

Metoda sprzężonych klasterów

Wykładowca: **dr Monika Musiał, prof UŚ**

Treści merytoryczne:

Definicja funkcji falowej w metodzie sprzężonych klasterów (CC), rozwinięcie wykładnicze, definicja operatora klasterowego, działanie operatora klasterowego na funkcję referencyjną, ogólna postać równań sprzężonych klasterów i wyrażenie na energię CC, twierdzenie Campella-Bakera-Hausdorffa, pojęcie wymiarowej ekstensywności. Diagramatyczna postać całek jedno- i dwu-elektronowych oraz operatorów klasterowych, ogólne zasady tworzenia diagramów w metodzie CC, diagramatyczna postać równań na T1 i T2 dla stanu hartree-fockowskiego (HF) w standardowym sformułowaniu. Nierównoważność linii otwartych w antysymetryzowanych diagramach równań sprzężonych klasterów. Systematyczne generowanie różnych rodzajów diagramów (diagramy spójne, diagramy niespójne, diagramy niezwiązane) pojawiających się w równaniach CC, eliminacja diagramów niespójnych i niezwiązanych. Alternatywna metoda wyprowadzania równań CC. Iteracyjne rozwiązywanie równań CC, generowanie diagramów wielociałowego rachunku zaburzeń (Many Body Perturbation Theory, MBPT) podczas iterowania równań CC. Metoda sprzężonych klasterów ze wzbudzeniami pojedynczymi i podwójnymi (model CCSD) dla stanu HF i nie-HF, metoda sprzężonych klasterów z pełnym uwzględnieniem wzbudzeń trzykrotnych (model CCSDT) i wzbudzeń czterokrotnych (model CCSDTQ). Pojęcie diagramu pośredniego i rzędu procedury obliczeniowej. Przekształcenie przez podobieństwo, definicja hamiltonianu transformowanego. Kwaziliniowa postać równań. Wyznaczanie własności molekularnych, optymalna geometria, częstości harmoniczne. Wyznaczanie energii wzbudzeń przy użyciu metody CC w połączeniu z metodą równań ruchu (Equation of Motion, EOM). Definicja operatora R, równanie

Schroedingera dla stanów wzbudzonych, postać równań na amplitudy R i energię wzbudzeń, forma równania własnego. Wykonanie testowych obliczeń energii stanu podstawowego, własności molekularnych i energii wzbudzeń.

Cele przedmiotu:

Nabycie umiejętności konstruowania równań CC (algebraicznie i diagramatycznie), wykonywania obliczeń, wyboru właściwego modelu CC, wyznaczania własności molekularnych.

Efekty kształcenia:

Po ukończeniu kursu student powinien opanować wiedzę z zakresu podstaw metody CC w stopniu pozwalającym na jej praktyczne zastosowanie w teoretycznych badaniach małych molekuł jak również być w stanie rozróżniać różne warianty metody CC.

Zalecana literatura:

1. L. Piela, Idee Chemii Kwantowej, PWN, Warszawa, 2003,
2. S. A. Kucharski, R. J. Bartlett, Advances in Quantum Chemistry, 18, 281-345 (1986),
3. R. J. Bartlett, M. Musiał, Rev. Mod. Phys., 79, 291-352 (2007).