

Новые возможности метода связанных кластеров в пространстве Фока: приближение CCSDT и моделирование сверхтонкой структуры

А. В. Олейниченко
А. В. Зайцевский
Л. В. Скрипников
Е. Элиав

alexvoley nichenko (at) gmail.com

http://qchem.pnpi.spb.ru

16 сентября 2020 г.

31 мая 2017

Fock Space Coupled Cluster Code (FSCC):

Проект программного комплекса для высокоточных расчетов электронной структуры и спектров молекул соединений тяжелых элементов

11 апреля 2018

FSCC: программный комплекс для высокоточных расчетов электронной структуры и спектров молекул соединений тяжелых элементов: [текущие возможности и перспективы](#)

17 апреля 2019


Релятивистский метод связанных кластеров для модельных пространств с несколькими квазичастицами: [на пути к эффективной реализации](#)

Сегодня

- ✓ переходим к **высоким секторам** пространства Фока: теория
- ✓ совершенно **новая программа – EXP-T**

Дальнейшие планы

- ✓ учет перестановочной симметрии амплитуд: CCSD 4x, CCSDT 36x
- ✓ модели CCSD+T(3), CCSDT-n, CCSDT во всех секторах
- ✓ сектора с тремя квазичастицами (код легко получить из SR-CCSDT)
- ✓ дальнейшие оптимизации OpenMP/CUDA параллелизма:
~~асинхронное~~ чтение с диска / выгрузка на GPU
- ✓ ~~регистрация ПО~~ и сайт



qchem.pnpi.spb.ru
Quantum Chemistry Laboratory

The EXP-T program Core restoration Effective potentials
English Русский

About us News Members Cooperation Publications Invited Talks and Reports Recent Posters Conference Supplementary

login

[Home](#)

The EXP-T program system

The EXP-T program package is designed for high-precision modeling of molecular electronic structure using the relativistic Fock space multireference coupled cluster method (FS-RCC). EXP-T is written from scratch in the C99 programming language and is currently focused on Unix-like systems.

The public version of the EXP-T source code is available under LGPL on GitHub:

[Download source code](#)

[Download manual \(pdf\)](#)

Electronic structure models implemented in EXP-T:

- single-point energy calculations with any point groups and (nearly) all [Hamiltonians](#), implemented in [DIRAC](#) (4c-DC, X2Cmmf, 2c-ECP, non-relativistic);
- ground state energy calculations: CCSD, CCSD(T), CCSDT-n (n=1,2,3), CCSDT models;
- FS-MRCCSD method for excited states is implemented for the (0h1p), (1h0p), (1h1p), (0h2p), (2h0p) Fock space sectors;
- FS-MRCC models for excited states accounting for triples (CCSDT-n (n=1,2,3), CCSDT) [\[2\]](#) are implemented for the (0h1p), (1h0p),

Первый публичный релиз

The screenshot shows the GitHub repository page for 'aoleynichenko/EXP-T'. The repository is a public repository with 4 commits. The file list includes folders for 'docs', 'examples', 'include', 'openbias', 'src', and 'test', and files for 'CMakeLists.txt', 'COPYING', 'COPYING.LESSER', and 'README.md'. The 'README.md' file is selected, showing the title 'The EXP-T program system' and a description: 'The EXP-T program package is designed for high-precision modeling of molecular electronic structure using the relativistic Fock space multireference coupled cluster method (FS-RCC). EXP-T is written from scratch in the C99 programming language and is currently focused on Unix-like systems. The public version of the EXP-T source code is available under LGPLv3.' On the right side, there are sections for 'Releases' (No releases published) and 'Packages' (No packages published). At the bottom, a 'Languages' section shows a bar chart with the following data: Fortran 49.0%, Assembly 26.2%, C 22.7%, Makefile 0.8%, C++ 0.6%, CMake 0.4%, and Other 0.3%.

File/Folder	Commit Message	Time Ago
docs	first public release	3 days ago
examples	first public release	3 days ago
include	first public release	3 days ago
openbias	first public release	3 days ago
src	first public release	3 days ago
test	first public release	3 days ago
CMakeLists.txt	first public release	3 days ago
COPYING	first public release	3 days ago
COPYING.LESSER	first public release	3 days ago
README.md	Update README.md	3 days ago

README.md

The EXP-T program system

The EXP-T program package is designed for high-precision modeling of molecular electronic structure using the relativistic Fock space multireference coupled cluster method (FS-RCC). EXP-T is written from scratch in the C99 programming language and is currently focused on Unix-like systems.

The public version of the EXP-T source code is available under LGPLv3.

Releases
No releases published

Packages
No packages published

Languages

- Fortran 49.0%
- Assembly 26.2%
- C 22.7%
- Makefile 0.8%
- C++ 0.6%
- CMake 0.4%
- Other 0.3%

● <https://github.com/aoleynichenko/EXP-T>

● но в публичном релизе нет CCSDT и сектора (0h,3p)!

[1] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, E. Eliav

Towards high performance relativistic electronic structure modelling: the EXP-T program package.

arXiv 2004.03682 (2020)

принята к публикации в *Commun. Comput. Inf. Sci.* (Springer)

[2] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, E. Eliav

Relativistic Fock space coupled cluster method for many-electron systems: non-perturbative account for connected triple excitations.

Symmetry, 12(7), 1101 (2020)

[3] A.V. Oleynichenko, L.V. Skripnikov, A. Zaitsevskii, E. Eliav, V.M. Shabaev

Diagonal and off-diagonal hyperfine structure matrix elements in KCs within the relativistic Fock space coupled cluster theory.

Chem. Phys. Lett. 756, 137825 (2020)

[4] V. Krumins, A. Kruzins, M. Tamanis, R. Ferber, A. Pashov, A. V. Oleynichenko, A.

Zaitsevskii, E. A. Pazyuk, A. V. Stolyarov

The branching ratio of intercombination $A^1\Sigma^+ \sim b^3\Pi \rightarrow a^3\Sigma^+ / X^1\Sigma^+$ transitions in the RbCs molecule: measurements and calculations.

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 256, 107291 (2020)

[1] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, E. Eliav

Towards high performance relativistic electronic structure modelling: the EXP-T program package.

arXiv 2004.03682 (2020)

принята к публикации в *Commun. Comput. Inf. Sci.* (Springer)

[2] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, E. Eliav

Relativistic Fock space coupled cluster method for many-electron systems: non-perturbative account for connected triple excitations.

Symmetry, 12(7), 1101 (2020)

[3] A.V. Oleynichenko, L.V. Skripnikov, A. Zaitsevskii, E. Eliav, V.M. Shabaev
Diagonal and off-diagonal hyperfine structure matrix elements in KCs within the relativistic Fock space coupled cluster theory.

Chem. Phys. Lett. 756, 137825 (2020)

[4] V. Krumins, A. Kruzins, M. Tamanis, R. Ferber, A. Pashov, A. V. Oleynichenko, A.

Zaitsevskii, E. A. Pazyuk, A. V. Stolyarov

The branching ratio of intercombination $A^1\Sigma^+ \sim b^3\Pi \rightarrow a^3\Sigma^+ / X^1\Sigma^+$ transitions in the RbCs molecule: measurements and calculations.

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 256, 107291 (2020)

I. Учет трехкратных возбуждений в кластерном операторе:
модели FS-CCSDT-n и FS-CCSDT

Уравнения метода FS-MRCC

- Волновой оператор:

$$\Omega = \{e^T\}$$

- Кластерный оператор T в секторе (h, p) пространства Фока:

$$T = \sum_{h,p} \sum_n T_n^{(h,p)} = T^{(0,0)} + T^{(0,1)} + T^{(1,0)} + T^{(1,1)} \dots$$

$$T^{(h,p)} = T_1^{(h,p)} + T_2^{(h,p)} + T_3^{(h,p)} + \dots$$

CCSD

CCSDT

- Уравнения на амплитуды оператора T :

$$[T^{(h,p)}, H_0] = (V\Omega - \Omega(V\Omega)_{cl})_{conn}^{(h,p)}$$

сложная конструкция из интегралов и амплитуд

- Эффективный гамильтониан:

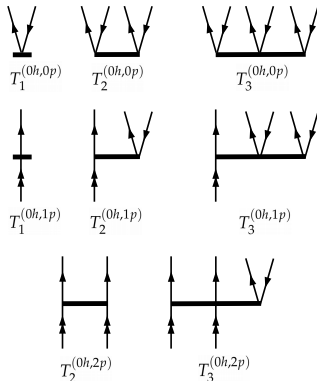
матрица
размерности M^{h+p} ,
 M – число активных
спинов

$$H_{eff}^{(h,p)} = P^{(h,p)} H \{e^T\} P^{(h,p)}$$

проектор на
модельное
пространство

Приближение CCSDT

пример: сектор (0h,2p)



- CCSD: нет triples-спектаторов = нет дифференциальной корреляции
- расширение модельного пространства не позволяет включить все необходимые triples-детерминанты

Например: энергии возбуждения Pb; ошибка IH-FS-CCSD составляет 200 – 600 см⁻¹*

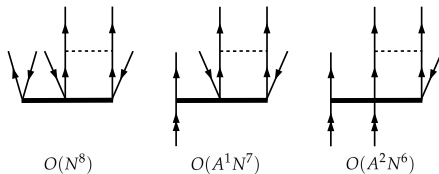
* A. Landau, E. Eliav, Y. Ishikawa, U. Kaldor, JCP 114, 2977 (2001)

Модель CCSDT – достижимый идеал?

В модели CCSDT амплитуды $T_3^{(h,p)}$ определены для секторов с $h + p = 3$

- аналогична модели FS-CCSD:
 $h + p \leq 3 \rightarrow$ полностью итеративное решение уравнений
 $h + p > 3 \rightarrow$ неитеративное решение в секторах выше $h + p = 3$
- программная реализация – сложно, но не ужасно
- **очень высокая точность**
 \rightarrow но помним про неполноту базиса, КЭД, недостатки псевдопотенциала
- **без нее нельзя рассчитывать** на прецизионные расчеты для систем с **тремя** открытыми оболочками!

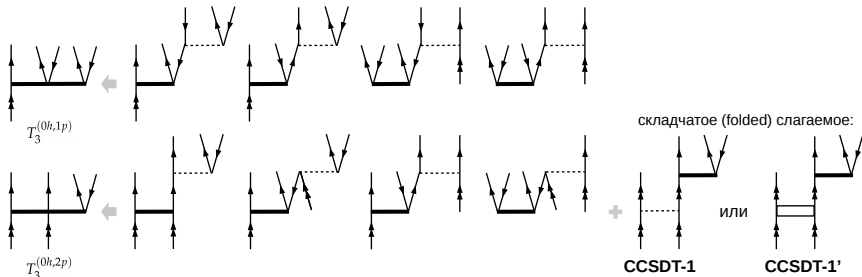
Основное препятствие:



Простейшее приближение: модель CCSD+T(3)

Идея: попробуем оценить амплитуды операторов T_3 , исходя из аргументов многочастичной теории возмущений

Амплитуды операторов T_3 оцениваются только один раз в конце расчета, используются «сошедшиеся» амплитуды T_1 и T_2



- вклад в T_3 вносят диаграммы, появляющиеся во 2м порядке ТВ
→ их вклады в H_{eff} имеют минимум 3й порядок

Но есть и недостаток: не работает, кроме сектора $(0h,0p)$ [Bernholdt, Bartlett, 1999]

S.R. Hughes, U. Kaldor, CPL 204, 339 (1993)

A. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, L. V. Skripnikov, E. Eliav, Symmetry, 12(7), 1101 (2020)

Теперь амплитуды $T_3^{(h,p)}$ оцениваются на каждом шаге решения амплитудных уравнений и вносят вклад в уравнения на амплитуды T_1 и T_2

CCSDT-1:

$$\left. \begin{aligned} [T_3, H_0] &\approx VT_2 \\ T_1, T_2 &\leftarrow f(V, T_1, T_2, T_3) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{повторяется до} \\ \text{достижения} \\ \text{сходимости} \end{array}$$

- вычислительная сложность ниже, чем у полного CCSDT
- **Но:** пересчет амплитуд T_3 на каждой итерации

CCSDT-2, CCSDT-3:

- просто выбрасываем N^8 -диаграммы
- слегка усложняются уравнения на T_3 за счет диаграмм с T_1 и T_2

SR-CCSDT-n: J. Noga, R. Bartlett, M. Urban. Chem. Phys. Lett., V. 134, P. 126 (1987)
FS-CCSDT-1: S. R. Hughes, U. Kaldor. Chem. Phys. Lett., V. 194, P. 99 (1992)

Энергии возбуждения и потенциалы ионизации Tl и Pb

Аддитивная схема:

$$E_{CCSDT} = E_{CCSD,LB} + (E_{CCSDT,SB} - E_{CCSD,SB})$$

Вклады triples оцениваются в относительно небольшом базисном наборе (SB)

LB = “большой базис”, опорный расчет:

полноэлектронный DCB расчет (TRAFS-3C)

эффективные QED потенциалы В. М. Шабаева и соавт.

базисные наборы – до i -функций включительно

SB = “меньший базис”, оцениваем вклады triples:

полулокальные 2c-RECP Н. С. Мосягина и А. В. Титова, 60e в остане

сжатые «ANO» базисные наборы

Tl: $6s7p5d5f4g3h2i$, Pb: $6s6p5d5f4g3h2i$

Закрытая оболочка – конфигурация $6s^2$:

$Tl^+ (0h,0p) \rightarrow Tl^0 (0h,1p)$

$Pb^{2+} (0h,0p) \rightarrow Pb^+ (0h,1p) \rightarrow Pb^0 (0h,2p)$

Активное пространство: только $6p$ -спиноры

Энергии возбуждения и потенциалы ионизации Tl и Pb

Table 1. Deviations of the calculated ionization potentials (IP) and excitation energies (EE) of neutral thallium and lead and lead cation (cm^{-1}) from the experimental values. FS-RCCSD/LB+T/SB stands for the combined scheme (8).

State		Exptl [84]	IH-FS- RCCSD [47]	FS- RCCSD/LB	SDT-1	FS-RCCSD/LB + T/SB				
						SDT-1'	SDT-2	SDT-3	SDT	
Tl, ground state $6s^2 6p \ ^2P_{1/2}$										
IP		49,266		-56	-38	-38	-204	-151	-32	
EE	$6s^2 6p \ ^2P_{3/2}$	7793		-112	23	23	1	9	-31	
Pb ⁺ , ground state $6s^2 6p \ ^2P_{1/2}$										
IP		121,245	-168	-143	-28	-28	-190	-158	-59	
EE	$6s^2 6p \ ^2P_{3/2}$	14,081	-196	-136	25	25	12	14	-42	
Pb, ground state $6s^2 6p^2 \ ^3P_0$										
IP		59,819	-543	364	-44	-285	-347	-336	7	
EE	$6s^2 6p^2 \ ^3P_1$	7819	-288	-302	76	5	-4	-3	-28	
	3P_2	10,650	-343	-235	130	129	97	102	13	
	1D_2	21,458	-605	-394	215	203	158	167	5	
	1S_0	29,467	-208	414	170	248	293	302	173	

[47] A. Landau, E. Eliav, Y. Ishikawa, U. Kaldor, J. Chem. Phys. 114, 2977 (2001)

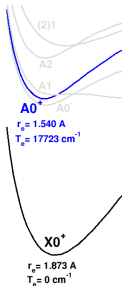
[84] J. E. Sansonetti, W. C. Martin, J. Phys. Chem. Ref. Data, 34, 1559 (2005)

*Аналогичная модели CCSD точность ($\sim 200\text{-}600 \text{ cm}^{-1}$) была также продемонстрирована в V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, Hyperfine Interact. 237, 160 (2016)

Спектроскопические константы молекулы TIH

Table 2. Equilibrium internuclear distances r_e , vibrational constants ω_e and term energies T_e for the $X0^+$ and $A0^+$ states of TIH.

	$X0^+$			$A0^+$		
	$r_e, \text{\AA}$	ω_e, cm^{-1}	T_e, cm^{-1}	$r_e, \text{\AA}$	ω_e, cm^{-1}	T_e, cm^{-1}
FS-RCCSD/LB	1.775	1,800	0	1.749	1,572	15,914
FS-RCCSD/LB + SDT-1/SB	1.862	1,378	0	1.812	1,222	17,899
FS-RCCSD/LB + SDT/SB	1.840	1,500	0	1.801	1,302	17,501
RKR($X0^+$) + FS-RCCSD/LB				1.909	1,018	15,948
RKR($X0^+$) + FS-RCCSD/LB + SDT-1/SB				1.829	1,218	17,931
RKR($X0^+$) + FS-RCCSD/LB + SDT/SB				1.846	1,138	17,567
Exptl. [86,87,90]	1.873	1,391	0	1.840	1,043	17,723



Опорный расчет:

TI: (14s13p10d7f6g5h5i), 2c-RECP

H: (7s4p3d2f) – несжатый aug-cc-pVQZ

Вклады triples:

TI: [6s7p5d5f4g3h2i], 2c-RECP

H: aug-cc-pVTZ

5s,5p-оболочки TI не коррелированы

FSCC: $\text{TIH}^{2+} \rightarrow \text{TIH}^+ \rightarrow \text{TIH}^0$

Сдвиги знамен-й: 0.1, 0.2, 0.3 ат.ед. для T_1, T_2, T_3 в нетривиальных секторах [0/1] Паде-экстраполяция по серии эфф гамильтонианов для $n=2-4$

Активное пространство: 3 виртуальные крамерсовские пары

BSSE: counterpoise correction

$X0^+$: см также A. V. Titov et al, IJQC, 81, 409 (2001)

Статическая поляризуемость атома Pb

$$\alpha_{a,b} = - \left. \frac{\partial^2 E}{\partial F_a \partial F_b} \right|_{F=0}$$

Table 3. Static scalar dipole polarizabilities for lead and its ions (in atomic units).

State		FS- RCCSD/LB	SDT-1	FS-RCCSD/LB + T/SB			SDT	Experiment	
				SDT-1'	SDT-2	SDT-3			
Pb ²⁺	6s ² 1S ₀	13.8	13.4	13.4	13.4	13.8	13.7	13.62(8) [94]	13.38(2) [95]
Pb ⁺	6s ² 6p ¹ 2P _{1/2}	22.7	22.5	22.5	22.6	22.8	22.7		
Pb	6s ² 6p ² 3P ₀	43.6	47.7	47.1	46.8	47.0	47.0	47.1(7.1) [96,97]	

Опорный расчет: базис (25s25p22d10f6g5h4i); 2c-RECP

Вклады triples: базис (13s11p10d2f2g), ANO-type *f,g*; 2c-RECP

FSCC: Pb²⁺ → Pb⁺ → Pb⁰

Активное пространство: только *6p*-спиноры

[94] M. E. Hanni et al, PRA 81, 042512 (2010); [95] C. B. Ross et al, J. Opt. Soc. Am. 66, 36 (1976);

[96] C. Thierfelder et al, PRA 78, 052506 (2008); [97] P. Schwerdtfeger et al, Mol. Phys. 117, 1200 (2019);

[98] S. G. Porsev et al, PRA 93, 012501 (2016).

Чего все это стоит?

Пример: атом Pb

Симметрия: $D_{\infty h}$

Число спинов: 358

CCSD: 49 мин

CCSDT-1: 1 сут 7 ч

CCSDT-2: 1 сут 6 ч

CCSDT-3: 1 сут 5 ч

CCSDT: 14 сут 11 ч

Макс. использование RAM для всех SDT-моделей: 572 Гб

Пример: молекула TlH

Симметрия: $C_{\infty v}$

Число спинов: 230

CCSD: 8 мин

CCSDT-1: 4 ч 51 мин

CCSDT: 16 ч 14 мин

Макс. использование RAM для всех SDT-моделей: 63 Гб

почти безнадежно, если хранить амплитуды T_3 на диске...

Продолжаем осознавать сектор (0h,3p): атомы La и Ac



Активное пространство: 6s5d – не требует сдвигов

La: (15s15p11d11f8g6h5i), 28e 2c-RECP

энергии уровней в см^{-1}

La, основное состояние $5d6s^2 \ ^2D_{3/2}$

Конф.	Терм	J	Эксп*	FS-CCSD	Откл
$5d6s^2$	2D	5/2	1053	1043	-10
$5d^2(^3F)6s$	4F	3/2	2668	3137	469
		5/2	3010	3474	464
		7/2	3495	3952	457
		9/2	4122	4571	449
$5d^2(^3F)6s$	2F	5/2	7012	8409	1397
		7/2	8052	9444	1392
$5d^2(^3P)6s$	4P	1/2	7231	8202	971
		3/2	7491	8449	958
		5/2	7680	8711	1031
$5d^2(^1D)6s$	2D	3/2	8446	9792	1346
		5/2	9184	10633	1449
$5d^2(^3P)6s$	2P	1/2	9044	10023	979
		3/2	9719	10894	1175
$5d^2(^1G)6s$	2G	9/2	9920	11031	1111
		7/2	9961	11101	1140

* J. E. Sansonetti, W. C. Martin, J. Phys. Chem. Ref. Data, 34, 1559 (2005)

Продолжаем осознавать сектор (0h,3p): атомы La и Ac



Активное пространство: $7s6d$ – не требует сдвигов

Ac: (15s14p10d8f6g5h4i), 60e 2c-RECP

энергии уровней в см^{-1}

Конф.	Терм	J	Эксп*	FS-CCSD	Откл
Ac ⁺ , основное состояние $7s^2 \ ^1S_0$					
6d7s	3D	1	4740	4974	234
		2	5267	5520	253
		3	7427	7699	272
6d7s	1D	2	9088	9438	350
6d ²	3F	2	13236	13637	401
		3	14949	15350	401
		4	16757	17216	459
		6d ²	3P	0	17737
1	19015	19613		598	
2	22199	23261		1062	
Ac, основное состояние $7s^2 6d \ ^2D_{3/2}$					
6d7s ²	2D	5/2	2231	2208	-23
6d ² 7s	4F	3/2	9217	9774	557
		5/2	9864	10426	562
		7/2	10906	11451	545
		9/2	12078	12641	563

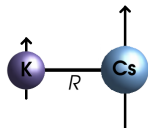
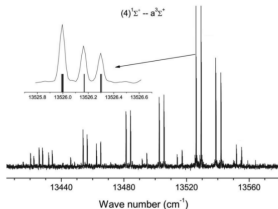
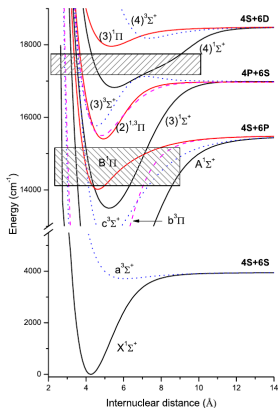
* J. E. Sansonetti, W. C. Martin, J. Phys. Chem. Ref. Data, 34, 1559 (2005)

Буду очень рад ответить на любые возникшие вопросы!

II. Моделирование сверхтонкого взаимодействия в молекуле KCs

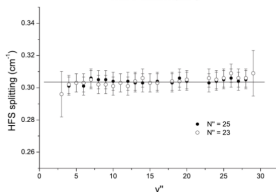
Постановка задачи

R. Ferber, I. Klincare, O. Nikolayeva, M. Tamanis, H. Knöckel, E. Tiemann, A. Pashov
 $X^1\Sigma^+$ and $a^3\Sigma^+$ states of the atom pair $K + Cs$ studied by Fourier-transform spectroscopy.
Phys. Rev. A, 80, 062501 (2009)

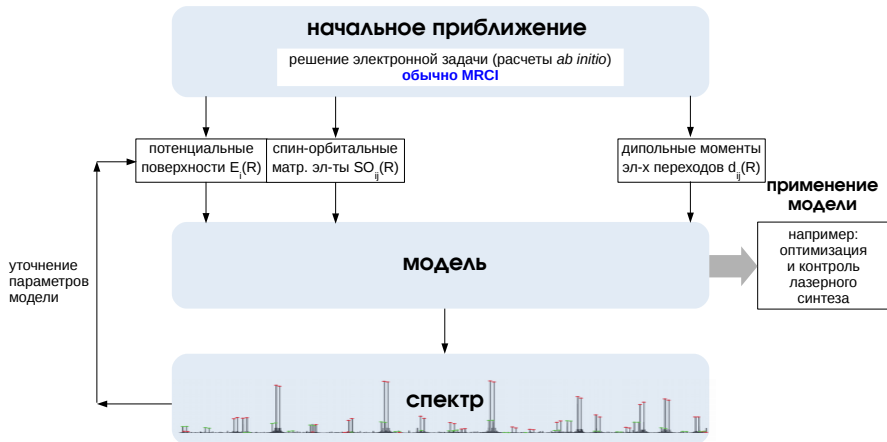


$$\mu_{^{133}\text{Cs}} = 2.58203 \mu_N$$

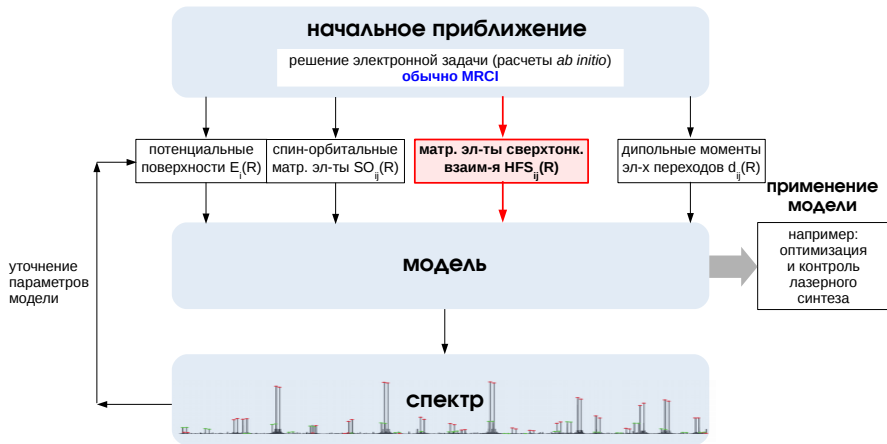
$$\mu_{^{39}\text{K}} = 0.39147 \mu_N$$



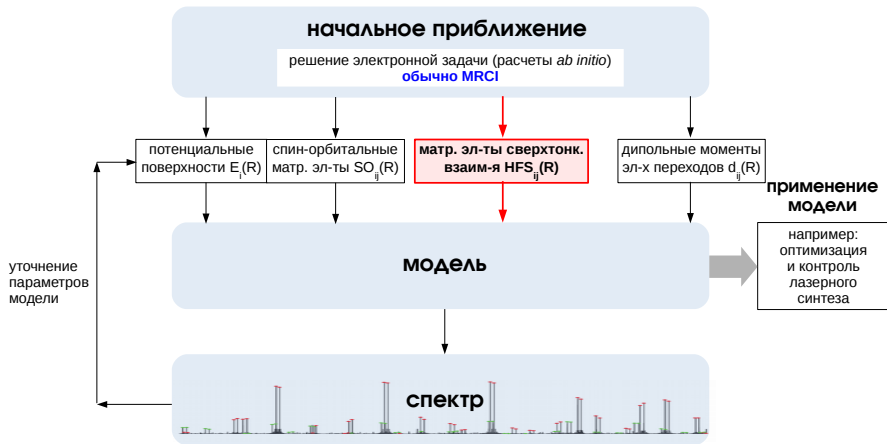
Постановка задачи



Постановка задачи



Постановка задачи



- Каков **характер зависимости** матричных эл-тов СТВ от R ?
- **Можно ли считать их постоянными** при больших R ?
→ моделирование резонансов Фешбаха, ...
- Зависимость от R – **простейшая модель химсдвига** основного свойства

- два уровня сверхтонкой структуры:

- ^{133}Cs $I = 7/2$ $\mu = 2.58203\mu_N$

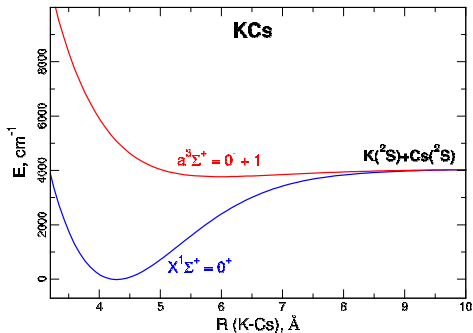
- ^{39}K $I = 3/2$ $\mu = 0.39147\mu_N$

→ нужны матричные элементы СТВ, индуцированной отдельно ^{133}Cs и ^{39}K

- можно не рассматривать квадрупольное СТВ
- оператор магнитно-дипольного СТВ:

$$H_{\text{hf}} = \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{T} \quad \boldsymbol{T} = \sum_i \frac{[\mathbf{r}_i \times \boldsymbol{\alpha}_i]}{r_i^3}$$

- СТВ наиболее важна для дисс. предела $\text{K}(^2S) + \text{Cs}(^2S)$
СТВ для других дисс. пределов на порядок меньше



- правила отбора для матричных элементов **электронной части оператора T** :

$$X^1\Sigma^+ \rightarrow 0^+$$

$$a^3\Sigma^+ \rightarrow 0^- \oplus 1$$

ненулевые матричные элементы:

$$0^+ - 0^-, 1 - 0^+, 1 - 1$$

$1 - 0^- \leftarrow$ не могут быть рассчитаны методом конечного поля!

Технические подробности

Релятивистская модель:

гамильтониан Дирака-Кулона, все электроны коррелированы

Базисные наборы:

K *18s 14p 6d 1f*

Cs *28s 22p 15d 5f*

построены так, чтобы воспроизводить атомные константы СТВ для состояний 2S , 2P , $^2P_{3/2}$ с погрешностью $< 3\%$

Решение задачи в секторе (0h,2p):

$KCs^{2+} \rightarrow KCs^+ \rightarrow KCs$

Активное пространство:

12 крамерсовских пар с $|m_j| = 1/2$

6 пар с $|m_j| = 3/2$

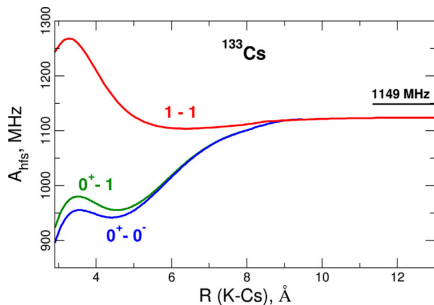
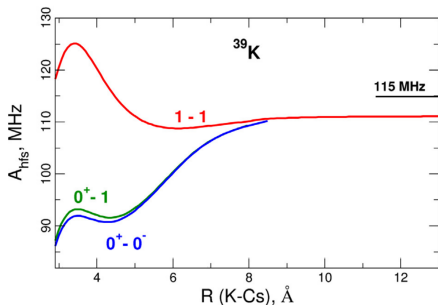
2 пары с $|m_j| = 5/2$

Сдвиги знаменателей:

действительная симуляция мнимого сдвига

$S_2^{0h2p} = -0.2$ ат.ед., $m = 3$

Зависимость матричных элементов СТВ от R



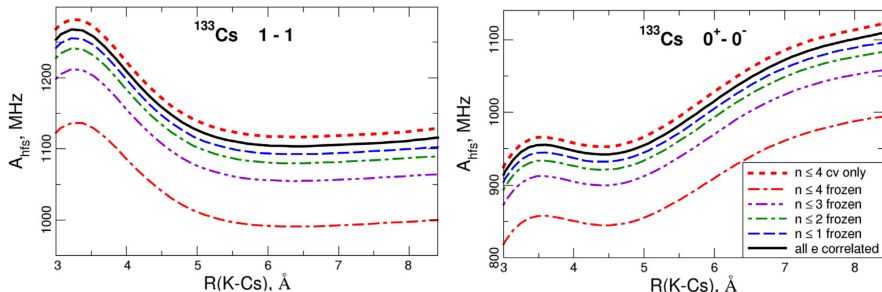
- точность расчета достаточна для выявления зависимости, погрешность не более 3–5%

не учтены эффекты КЭД, Бора-Вайскопфа, Брейта, triples, ...

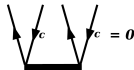
- $R < 8\text{Å}$: отклонение достигает 15%
- $R > 8\text{Å}$: матричные элементы почти не зависят от R
- вид функций универсален для всех щелочных атомов?

не очень трудно интерполировать аналитическими функциями?

Влияние учета остовной корреляции



- считаем, что остовная корреляция описывается амплитудами с двумя остовными (c) индексами:



- для замороженного остова $n \leq 4$ ошибка $\sim 10\%$
→ сравнима с типичной погрешностью восстановления в остова
- химсдвиги остовных свойств не зависят от учета остовной корреляции?

Спасибо за внимание!

выражаю огромную благодарность:

Е. А. Бормотовой

Т. А. Исаеву

С. В. Козлову

А. В. Столярову

А. В. Титову

R. Ferber

L. Visscher