

Porfyriny jsou důležitou skupinou molekul, která je intenzivně studována, jak experimentálně, tak výpočetně. Ale, přes veškerou snahu, u mnoha otázek stále nejsme schopni dosáhnout konzistentní shody mezi teorií a experimentem. Jednou z dosud nevyřešených otázek je charakter základního stavu molekuly Fe(II)-porfyrinu. Použili jsme model molekuly Fe(II)-porfyrinu, na kterém jsme studovali efekt změn geometrie na pořadí spinových stavů. Pomocí rozsáhlých DMRG-CASSCF výpočtů se zahrnutím dynamické korelace metodou TCCSD(T) se nám podařilo spojit efekt těchto geometrických změn s experimentálními daty výsledky, a předpovědět, že izolovaná molekula Fe(II)-porfyrinu bude mít kvintetní základní stav. Navíc, s použitím koordinovaného porfyrinu, náležící do skupiny komplexů železnatého porfyrinu s karbenem, ukazujeme, že i geometrické změny mimo porfyrinové jádro nemohou být přehlíženy.