

# Az UHF egyenletek megoldása geminál alapú kezdőpályákkal

Földvári Dominic, III. évf. Kémia Bsc.

ELTE TTK Kémiai Intézet

Témavezetők: **Dr. Szabados Ágnes** egyetemi docens  
ELTE TTK Szervetlen Kémiai Tanszék

**Dr. Surján Péter** egyetemi tanár  
ELTE TTK Fizikai Kémiai Tanszék

A dolgozatban arra törekszünk, hogy az UHF egyenletek megoldásához alkalmas kezdőpályákat generáljunk olyan esetekben, amikor az UHF globális minimum megkeresése problémás. Ezt szem előtt tartva először megismerkedünk a geminál alapú hullámfüggvények tulajdonságaival, majd azokat felhasználva kvantitatív összefüggéseket vezetünk le. Be fogjuk látni, hogy az UHF hullámfüggvény erősen ortogonális kételektron függvény egységekből áll, így más geminál alapú hullámfüggvénnyel is kapcsolatba hozható.

Az APSG (Antisymmetrized Product of Strongly Orthogonal Geminals) és az UHF (Unrestricted Hartree-Fock) módszerek között sűrűségmátrixok és hullámfüggvények azonosításával is tudunk összefüggést teremteni. A drága APSG pályaoptimálást elhagyva ezek az összefüggések alkalmasak arra, hogy az UHF egyenletek iterációs megoldásához kezdőpályákat generáljunk. A módszer az általunk választott kanonikus vagy lokalizált RHF (Restricted Hartree-Fock) pályák UHF kezdőpályákká való forogtatásához keresi meg a szükséges koefficienseket. Ezeket a választott pályapárokból épített geminál lokális Schrödinger-egyenletének megoldásából kapjuk meg.

Az eddigiekben vizsgált molekulák ugyan nem tekinthetők igazán bonyolult eseteknek, mégis megfelelő kezdőértékek nélkül az iterációs eljárások nem feltétlenül vezetnek sikerre. Az eredményeinkről elmondhatjuk, hogy a konvergenciát minden esetben kevés lépésben értük el. Továbbá, azokban az esetekben, amikor az irodalomban több UHF megoldást publikáltak, a különböző energiájú minimumokat mi is megtaláltuk.

Távolabbi célként megfogalmazhatjuk, hogy a módszert bonyolultabb esetekre is szeretnénk alkalmazni, ahol a geminál alterek kiválasztása nem ilyen egyértelmű.