



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Mikuláš Matoušek

Srážky elektronů s dvouatomovými molekulami

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Karel Houfek, Ph.D.

Studijní program: fyzika

Studijní obor: obecná fyzika

Praha 2018

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Poděkování.

Název práce: Srážky elektronů s dvouatomovými molekulami

Autor: Mikuláš Matoušek

Ústav: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Karel Houfek, Ph.D., Ústav teoretické fyziky

Abstrakt: Abstrakt.

Klíčová slova: klíčová slova

Title: Collisions of electrons with diatomic molecules

Author: Mikuláš Matoušek

Institute: Institute of theoretical physics

Supervisor: RNDr. Karel Houfek, Ph.D., Institute of theoretical physics

Abstract: Abstract.

Keywords: key words

Obsah

Úvod	2
1 Teorie	3
1.1 Popis problému	3
1.1.1 Vibrační hladiny	3
1.1.2 Molekulová symetrie	4
1.2 Metody	4
1.2.1 Báze	4
1.2.2 Hartree-Fock	4
1.2.3 Multikonfigurační-SCF	5
1.2.4 Konfigurační interakce	5
1.2.5 Metoda spřažených clusterů	6
1.2.6 Kvantová teorie na mříži	6
2 Výsledky	7
Závěr	12
Seznam použité literatury	13
Seznam obrázků	14
Seznam tabulek	15
Seznam použitých zkratk	16
A Přílohy	17
A.1 První příloha	17

Úvod

Kvantová chemie je **!!!TODO!!!**

1. Teorie

1.1 Popis problému

Základní cíl kvantově chemických výpočtů je najít řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{\mathbf{H}}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (1.1)$$

kde $|\Psi\rangle$ je mnohačasticová vlnová funkce a $\hat{\mathbf{H}}$ je hamiltonián popisující danou molekulu, který při zanedbání magnetických i relativistických efektů nabývá tvaru

$$\hat{\mathbf{H}} = - \sum_j \frac{1}{2M_j} \Delta_j - \sum_e \frac{1}{2m_e} \Delta_e - \sum_{j,e} \frac{Z_j}{R_{je}} + \sum_{j_1,j_2} \frac{Z_{j_1}Z_{j_2}}{R_{j_1j_2}} + \sum_{e_1,e_2} \frac{1}{R_{e_1e_2}}, \quad (1.2)$$

kde sčítání přes j znamená sčítání přes jádra, e přes elektrony a sčítání přes dvojici indexů odpovídá sčítání přes všechny dvojice různých částic daného typu. R_{ab} pak značí $|\vec{x}_a - \vec{x}_b|$, kde $\vec{x}_{a,b}$ jsou polohy jednotlivých částic.

Protože se jedná o dost složitý problém na numerické výpočty, je nutné zavést několik zjednodušení.

Prvním je Born-Oppenheimerova aproximace, která vzhledem k řádově rozdílným hmotnostem jader a elektronů rozděluje pohyb jader a elektronů, čímž pádem $|\Psi\rangle$ závisí na souřadnicích jader jen parametricky, a nevystupují jako proměnné v řešené rovnici.

Další snahou je popis mnohaelektronové vlnové funkce $|\Psi\rangle := f(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_N)$, kde \vec{x}_i jsou polohy jednotlivých elektronů, pomocí součinu jednoelektronových funkcí $|\Psi\rangle := \phi_1(\vec{x}_1)\phi_2(\vec{x}_2) \dots \phi_N(\vec{x}_N)$. Pak ale narážíme na požadavek antisymetrie vlnové funkce vůči prohození libovolných 2 elektronů. Proto používáme vlnové funkce ve tvaru Slaterova determinantu

$$|\Psi\rangle_{\text{SD}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{x}_1) & \phi_2(\vec{x}_2) & \dots & \phi_N(\vec{x}_1) \\ \phi_1(\vec{x}_2) & \phi_2(\vec{x}_2) & & \phi_N(\vec{x}_2) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\vec{x}_N) & \phi_2(\vec{x}_N) & \dots & \phi_N(\vec{x}_N) \end{vmatrix} \quad (1.3)$$

Dále musíme tuto funkci rozvinout do nějaké báze. Úplná báze prostoru, na kterém pracujeme, by byla nekonečná. Proto musíme najít takovou bázi, která umožňuje problém řešit s dostatečně přesně s konečným počtem prvků.¹

1.1.1 Vibrační hladiny

Pokud u dvouatomové molekuly známe pro každou vzdálenost jader energii celého systému, nechovají se ani jádra jako klasická částice, ale chovají se jako jedna částice, pohybující se v získaném potenciálu. Je třeba ovšem pracovat v těžištové soustavě, čímž této částici je nutné přiřadit redukovanou hmotnost

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}, \quad (1.4)$$

kde M_1, M_2 jsou hmotnosti jader. Poté řešíme jednočasticovou Schrödingerovu rovnici pro pohyb v daném potenciálu.

¹I když pořád platí: „Čím víc, tím líp.“

1.1.2 Molekulová symetrie

Symetrie zkoumané molekuly se projeví symetrií jejího hamiltoniánu, která určitým způsobem promítne do symetrie vlnové funkce. Molekuly, jimiž se zabýváme, jsou heteronukleární diatomika, které patří do bodové grupy symetrie $C_{\infty h}$. Tato symetrie se projeví možností klasifikovat vlastní stavy pomocí symetrii vůči rotaci kolem spojnice jader, což odpovídá přiřazení určité hodnoty průmětu momentu hybnosti do této osy. Používá se značení molekulových stavů

$$^{2S+1}\Lambda^{+/-}, \text{ kde } \Lambda \in \{\Sigma, \Pi, \Delta \dots\} \quad (1.5)$$

a S je celkový spin molekuly. $+/-$ pak značí změnu znaménka při zrcadlení v rovině obsahující osu symetrie, kterou má význam uvažovat jen u Σ stavu.

Bohužel většina kvantově-chemických programů neumí pracovat s neabelovskými grupami, proto je třeba vzít největší abelovskou bodovou grupu do které molekula, kterou v tomto případě je C_{2h} , která má 4 ireducibilní reprezentace umožňující klasifikaci stavů, značené A_1, A_2, B_1, B_2 . Je tedy třeba před výpočtem hledaný stav molekuly vyjádřit v této reprezentaci.

1.2 Metody

1.2.1 Báze

Jako základ pro konstrukci řešení se v kvantové chemii berou orbitály vodíku podobných atomů, se středem na jednotlivých jádrech. Jejich lineární kombinací získáváme molekulové orbitály, kde optimalizací koeficientů této lineární kombinace se snažíme dosáhnout toho, aby získané orbitály byly vlastními stavy hamiltoniánu dané molekuly. Prvním krokem ovšem je napočítat skalární součiny mezi jednotlivými bázeovými vektory a matici hamiltoniánu v dané bázi. To se ukázalo být výpočetně náročné, neboť je třeba numericky řešit velké množství integrálů. Proto se radiální část aproximuje lineární kombinací několika gaussovských funkcí, kde již velká část integrálů má analytické vyjádření, čímž se řádově sníží čas výpočtu.

Bylo již vyvinuto nespočetné množství různých bází lišících se v přesnosti, výpočetní náročnosti i metodami, pro které jsou primárně určené. V našich výpočtech jsme používaly báze vyvíjené skupinou T. Dunninga²[1], které jsou určené pro výpočet post-Hartree-Fockovskými metodami a umožňují extrapolaci energie na limitu úplné báze. Pro popis vlnové funkce ve velkých vzdálenostech od jádra se pak přidávají takzvané difuzní funkce, čímž pak získáváme augmented báze³

1.2.2 Hartree-Fock

Hartree-Fockova metoda (HF), též nazývaná metoda self-konzistentního pole (SCF), je jedna z nejjednodušších ab-initio metod, spočívající v optimalizaci jedineho Slaterova determinantu. Dále uvažuje, že každý elektron se pohybuje ve

²cc-pVXZ, $X \in \{D, T, Q, 5 \dots\}$

³aug-cc-pVXZ

zprůměrovaném poli ostatních elektronů, které je stacionární. Definujeme pak Fockův operátor

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{F}}|\phi_{e_i}\rangle = & -\frac{1}{2m_e}\Delta|\phi_{e_i}\rangle - \sum_j \frac{Z_j}{R_{je_i}}|\phi_{e_i}\rangle + \sum_{e \neq e_i} |\phi_{e_i}\rangle \langle \phi_e | \frac{1}{R_{ee_i}} |\phi_e\rangle + \\ & + \sum_{e \neq e_i} \delta_{\sigma_e \sigma_{e_i}} |\phi_e\rangle \langle \phi_{e_i} | \frac{1}{R_{ee_i}} |\phi_e\rangle,\end{aligned}\tag{1.6}$$

pomocí něj pak zavádíme soustavu nazývanou Hartree-Fockovy rovnice

$$\hat{\mathbf{F}}|\phi_{e_i}\rangle = \epsilon_i|\phi_{e_i}\rangle.\tag{1.7}$$

Metoda postupuje iterativně, kdy pro nějaký počáteční odhad jednoelektronových funkcí vytvoříme Fockův operátor, u něj najdeme vlastní stavy, které pak použijeme pro vytvoření Fockova operátoru do další iterace. Řešení pak získáme, pokud funkce získané řešením (1.7) bude rovnat těm použitým ke konstrukci daného Fockova operátoru. Molekulové orbitály vystupující v Slaterově determinantu hledáme jako lineární kombinaci orbitalů atomových, kde variací koeficientů této kombinace hledáme řešení problému.

Zatím jsme zanedbávali efekt elektronového spinu. Ten je nutný uvažovat především v případě, že není obsazená valenční vrstva. Pak je nutné mít jednu sadu orbitalů pro každou projekci spinu zvlášť. Získáme pak metody nazývané restricted-Hartree-Fock (RHF), která uvažuje stejný tvar orbitalů pro obě projekce stejné a unrestricted-Hartree-Fock (UHF), která je má obecně různé pro každou projekci.

1.2.3 Multikonfigurační-SCF

Pro mnoho molekul je popis pomocí jednoho Slaterova determinantu nedostatečný. Jedna z možností, jak toto řešit, je hledat řešení jako lineární kombinaci několika determinantů

$$|\Psi\rangle := \sum_i C_i |\Psi_i\rangle_{\text{SD}},\tag{1.8}$$

kde optimalizujeme zároveň jednotlivé determinanty spolu s koeficienty rozvoje C_i , podobným způsobem jako u HF metody. Obesně se tato metoda nazývá multikonfigurační self-konzistentní pole (MC-SCF). Tato metoda vychází z molekulových orbitalů získaných z HF metody, které používá jako prvotní odhad řešení pro optimalizaci. Pokud jako vstupní odhad použijeme všechny možné Slaterovy determinanty, které je možné vytvořit z určité množiny molekulových orbitalů, nazývá se tato metoda complete active space-SCF (CAS-SCF).

1.2.4 Konfigurační interakce

Metoda Konfigurační interakce (CI) vychází z toho, že molekulové orbitály získané z Hartree-Fockovy metody tvoří úplnou bázi daného prostoru. V této bázi se pak snažíme hledat řešení ve tvaru

$$|\Psi\rangle := \sum_i C_i |\Psi_i\rangle_{\text{SD}},\tag{1.9}$$

Kde variujeme jen koeficienty rozvoje C_i .

Pokud použijeme všechny možné determinanty, které je možné získat v daném prostoru, získáváme metodu Full-CI (FCI). Touto metodou získáváme nejpřesnější řešení, za platnosti aproximací vyslovených v části 1.1 pro danou bázi. Tato metoda je ovšem výpočetně náročná.

Pokud použijeme funkci získanou metodou MC-SCF a vytvoříme z nich o funkce získané excitací elektronů do vyšších orbitalů, které používáme v rozvoji, získáme metodu multireferenční CI (MRCI). Je třeba ovšem specifikovat aktivní prostor, což je množina všech orbitalů, do kterých excitujeme. Určujeme jej zadáním počtu orbitalů pro jednotlivé symetrie.

1.2.5 Metoda spřažených clusterů

Nevýhodou metody CI je, že není takzvaně size-konzistentní⁴. To znamená, že energie získaná touto metodou, pokud se použije na systém se dvěma neinteragujícími podsystemy není rovna součtu energií z každého podsystemu získaných tou samou metodou.

Proto existuje metoda spřažených clusterů (CC), která zavádí excitační operátor

$$\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{T}_3 + \dots, \quad (1.10)$$

kde \hat{T}_i je lineární kombinace všech takových operátorů, které excitují i -elektronů z nějakého obsazeného orbitalu do nějakého neobsazeného. Koeficienty této lineární kombinace předem neznáme a řešení hledáme právě jejich optimalizací. Vlnovou funkci pak hledáme ve tvaru

$$|\Psi\rangle := \exp(\hat{T})|\Psi_{\text{HF}}\rangle \quad (1.11)$$

kde $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$ je základní stav získaný Hartree-Fockovou metodou. Bohužel použít úplný excitační operátor je příliš náročné,⁵ používají se jen první dva členy, čímž získáme metodu CCSD, případně případně třetí započítáme perturbativně, čímž získáme metodu CCSD(T).

1.2.6 Kvantová teorie na mříži

Kvantová teorie na mříži je velmi podobná metodě konečných prvků. Vlnovou funkci vyjádříme pomocí jejích hodnot v ekvidistantně rozmístěných bodech. Druhou derivaci aproximujeme pomocí hodnot v daných bodech

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x_i) \approx \frac{2\Psi(x_i) - \Psi(x_{i-1}) - \Psi(x_{i+1}))}{\Delta x^2}, \quad (1.12)$$

kde Δx je rozestup bodů. S touto aproximací můžeme přepsat Schrödingerovu rovnici jako maticový problém

$$-\frac{1}{2m\Delta x^2}\Psi(x_{i-1}) + \left(\frac{1}{m\Delta x^2} + V(x_i)\right)\Psi(x_i) - \frac{1}{2m\Delta x^2}\Psi(x_{i+1}) = E\Psi(x_i), \quad (1.13)$$

což je standardní problém vlastních čísel tridiagonální matice. Vlastní vektory jsou pak hodnoty vlnové funkce v daných bodech.

⁴Výjimku v tomto ohledu tvoří FCI, ale ta se nedá pro větší systémy použít

⁵Přece jen je to ekvivalentní FCI

2. Výsledky

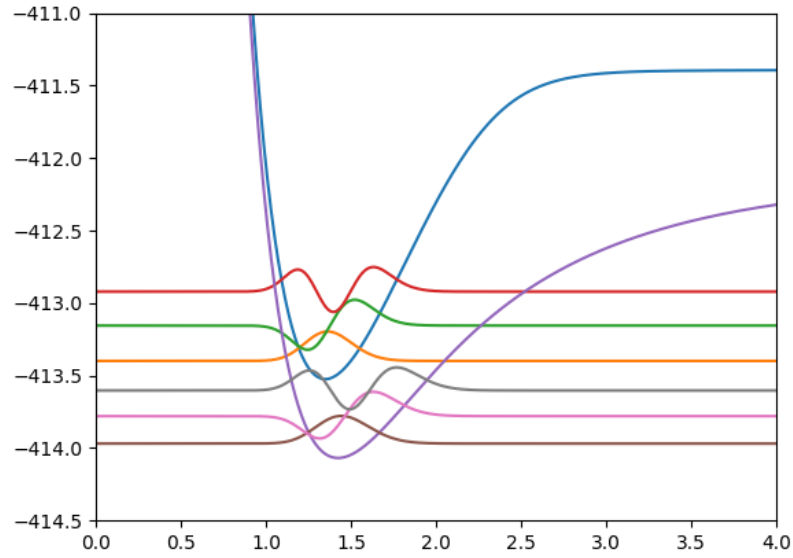
Zkoumali jsme molekuly BeH/BeH^- a OH/OH^- , protože se jedná o molekuly, které mají vázaný jak základní stav, tak anion, a zároveň se jedná o dostatečně malé systémy, aby bylo možné provádět výpočty přesnými metodami.

Ke kvantově chemickým výpočtům jsme používali program MOLPRO.[2][3]. Pro určitý soubor mezijaderných vzdáleností¹ jsme napočítali energii základního stavu molekuly pro fixovaná jádra, u základního stavu, tak u aniontu. Ze znalosti těchto křivek jsme poté zjišťovali parametry molekul, které je možné nalézt experimentálně, což jsou disociační energie aniontu i neutrální molekuly a elektronové afinity vázané i úplně disociované² molekuly. Protože ale experimentální data nejsou určena minimem potenciální energie molekuly, ale základní vibrační hladinou, bylo třeba napočítat energetické hladiny získaného potenciálu. K tomu jsme použili ??? metodu výpočtu na mříži ??? . Vzhledem k počtu geometrií, pro které jsme prováděli kvantově-chemické výpočty, který byl nedostatečný pro další numerické výpočty³, jsme získané hodnoty proložili kubickým splinem, ze kterého jsme pak interpolovali hodnotu potenciálu v několika stovkách bodů. Poté jsme numericky získali energetické hladiny v daném potenciálové křivce pro částici o (redukované) hmotnosti $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, kde m_1, m_2 jsou hmotnosti jednotlivých jader. Získané vlastní stavy pak odpovídají vibračním stavům dané molekuly.

¹cca 35 hodnot

²Ta odpovídá elektronové afinitě některého z prvků v molekule.

³a extrémní výpočetní náročnosti při případném výpočtu v dostatečném počtu geometrií



Obrázek 2.1: Nejnižší vibrační hladiny molekul BeH/BeH^-

Tabulka 2.1: BeH vibration states

Method	v_0 ["eV"]	v_1 ["eV"]	v_2 ["eV"]	v_3 ["eV"]
FCI /aug-cc-pVDZ	0.1240	0.3648	0.5953	0.8152
RCCSD(T) /aug-cc-pVDZ	0.1244	0.3661	0.5975	0.8186
CI 5,1,1,0 /aug-cc-pVDZ	0.1240	0.3649	0.5954	0.8153
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	0.1240	0.3648	0.5953	0.8152
FCI /aug-cc-pCVDZ	0.1245	0.3658	0.5966	0.8168
RCCSD(T) /aug-cc-pCVDZ	0.1249	0.3670	0.5988	0.8201
CI 5,1,1,0 /aug-cc-pCVDZ	0.1245	0.3658	0.5967	0.8169
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pCVDZ	0.1245	0.3658	0.5966	0.8168
FCI /cc-pVTZ	0.1254	0.3688	0.6021	0.8252
RCCSD(T) /cc-pVTZ	0.1257	0.3698	0.6039	0.8281
CI 6,2,2,0 /cc-pVTZ	0.1254	0.3688	0.6021	0.8252
FCI /aug-cc-pVTZ	0.1252	0.3682	0.6010	0.8234
RCCSD(T) /aug-cc-pVTZ	0.1255	0.3692	0.6028	0.8263
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	0.1254	0.3691	0.6032	0.8275
RCCSD(T) /aug-cc-pVQZ	0.1261	0.3713	0.6065	0.8314
CI 5,1,1,0 /aug-cc-pVQZ	0.1258	0.3704	0.6047	0.8287
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	0.1258	0.3704	0.6047	0.8286
CI 9,3,3,1 /aug-cc-pVQZ	0.1258	0.3704	0.6047	0.8286
CI 5,1,1,0 /aug-cc-pV5Z	0.1259	0.3707	0.6052	0.8293
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pV5Z	0.1259	0.3707	0.6052	0.8293

Tabulka 2.2: OH vibration states

Method	$v_0["eV"]$	$v_1["eV"]$	$v_2["eV"]$	$v_3["eV"]$
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVDZ	0.225	0.657	1.065	1.451
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	0.224	0.656	1.063	1.448
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	0.224	0.656	1.064	1.450
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	0.224	0.656	1.063	1.449
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVTZ	0.227	0.665	1.081	1.474
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	0.227	0.664	1.078	1.469
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	0.227	0.664	1.079	1.473
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	0.227	0.664	1.078	1.471
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVQZ	0.228	0.668	1.085	1.481
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	0.227	0.665	1.080	1.474
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	0.227	0.667	1.084	1.479
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	0.227	0.666	1.083	1.477

Tabulka 2.3: OH- vibration states

Method	$v_0["eV"]$	$v_1["eV"]$	$v_2["eV"]$	$v_3["eV"]$
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVDZ	0.228	0.662	1.069	1.449
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	0.221	0.647	1.047	1.426
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	0.224	0.654	1.059	1.440
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	0.224	0.653	1.057	1.437
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVTZ	0.212	0.636	1.047	1.448
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	0.221	0.649	1.054	1.439
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	0.225	0.661	1.072	1.460
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	0.225	0.660	1.070	1.457
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVQZ	0.212	0.637	1.051	1.455
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	0.224	0.657	1.065	1.450
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	0.225	0.663	1.077	1.467
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	0.225	0.662	1.075	1.463

Tabulka 2.4: BeH

Method	$E_a(BeH)[^{\circ}eV]$	$E_a(H)[^{\circ}eV]$	$D_a(BeH)[^{\circ}eV]$	$D_a(BeH^{-})[^{\circ}eV]$
Experimental:	0.70 ± 0.1	0.754195	2.18 ± 0.02	2.07
FCI /aug-cc-pVDZ	0.542	0.679	1.895	1.759
RCCSD(T) /aug-cc-pVDZ	0.534	0.679	1.888	1.744
CI 5,1,1,0 /aug-cc-pVDZ	0.536	-0.325	1.892	2.753
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	0.542	0.678	1.893	1.756
FCI /aug-cc-pCVDZ	0.546	0.679	1.901	1.769
RCCSD(T) /aug-cc-pCVDZ	0.538	0.679	1.894	1.753
CI 5,1,1,0 /aug-cc-pCVDZ	0.540	0.603	1.898	1.835
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pCVDZ	0.528	0.670	1.899	1.756
FCI /cc-pVTZ	0.326	-0.091	1.990	2.407
RCCSD(T) /cc-pVTZ	0.320	-0.091	1.983	2.394
CI 6,2,2,0 /cc-pVTZ	0.325	-0.091	1.988	2.404
FCI /aug-cc-pVTZ	0.570	0.734	2.010	1.847
RCCSD(T) /aug-cc-pVTZ	0.562	0.734	2.003	1.832
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	0.569	0.732	2.006	1.844
RCCSD(T) /aug-cc-pVQZ	0.566	0.746	2.034	1.854
CI 5,1,1,0 /aug-cc-pVQZ	0.565	0.744	2.038	1.858
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	0.572	0.746	2.039	1.865
CI 9,3,3,1 /aug-cc-pVQZ	0.573	0.746	2.039	1.867
CI 5,1,1,0 /aug-cc-pV5Z	0.567	0.750	2.044	1.862
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pV5Z	0.575	0.752	2.046	1.869

Tabulka 2.5: OH

Method	$E_a(OH)[^{\circ}eV]$	$E_a(O)[^{\circ}eV]$	$D_a(OH)[^{\circ}eV]$	$D_a(OH^-)[^{\circ}eV]$
Experimental:	1.82767	1.461	4.3914	5.120435
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVDZ	1.345	-1.637	4.054	7.035
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	1.559	1.084	4.090	4.565
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	1.609	1.182	4.104	4.531
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVDZ	1.614	1.188	4.101	4.527
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVTZ	1.376	-1.517	4.234	7.127
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	1.629	1.158	4.269	4.739
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	1.687	1.303	4.306	4.690
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVTZ	1.693	1.308	4.296	4.681
CI 4,1,1,0 /aug-cc-pVQZ	1.413	-1.480	4.292	7.185
CI 4,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	1.674	1.218	4.332	4.789
CI 6,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	1.733	1.362	4.369	4.740
CI 8,2,2,0 /aug-cc-pVQZ	1.740	1.368	4.359	4.730

Závěr

Seznam použité literatury

- [1] Thom H. Dunning. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. i. the atoms boron through neon and hydrogen. *The Journal of Chemical Physics*, 90(2):1007–1023, 1989.
- [2] H.-J. Werner, P. J. Knowles, G. Knizia, F. R. Manby, and M. Schütz. Molpro: a general-purpose quantum chemistry program package. *WIREs Comput Mol Sci*, 2:242–253, 2012.
- [3] H.-J. Werner, P. J. Knowles, G. Knizia, F. R. Manby, M. Schütz, P. Celani, T. Korona, R. Lindh, A. Mitrushenkov, G. Rauhut, K. R. Shamasundar, T. B. Adler, R. D. Amos, A. Bernhardsson, A. Berning, D. L. Cooper, M. J. O. Deegan, A. J. Dobbyn, F. Eckert, E. Goll, C. Hampel, A. Hesselmann, G. Hetzer, T. Hrenar, G. Jansen, C. Köppl, Y. Liu, A. W. Lloyd, R. A. Mata, A. J. May, S. J. McNicholas, W. Meyer, M. E. Mura, A. Nicklass, D. P. O’Neill, P. Palmieri, D. Peng, K. Pflüger, R. Pitzer, M. Reiher, T. Shiozaki, H. Stoll, A. J. Stone, R. Tarroni, T. Thorsteinsson, and M. Wang. Molpro, version 2012.1, a package of ab initio programs, 2012. see.

Seznam obrázků

2.1	Nejnižší vibrační hladiny molekul BeH/BeH ⁻	8
-----	--	---

Seznam tabulek

2.1	BeH vibration states	8
2.2	OH vibration states	9
2.3	OH- vibration states	9
2.4	BeH	10
2.5	OH	11

Seznam použitých zkratek

A. Přílohy

A.1 První příloha