

Výpočty stavově specifickou multireferenční Brillouin-Wignerovou metodou vázaných klastrů:

Singlet-triplet štěpení trimethylenmethanu

Výpočty podél reakční koordináty vzniku trimethylenmethanu z methylenicyklopropanu

Abstrakt

Aplikovali jsme původní MR BWCCSD metodu a její rozšířenou variantu MR BWCCSDT- α na výpočty singlet-tripletového štěpení trimetylenmetanu (TMM) a studium otevírání kruhu metylenicyklopropanu (MCP) konrotací a disrotací. Z MCP v pak obou případech vznikne excitovaný singletový stav TMM $^1 A_1$. Protože singletové stavy TMM a meziproducty během otevírání kruhu MCP vykazují multireferenční charakter, je použití MR metody nezbytné. Při výpočtech byla použita cc-pVDZ a cc-pVTZ báze. Výsledky jsme porovnali s experimentem a s dřívějšími výpočty metodou MCSCF a spin-flip CC.