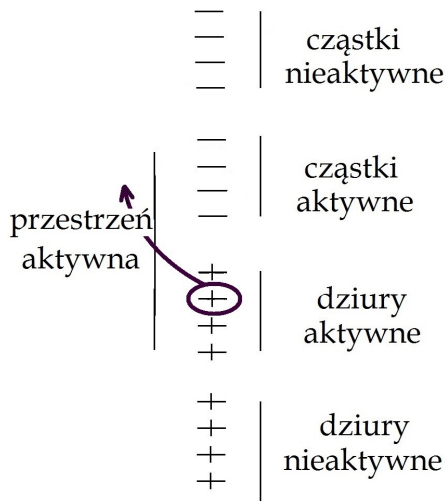
$$H \Psi_k = E_k \Psi_k, \quad k = 1, \dots, m_0$$

$$H_{\text{eff}} \Psi_k^0 = E_k \Psi_k^0$$

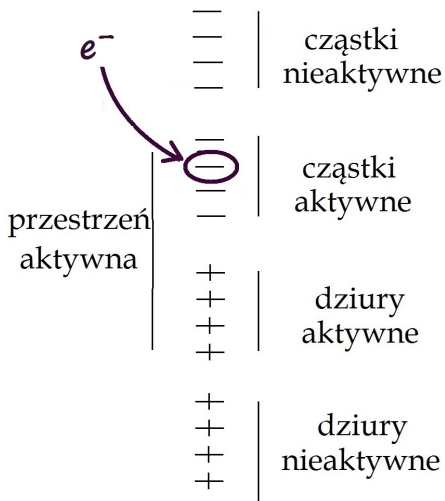
$$\Psi_k^0 = \sum_{m=1}^{m_0} C_{mk} \Phi_m$$

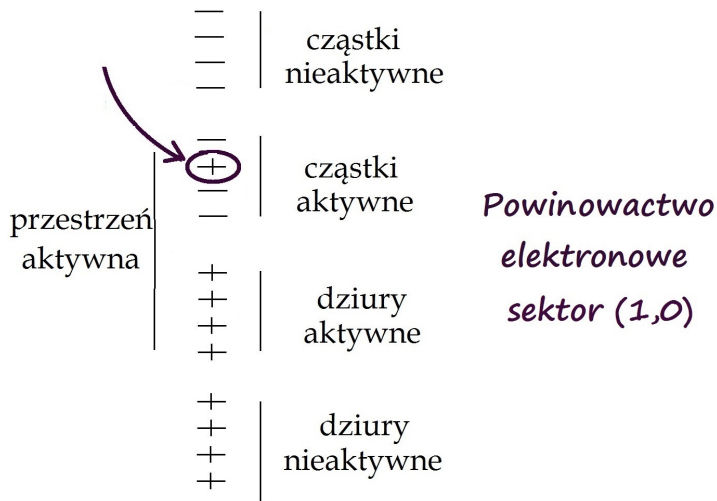
przestrzeń aktywna	—		cząstki nieaktywne
	—		
	—		
	—		
	—		cząstki aktywne
	—		
	—		
	—		
	+		dziury aktywne
	+		
	+		
	+		
	+		dziury nieaktywne
	+		
	+		
	+		

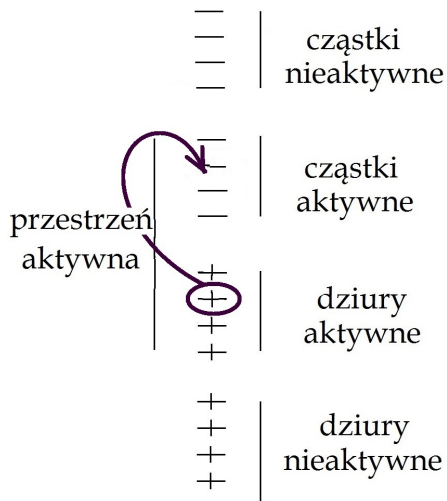


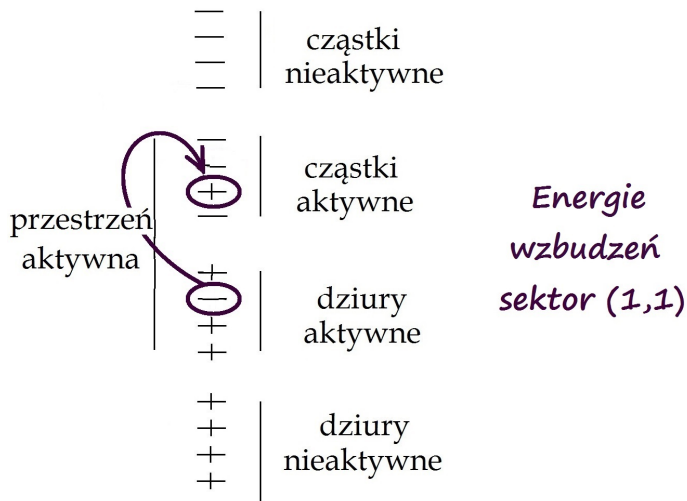












Wady metody FS-CC:

- ❶ problem ze zbieżnością;
- ❷ problem ze stanami intruderowymi;
- ❸ problem z rozwiązaniami alternatywnymi;

Metoda FS-CC w formalizmie hamiltonianu pośredniego (IH-FS-CC)

Metoda FS-CC

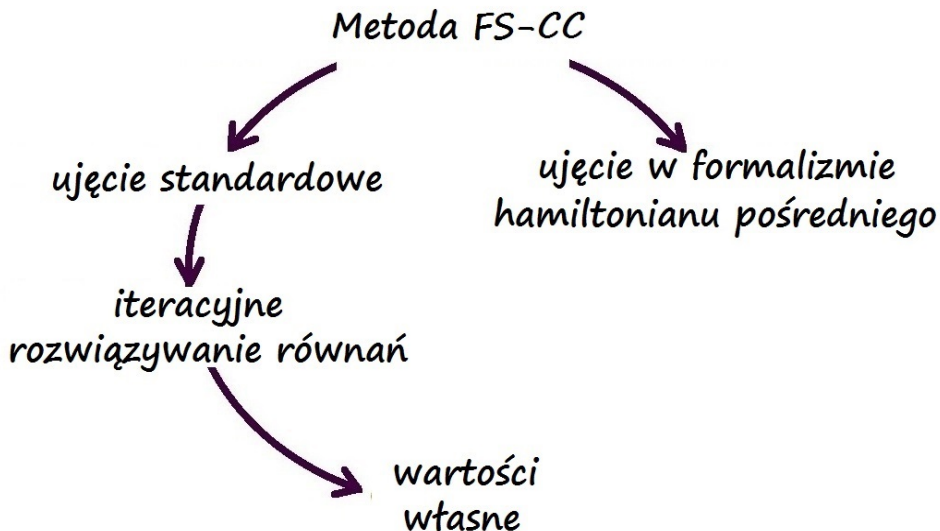
Metoda FS-CC

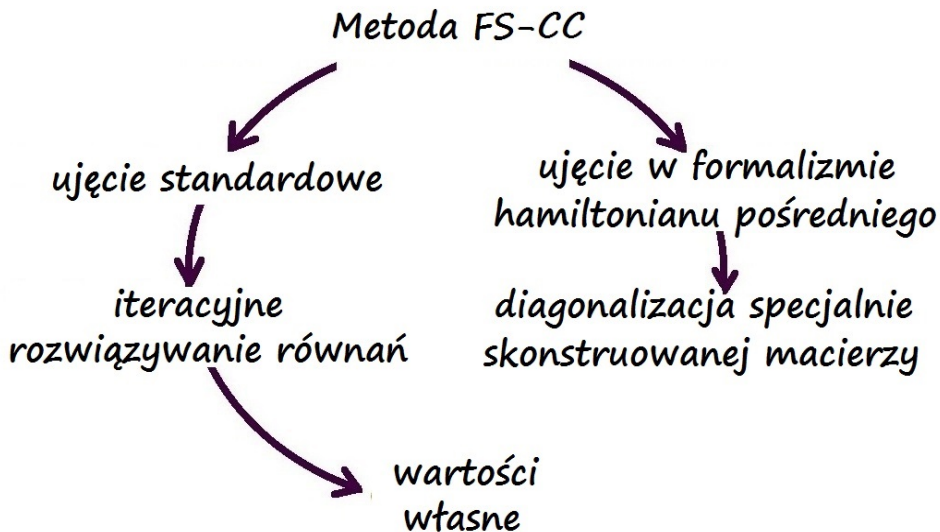


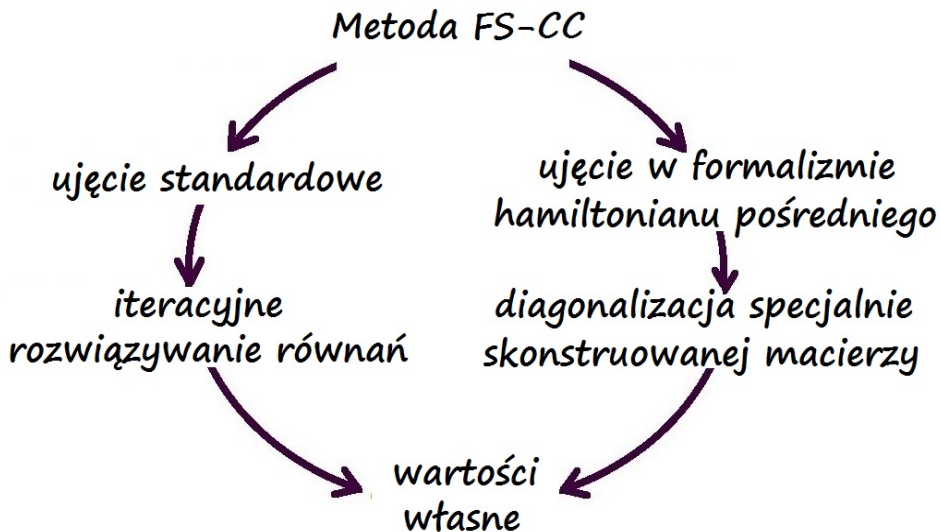
ujęcie standardowe









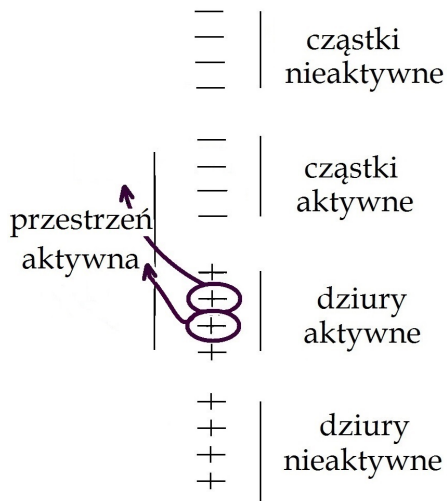


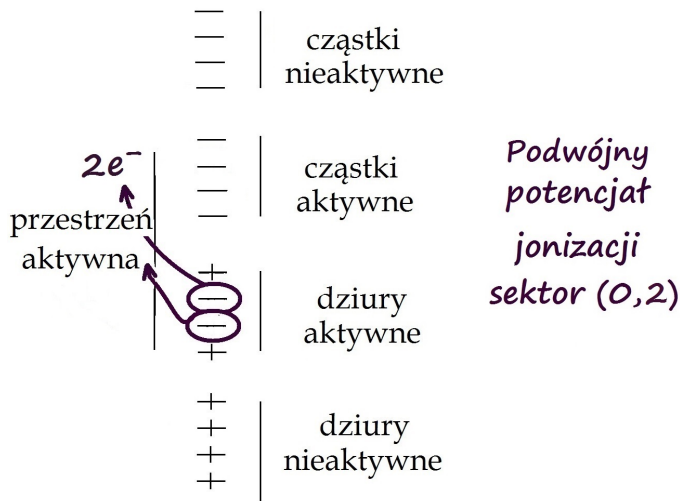
Rezultaty:

- 1 eliminacja problemów ze stanami intruderowymi;
- 2 rozwiązanie problemu ze zbieżnością;
- 3 brak problemu z alternatywnymi rozwiązaniami;

L. Meissner, *J. Chem. Phys.*, **108**, 9227 (1998).

Opis krzywych energii potencjalnej (PEC) metodą IH-FS-CC





Dysocjacja

podjęcie standardowe

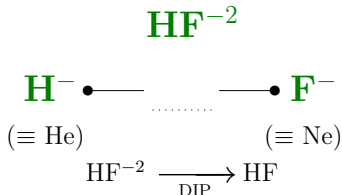
DIP

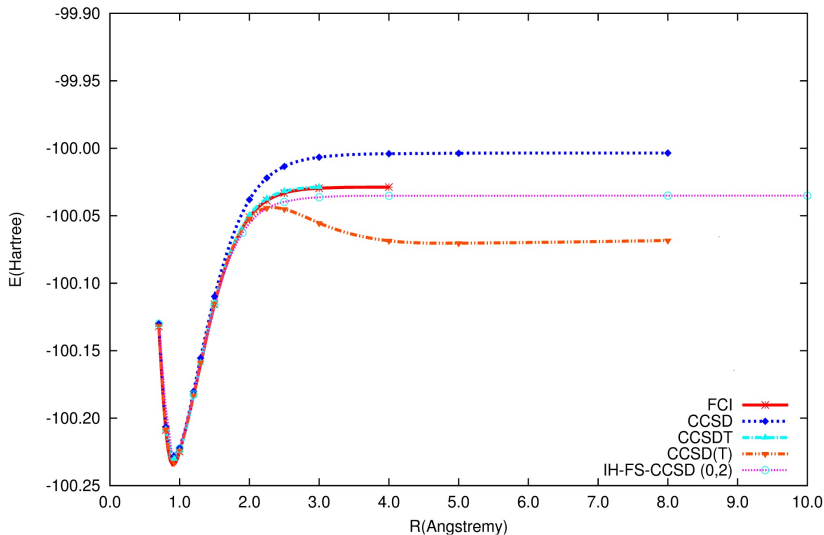
podwójny potencjał jonizacji

Molekuła obojętna



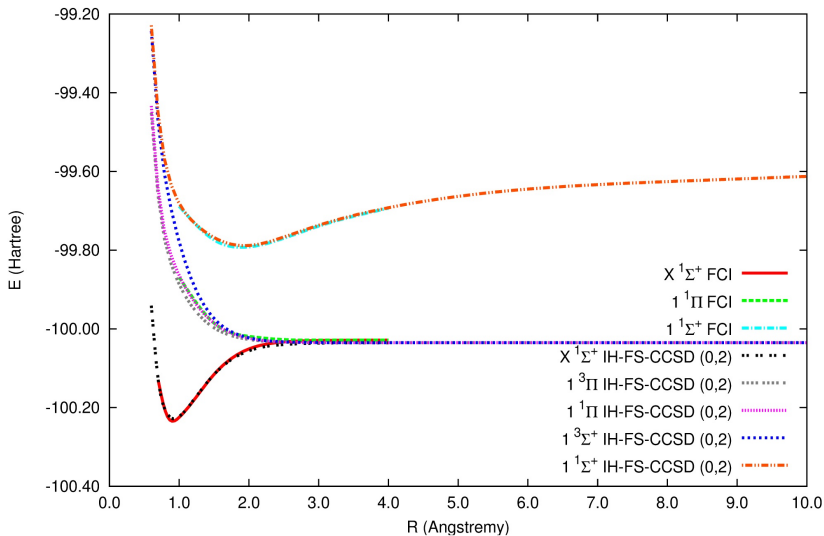
Molekuła z dołączonymi
dwoma elektronami





cząsteczka HF, stan podstawowy, baza cc-pVDZ
skorelowano wszystkie elektrony

PEC



cząsteczka HF, stan podstawowy i stany wzbudzone, baza cc-pVDZ
skorelowano wszystkie elektrony

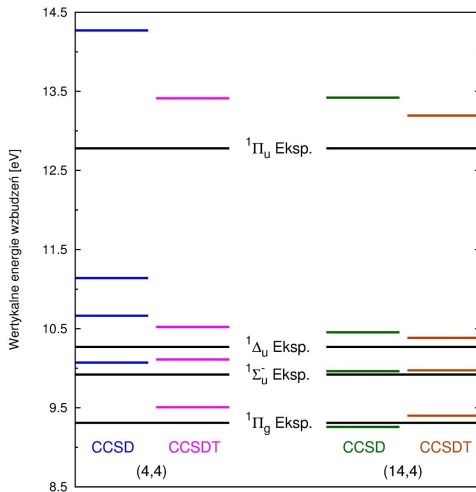
WNIOSKI:

- zastosowanie schematu DIP pozwala na uzyskanie PEC w całym zakresie odległości międzyjądrowych;
- metoda jest rozmiarowo ekstensywna;
- brak problemów ze zbieżnością i stanami intruderowymi;

Perturbacyjne oszacowanie efektów trójciałowych w metodzie IH-FS-CC

Motywacja

Rysunek 1: Wertykalne energie wzbudzeń dla cząsteczki N_2 uzyskane metodą IH-FS-CCSD oraz IH-FS-CCSDT przy użyciu bazy aug-cc-pVTZ. Wyniki dla dwóch przestrzeni odniesienia - (4,4) oraz (14,4) - ogólnie (m,n) gdzie m oznacza liczbę najniższych niezajętych aktywnych poziomów oraz n liczbę najwyższych zajętych aktywnych poziomów.



Kroki IH-FS-CCSD $_{\Delta}$ T

zdiagonalizowanie macierzy hamiltonianu
pośredniego [IH-FS-CCSD]



wartości i wektory własne



odtworzenie macierzy hamiltonianu efektywnego
[FS-CCSD]



nieiteracyjne włączenie efektów trójciałowych
opartych np. na rachunku zaburzeń Møllera-Plesseta

Nowe modele IH-FS-CCSD $_{\Delta}$ T – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla cząsteczki N₂ (R=2.068 a₀) obliczone w bazie cc-pVDZ (zamrożono dwa najniższe leżące orbitale, przestrzeń aktywna dla metody IH-FS-CC (2,4); w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC				Eksp. ^a	FCI ^b
	SD	SDT	SD	SD $_{\Delta(1,1)}$ T	SD $_{\Delta}$ T	SDT		
¹ Π_g	9,665 (0,081)	9,593 (0,009)	9,409 (-0,175)	9,525 (-0,059)	9,481 (-0,103)	9,621 (0,037)	9,31	9,584
¹ Σ_u^-	10,465 (0,136)	10,333 (0,004)	10,315 (-0,014)	10,322 (-0,007)	10,420 (0,091)	10,327 (-0,002)	9,92	10,329
¹ Δ_u	10,898 (0,180)	10,726 (0,008)	10,792 (0,074)	10,746 (0,028)	10,844 (0,126)	10,722 (0,004)	10,27	10,718
¹ Π_u	14,009 (0,401)	13,661 (0,053)	14,010 (0,402)	13,856 (0,248)	13,813 (0,205)	13,784 (0,176)	12,78	13,608
MAE	0,200	0,019	0,166	0,086	0,131	0,055		

^a J. Oddershede, N.E. Griener, G.H.F. Dierksen, *Chem. Phys.*, **97**, 303 (1985).

^b O. Christiansen, H. Koch, P. Jørgensen, J. Olsen, *Chem. Phys. Lett.*, **256**, 185 (1996).

Nowe modele IH-FS-CCSD $_{\Delta}$ T – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla cząsteczki N₂ (R=2.068 a₀) obliczone w bazie cc-pVDZ (zamrożono dwa najniżej leżące orbitale, przestrzeń aktywna dla metody IH-FS-CC (2,4); w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC				Eksp. ^a	FCI ^b
	SD	SDT	SD	SD $_{\Delta(1,1)}$ T	SD $_{\Delta}$ T	SDT		
¹ Π_g	9,665 (0,081)	9,593 (0,009)	9,409 (-0,175)	9,525 (-0,059)	9,481 (-0,103)	9,621 (0,037)	9,31	9,584
¹ Σ_u^-	10,465 (0,136)	10,333 (0,004)	10,315 (-0,014)	10,322 (-0,007)	10,420 (0,091)	10,327 (-0,002)	9,92	10,329
¹ Δ_u	10,898 (0,180)	10,726 (0,008)	10,792 (0,074)	10,746 (0,028)	10,844 (0,126)	10,722 (0,004)	10,27	10,718
¹ Π_u	14,009 (0,401)	13,661 (0,053)	14,010 (0,402)	13,856 (0,248)	13,813 (0,205)	13,784 (0,176)	12,78	13,608
MAE	0,200	0,019	0,166	0,086	0,131	0,055		

^a J. Oddershede, N.E. Griener, G.H.F. Dierksen, *Chem. Phys.*, **97**, 303 (1985).

^b O. Christiansen, H. Koch, P. Jørgensen, J. Olsen, *Chem. Phys. Lett.*, **256**, 185 (1996).

Nowe modele IH-FS-CCSD Δ T – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla atomu Ne obliczone w bazie aug-cc-pVDZ (przestrzeń aktywna dla metody IH-FS-CC (4,3); w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC				FCI ^a
	SD	SDT	SD	SD $\Delta^{(1,1)}$ T	SD Δ T	SDT	
$^1P^0$	19,041 (-0,206)	19,207 (-0,040)	18,991 (-0,256)	18,928 (-0,319)	19,127 (-0,120)	19,203 (-0,044)	19,247
1D	20,662 (-0,217)	20,841 (-0,038)	20,689 (-0,190)	20,543 (-0,336)	20,788 (-0,091)	20,844 (-0,035)	20,879
1P	20,751 (-0,227)	20,940 (-0,038)	20,757 (-0,221)	20,639 (-0,339)	20,884 (-0,094)	20,946 (-0,032)	20,978
1S	22,738 (-0,188)	22,843 (-0,083)	22,673 (-0,253)	22,962 (0,036)	23,207 (0,281)	22,790 (-0,136)	22,926
MAE	0,210	0,050	0,230	0,257	0,146	0,062	

^a H. Larsen, K. Hald, J. Olsen, P. Jørgensen, *J. Chem. Phys.*, **115**, 3015 (2001).

Nowe modele IH-FS-CCSD Δ T – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla atomu Ne obliczone w bazie aug-cc-pVDZ (przestrzeń aktywna dla metody IH-FS-CC (4,3); w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC				FCI ^a
	SD	SDT	SD	SD $\Delta^{(1,1)}$ T	SD Δ T	SDT	
$^1P^0$	19,041 (-0,206)	19,207 (-0,040)	18,991 (-0,256)	18,928 (-0,319)	19,127 (-0,120)	19,203 (-0,044)	19,247
1D	20,662 (-0,217)	20,841 (-0,038)	20,689 (-0,190)	20,543 (-0,336)	20,788 (-0,091)	20,844 (-0,035)	20,879
1P	20,751 (-0,227)	20,940 (-0,038)	20,757 (-0,221)	20,639 (-0,339)	20,884 (-0,094)	20,946 (-0,032)	20,978
1S	22,738 (-0,188)	22,843 (-0,083)	22,673 (-0,253)	22,962 (0,036)	23,207 (0,281)	22,790 (-0,136)	22,926
MAE	0,210	0,050	0,230	0,257	0,146	0,062	

^a H. Larsen, K. Hald, J. Olsen, P. Jørgensen, *J. Chem. Phys.*, **115**, 3015 (2001).

Nowe modele IH-FS-CCSD Δ T – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla cząsteczki CH₂ ($R = 1.102 \text{ \AA}$, $A = 104.7^\circ$) obliczone w bazie 6 – 31G* (funkcje kartezyjańskie, zamrożono najniższy i najwyższy orbital, zastosowano poziomy aktywne (3,2) dla metod IH-FS-CC; w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC				FCI ^a
	SD	SDT	SD	SD $\Delta^{(1,1)}$ T	SD Δ T	SDT	
¹ B ₁	1,668 (-0,011)	1,678 (-0,001)	1,512 (-0,167)	1,400 (-0,279)	1,531 (-0,148)	1,683 (0,004)	1,679
¹ A ₂	6,101 (0,008)	6,092 (-0,001)	6,052 (-0,040)	5,880 (-0,212)	6,003 (-0,089)	6,091 (-0,002)	6,093
¹ A ₁	9,120 (0,067)	9,056 (0,003)	9,161 (0,109)	9,075 (0,022)	9,108 (0,055)	9,054 (0,001)	9,053
MAE	0,029	0,002	0,105	0,171	0,098	0,002	

^a S. Hirata, M. Nooijen, R.J. Bartlett, *Chem. Phys. Lett.*, **326**, 255 (2000).

Nowe modele IH-FS-CCSD $_{\Delta}$ T – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla cząsteczki CH₂ ($R = 1.102 \text{ \AA}$, $A = 104.7^\circ$) obliczone w bazie 6 – 31G* (funkcje kartezyjańskie, zamrożono najniższy i najwyższy orbital, zastosowano poziomy aktywne (3,2) dla metod IH-FS-CC; w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC				FCI ^a
	SD	SDT	SD	SD $_{\Delta(1,1)}$ T	SD $_{\Delta}$ T	SDT	
¹ B ₁	1,668 (-0,011)	1,678 (-0,001)	1,512 (-0,167)	1,400 (-0,279)	1,531 (-0,148)	1,683 (0,004)	1,679
¹ A ₂	6,101 (0,008)	6,092 (-0,001)	6,052 (-0,040)	5,880 (-0,212)	6,003 (-0,089)	6,091 (-0,002)	6,093
¹ A ₁	9,120 (0,067)	9,056 (0,003)	9,161 (0,109)	9,075 (0,022)	9,108 (0,055)	9,054 (0,001)	9,053
MAE	0,029	0,002	0,105	0,171	0,098	0,002	

^a S. Hirata, M. Nooijen, R.J. Bartlett, *Chem. Phys. Lett.*, **326**, 255 (2000).

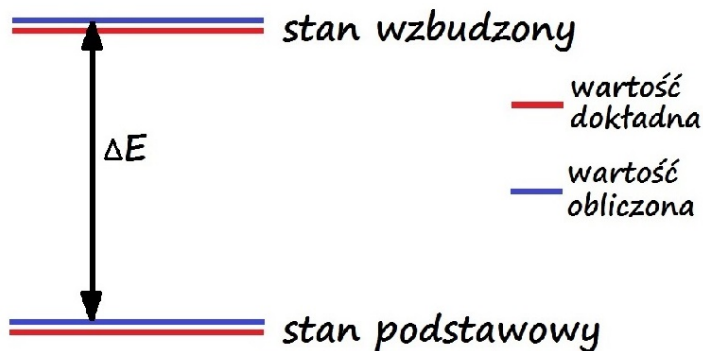
Nowe modele IH-FS-CCSD $_{\Delta T}$ – wnioski

WNIOSKI:

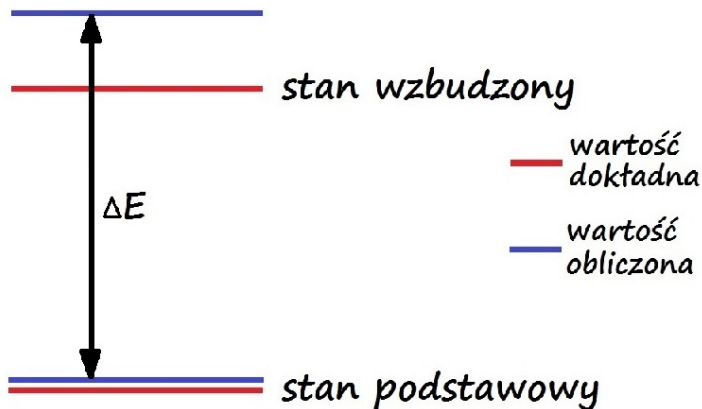
- podejście perturbacyjne nie daje satysfakcjonujących wyników – rezultaty o gorszej dokładności niż IH-FS-CCSD;
- poprawa wyników tylko dla niektórych układów i stanów w stosunku do IH-FS-CCSD;

Selektywny wybór trójciałowych operatorów klasterowych w metodzie IH-FS-CC

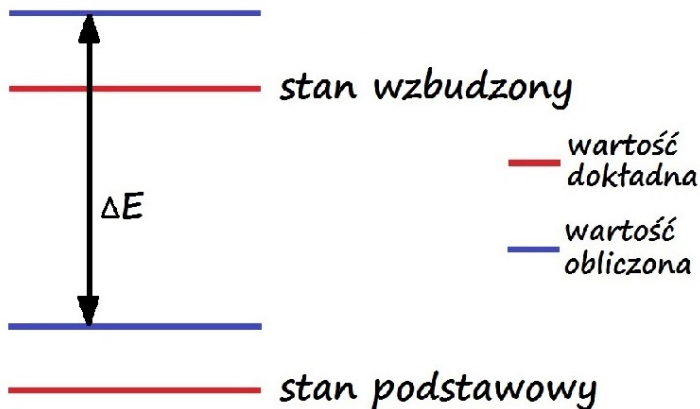
Motywacja



Motywacja



Motywacja



Nowe modele IH-FS-CCSDt – teoria

- sektor (0,0) – stan podstawowy
CCSDT $\Rightarrow$ CCSD lub CCSDT-3;
- sektor (0,1) – potencjał jonizacji
IH-FS-CCSDT;
- sektor (1,0) – powinowactwo elektronowe
IH-FS-CCSDT;
- sektor (1,1) – energia wzbudzenia
IH-FS-CCSD;

Nowe modele IH-FS-CCSDt – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla cząsteczki N₂ (R=2.068 a₀) obliczone w bazie cc-pVDZ (zamrożono dwa najniższe leżące orbitale, zastosowano poziomy aktywne (2,4) dla metod IH-FS-CC; w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC					Eksp. ^a	FCI ^b
	SD	SDT	SD	SDt _{SD}	SDt _{SDT-3}	SDt _{SDT}	SDT		
¹ Π _g	9,665 (0,081)	9,593 (0,009)	9,409 (-0,175)	9,338 (-0,246)	9,538 (-0,046)	9,555 (-0,029)	9,621 (0,037)	9,31	9,584
¹ Σ _u ⁻	10,465 (0,136)	10,333 (0,004)	10,315 (-0,014)	10,087 (-0,242)	10,331 (0,002)	10,353 (0,024)	10,327 (-0,002)	9,92	10,329
¹ Δ _u	10,898 (0,180)	10,726 (0,008)	10,792 (0,074)	10,475 (-0,243)	10,723 (0,005)	10,744 (0,026)	10,722 (0,004)	10,27	10,718
¹ Π _u	14,009 (0,401)	13,661 (0,053)	14,010 (0,402)	13,716 (0,108)	13,921 (0,313)	13,940 (0,332)	13,784 (0,176)	12,78	13,608
MAE	0,200	0,019	0,166	0,210	0,091	0,103	0,055		

^a J. Oddershede, N.E. Griener, G.H.F. Diercksen, *Chem. Phys.*, **97**, 303 (1985).

^b O. Christiansen, H. Koch, P. Jørgensen, J. Olsen, *Chem. Phys. Lett.*, **256**, 185 (1996).

Nowe modele IH-FS-CCSDt – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla cząsteczki N₂ (R=2.068 a₀) obliczone w bazie cc-pVDZ (zamrożono dwa najniższe leżące orbitale, zastosowano poziomy aktywne (2,4) dla metod IH-FS-CC; w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC					Eksp. ^a	FCI ^b
	SD	SDT	SD	SDt _{SD}	SDt _{SDT-3}	SDt _{SDT}	SDT		
¹ Π _g	9,665 (0,081)	9,593 (0,009)	9,409 (-0,175)	9,338 (-0,246)	9,538 (-0,046)	9,555 (-0,029)	9,621 (0,037)	9,31	9,584
¹ Σ _u ⁻	10,465 (0,136)	10,333 (0,004)	10,315 (-0,014)	10,087 (-0,242)	10,331 (0,002)	10,353 (0,024)	10,327 (-0,002)	9,92	10,329
¹ Δ _u	10,898 (0,180)	10,726 (0,008)	10,792 (0,074)	10,475 (-0,243)	10,723 (0,005)	10,744 (0,026)	10,722 (0,004)	10,27	10,718
¹ Π _u	14,009 (0,401)	13,661 (0,053)	14,010 (0,402)	13,716 (0,108)	13,921 (0,313)	13,940 (0,332)	13,784 (0,176)	12,78	13,608
MAE	0,200	0,019	0,166	0,210	0,091	0,103	0,055		

^a J. Oddershede, N.E. Griener, G.H.F. Diercksen, *Chem. Phys.*, **97**, 303 (1985).

^b O. Christiansen, H. Koch, P. Jørgensen, J. Olsen, *Chem. Phys. Lett.*, **256**, 185 (1996).

Nowe modele IH-FS-CCSDt – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla atomu Ne obliczone w bazie aug-cc-pVDZ (zastosowano poziomy aktywne (4,3) dla metod IH-FS-CC; w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC					FCI ^a
	SD	SDT	SD	SDt _{SD}	SDt _{SDT-3}	SDt _{SDT}	SDT	
¹ P ⁰	19,041 (-0,206)	19,207 (-0,040)	18,991 (-0,256)	19,163 (-0,084)	19,170 (-0,077)	19,172 (-0,075)	19,203 (-0,044)	19,247
¹ D	20,662 (-0,217)	20,841 (-0,038)	20,689 (-0,190)	20,851 (-0,028)	20,864 (-0,015)	20,865 (-0,014)	20,844 (-0,035)	20,879
¹ P	20,751 (-0,227)	20,940 (-0,038)	20,757 (-0,221)	20,931 (0,047)	20,944 (-0,035)	20,945 (-0,033)	20,946 (-0,032)	20,978
¹ S	22,738 (-0,188)	22,843 (-0,083)	22,673 (-0,253)	22,989 (0,063)	22,969 (0,043)	22,971 (0,045)	22,790 (-0,136)	22,926
MAE	0,210	0,050	0,230	0,055	0,042	0,042	0,062	

^a H. Larsen, K. Hald, J. Olsen, P. Jørgensen, *J. Chem. Phys.*, **115**, 3015 (2001).

Nowe modele IH-FS-CCSDt – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla atomu Ne obliczone w bazie aug-cc-pVDZ (zastosowano poziomy aktywne (4,3) dla metod IH-FS-CC; w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC					FCI ^a
	SD	SDT	SD	SDt _{SD}	SDt _{SDT-3}	SDt _{SDT}	SDT	
¹ P ⁰	19,041 (-0,206)	19,207 (-0,040)	18,991 (-0,256)	19,163 (-0,084)	19,170 (-0,077)	19,172 (-0,075)	19,203 (-0,044)	19,247
¹ D	20,662 (-0,217)	20,841 (-0,038)	20,689 (-0,190)	20,851 (-0,028)	20,864 (-0,015)	20,865 (-0,014)	20,844 (-0,035)	20,879
¹ P	20,751 (-0,227)	20,940 (-0,038)	20,757 (-0,221)	20,931 (0,047)	20,944 (-0,035)	20,945 (-0,033)	20,946 (-0,032)	20,978
¹ S	22,738 (-0,188)	22,843 (-0,083)	22,673 (-0,253)	22,989 (0,063)	22,969 (0,043)	22,971 (0,045)	22,790 (-0,136)	22,926
MAE	0,210	0,050	0,230	0,055	0,042	0,042	0,062	

^a H. Larsen, K. Hald, J. Olsen, P. Jørgensen, *J. Chem. Phys.*, **115**, 3015 (2001).

Nowe modele IH-FS-CCSDt – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla cząsteczki CH₂ ($R = 1.102 \text{ \AA}$, $A = 104.7^\circ$) obliczone w bazie 6 – 31G* (funkcje kartezjańskie, zamrożono najniższy i najwyższy orbital, zastosowano poziomy aktywne (3,2) dla metod IH-FS-CC; w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC					FCI ^a
	SD	SDT	SD	SDt _{SD}	SDt _{SDT-3}	SDt _{SDT}	SDT	
¹ B ₁	1,668 (-0,011)	1,678 (-0,001)	1,512 (-0,167)	1,640 (-0,039)	1,698 (0,020)	1,718 (0,039)	1,683 (0,004)	1,679
¹ A ₂	6,101 (0,008)	6,092 (-0,001)	6,052 (-0,040)	6,092 (-0,001)	6,151 (0,059)	6,171 (0,078)	6,091 (-0,002)	6,093
¹ A ₁	9,120 (0,067)	9,056 (0,003)	9,161 (0,109)	8,996 (-0,057)	9,062 (0,009)	9,083 (0,030)	9,054 (0,001)	9,053
MAE	0,029	0,002	0,105	0,032	0,029	0,049	0,002	

^a S. Hirata, M. Nooijen, R.J. Bartlett, *Chem. Phys. Lett.*, **326**, 255 (2000).

Nowe modele IH-FS-CCSDt – wyniki

Tabela: Singletowe, wertykalne energie wzbudzeń [eV] dla cząsteczki CH₂ ($R = 1.102 \text{ \AA}$, $A = 104.7^\circ$) obliczone w bazie 6 – 31G* (funkcje kartezjańskie, zamrożono najniższy i najwyższy orbital, zastosowano poziomy aktywne (3,2) dla metod IH-FS-CC; w nawiasach podano odchylenie od FCI).

Stan	EOM-CC		IH-FS-CC					FCI ^a
	SD	SDT	SD	SDt _{SD}	SDt _{SDT-3}	SDt _{SDT}	SDT	
¹ B ₁	1,668 (-0,011)	1,678 (-0,001)	1,512 (-0,167)	1,640 (-0,039)	1,698 (0,020)	1,718 (0,039)	1,683 (0,004)	1,679
¹ A ₂	6,101 (0,008)	6,092 (-0,001)	6,052 (-0,040)	6,092 (-0,001)	6,151 (0,059)	6,171 (0,078)	6,091 (-0,002)	6,093
¹ A ₁	9,120 (0,067)	9,056 (0,003)	9,161 (0,109)	8,996 (-0,057)	9,062 (0,009)	9,083 (0,030)	9,054 (0,001)	9,053
MAE	0,029	0,002	0,105	0,032	0,029	0,049	0,002	

^a S. Hirata, M. Nooijen, R.J. Bartlett, *Chem. Phys. Lett.*, **326**, 255 (2000).

WNIOSKI:

- selektywny wybór operatorów trójciałowych znacząco poprawia dokładność wyników względem IH-FS-CCSD;
- otrzymane rezultaty pozostają w bardzo dobrej zgodności z wartościami FCI;

Podsumowanie

Podsumowanie

- 1 metoda IH-FS-CCSD oparta na schemacie DIP stanowi bardzo dobre narzędzie do opisu PEC dla stanu podstawowego jak i stanów wzbudzonych;

Podsumowanie

- 1 metoda IH-FS-CCSD oparta na schemacie DIP stanowi bardzo dobre narzędzie do opisu PEC dla stanu podstawowego jak i stanów wzbudzonych;
- 2 opracowano nowe modele metody IH-FS-CCSDt, które spełniają warunki stawiane na początku;

Podsumowanie

- 1 metoda IH-FS-CCSD oparta na schemacie DIP stanowi bardzo dobre narzędzie do opisu PEC dla stanu podstawowego jak i stanów wzbudzonych;
- 2 opracowano nowe modele metody IH-FS-CCSD_t, które spełniają warunki stawiane na początku;
- 3 nowootzymane modele dają bardzo dobry jakościowy i ilościowy opis układów atomowych i molekularnych;



interdyscyplinarne
studia doktoranckie
matematyczno-
przyrodnicze



Projekt „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno – przyrodniczych” realizowany w ramach poddziałania 4.1.1 Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Dziękuję za uwagę



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

