

Az általánosított Wick-tétel alkalmazása egy geminál alapú CCD módszer fejlesztésében

Margócsy Ádám, V. évf. vegyész mesterszakos hallgató

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezető: **Szabados Ágnes**, egyetemi docens
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Jelen munkában egy több determinánsból álló referenciafüggvényt alapuló, úgynevezett multireferencia (MR) korrelációs módszer fejlesztésének néhány lépését mutatjuk be. Az egy determinánsból kiinduló, úgynevezett single reference (SR) módszerek jellemzően rossz eredményt adnak, ha egyensúlytól távoli geometriájú molekulák leírására próbáljuk őket alkalmazni. Emiatt szükséges a MR korrelációs módszerek fejlesztése.

Vizsgálatainkat egy egyszerű MR hullámfüggvényen, a kételektron egységekből felépülő APSG hullámfüggvényen végezzük. Az elmélet kiindulópontja egy korábban javasolt MR Coupled-Cluster (CC) formalizmus[1].

Az elméleti háttér ismertetése után saját munkánkat mutatom be. Ez röviden a SR Coupled-Cluster Doubles (CCD) módszerben alkalmazott, úgynevezett, ring közelítés általánosítása MR esetre. A MR formalizmusban, a kezelendő tagok nagy száma miatt a levezetés kézzel nem lehetséges. Az egyenletek levezetésére ezért Python nyelven programot írtam. A program rövid bemutatása után jövőbeni terveinket ismertetem. Ezek: a program numerikus tesztelése és az eredmények összevetése egy rokon MR módszerrel, az APSG alapú random fázis közelítéssel (random phase approximation, RPA).

[1] B. Bandyopadhyay, D. Mukherjee, U. S. Mahapatra, B. Datta: State-Specific Multi-Reference Coupled Cluster Formulations: Two Paradigms Adv. Quant. Chem.; 30: 163-193; (1998)