

# Szingulett elektrongerjesztett állapotok elméleti vizsgálata a Coupled-Cluster módszer alkalmazásával

**Kánnár Dániel**, V. évf. Vegyész MSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Elméleti Kémiai Laboratórium

Témavezetők: **Prof. Dr. Szalay Péter** egyetemi tanár  
ELTE TTK Kémiai Intézet, Elméleti Kémiai Laboratórium

Munkánk során a szingulett elektrongerjesztett állapotokat tanulmányoztuk a különböző Coupled-Cluster módszerek teljesítőképességének meghatározása céljából. Vizsgálataink során 28 különböző funkciós csoportot tartalmazó szerves molekula közel 150 elektrongerjesztett állapotának leírása történt a CC2, CCSD és CC3 módszerek által. Az egyes módszerek által szolgáltatott gerjesztési energia és oszcillátorerősség értékeit részletesen megvizsgáltuk a magasabb elméleti szintet képviselő CC3 módszer eredményeihez képest.

Vizsgálataink eredményeként elmondható, hogy a gerjesztési energia szempontjából a CCSD módszer valamivel szisztematikusabb, mint a CC2 módszer, azonban az utóbbi lényegesen gazdaságosabb, így nagyobb rendszerek esetén ennek használata javasolható. Az oszcillátorerősségek esetén az LR és az EOM formalizmus közötti eltérés nem jelentős, a számítási erőforrás egy része megtakarítható, ha EOM típusú oszcillátor erősség értékeket számítunk.

[1] D. Kánnár and P. G. Szalay, J. Chem. Theory Comput. 2014, 10, 3757–3765