**Ⅰ. monomer**

**1.1 O (Freeze\_core, Valencs\_orbital : (3,1),3)**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
| -74.78751307459339 | -74.7834227401651 |
| SPSA |  |  |
| -74.78751307462349 | -74.7851106019038 |
| L\_BFGS\_B |  |  |
|  | -74.78751307461255 | -74.78751300755863 |

**최소 에너지 계산 결과 :**

anstaz: UCCSD

optimizer: SPSA

Energy: -74.78751307462349

**1.2 O (Full\_atom)**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA | 텍스트, 그래프, 라인, 도표이(가) 표시된 사진  자동 생성된 설명 |  |
| -74.78751307459339 | -74.7834227401651 |
| SPSA | 텍스트, 라인, 그래프, 스크린샷이(가) 표시된 사진  자동 생성된 설명 |  |
| -74.78751307462349 | -74.7851106019038 |
| L\_BFGS\_B | 텍스트, 도표, 라인, 그래프이(가) 표시된 사진  자동 생성된 설명 |  |
|  | -74.78751307461255 | -74.78751300755863 |

**최소 에너지 계산 결과 :**

anstaz: UCCSD

optimizer: L-BFGS-B

Energy: -74.7875130608949

**2 Li (Full\_atom)**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
| 7.432419848997446 | -7.432419863575959 |
| SPSA |  |  |
| -7.432419879671084 | -7.432391311055545 |
| L\_BFGS\_B |  |  |
|  | -7.432419879671082 | -7.43241987948282 |

**최소 에너지 계산 결과 :**

anstaz: UCCSD

optimizer: SPSA

Energy: -7.432419879671084

**3. (Freeze\_core, Valencs\_orbital : (6,3),6)**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
| -1381.3044887486176 | -1381.2726874313214 |
| SPSA |  |  |
| -1381.3511645910166 | -1381.2840659292199 |
| L\_BFGS\_B |  |  |
|  | -1381.3541738893057 | -1381.3238127255668 |

**최소 에너지 계산 결과 :**

anstaz: UCCSD

optimizer: L-BFGS-B

Energy: -1381.3541738893057

**1. x=1**

**1) O-Li(가까운것, 결합)**

도표, 라인, 폰트, 디자인이(가) 표시된 사진

자동 생성된 설명

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
| -82.2364947294904 | -82.07987861544333 |
| SPSA |  |  |
| -82.25437361257852 | -82.08587673811537 |
| L\_BFGS\_B |  |  |
| -82.2573048975384 | -82.25724105884775 |

* **최소에너지 : -82.2573048975384 (UCCSD-L\_BFGS\_B)**
* [-82.2364947294904, -82.25437361257852, -82.2573048975384, -82.07987861544333, -82.08587673811537, -82.25724105884775]

**2)O-Li(먼것, 결합 X)**

도표, 라인, 디자인이(가) 표시된 사진

자동 생성된 설명

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
|  |  |
| SPSA |  |  |
|  |  |
| L\_BFGS\_B |  |  |
|  |  |

* **최소에너지 : -82.22028501 (UCCSD, L\_BFGS\_B)**

[-82.21895903429655, -82.21535975925605, -82.22028501813968, -82.21836106927313, -82.15217139620904, -82.22028501458318]

**3)Co-Li(결합 X)**

도표, 라인, 폰트, 디자인이(가) 표시된 사진

자동 생성된 설명

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
|  |  |
| SPSA |  |  |
|  |  |
| L\_BFGS\_B |  |  |
|  |  |  |

* **최소에너지** **: -1388.68546548 (Twolocal, L\_BFGS\_B)**

[-1388.0949272558062, -1388.6072051896872, -1388.6084022884377, -1388.5644732008523, -1388.4274728702496, -1388.6777760082325]

**4)O-O(결합 X)**

도표, 라인, 폰트, 스크린샷이(가) 표시된 사진

자동 생성된 설명

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
|  |  |
| SPSA |  |  |
|  |  |
| L\_BFGS\_B |  |  |
|  |  |

**최소에너지 : -149.54883311 (UCCSD, L\_BFGS\_B)**

[-149.34352552912154, -149.29625049988357, -149.5488331106427, -149.220752279301, -149.25451329489053, -149.50844501481302]

**5)Co-O(결합 O, 이중결합)**

도표, 라인, 디자인이(가) 표시된 사진

자동 생성된 설명

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
|  |  |
| SPSA |  |  |
|  |  |
| L\_BFGS\_B |  |  |
|  |  |

**최소에너지 : -1456.0126054372968 (UCCSD, L\_BFGS\_B)**

[-1455.1141326595564, -1455.7233910991172, -1456.0126054372968, -1455.4490144875654, -1455.3916964474563, -1456.0087701190753]

**6)Co-O(결합 O, 단일결합)**

라인, 도표, 그래프, 디자인이(가) 표시된 사진

자동 생성된 설명

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | UCCSD | Two Local |
| COBYLA |  |  |
|  |  |
| SPSA |  |  |
|  |  |
| L\_BFGS\_B |  |  |
|  |  |

**최소에너지 : -1456.1668621057645 (UCCSD, L\_BFGS\_B)**

[-1455.7186059142302, -1455.9021236301928, -1456.1668621057645, -1455.836697967516, -1455.7151943376211, -1456.0854735453845]

**정리 :**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **monomer** |  |  |  |
|  |  |  |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **dimer** | **(가까운것, 결합)** | **(먼것, 결합X)** | **(결합 X)** |
|  |  |  |  |
| **dimer** |  | **(이중 결합)** | **(단일 결합)** |
|  |  |  |  |