

Název práce: Studium diradikálů multireferenčními metodami spřažených klastrů

Autor: Matej Švaňa

Katedra: Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Vedoucí diplomové práce: Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat.,
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského

Abstrakt: Tematem diplomové práce je studium isomerizace cyklopropánu přes trimetylénový/propylidénový diradikál pomocí jednak konvenční a jednak multireferenční metody vázaných klastrů. Hlavním cílem bylo srovnat konvergenci získaných energií s velikostí použité báze pro konvenční a explicitně korelované MRCC výpočty. Podle očekávání výsledky ukázaly, že explicitní korelace vede k výraznému zlepšení konvergence (cca o jedno kardinální číslo), což umožňuje výrazné úspory výpočetního času. Navíc výpočty pomocí MkCCSD(T)-F12/QZ a BWCCSD(T)-F12/QZ metod patří mezi ty nejsofistikovanější, jaké kdy byli na výpočet relativní energií cyklopropánu a trimetylénu/propylidénu použity.

Klíčová slova: explicitně korelované, spřažené klastry, multireferenční, isomerizace cyklopropánu, trimetylén, propylidén