**Ошибки суперпозиции базисных наборов в явнокоррелированном методе CCSD(T)(F12): изучение на примере димера воды**

***Беликов Владимир Владимирович
Бохан Денис Александрович
Трубников Дмитрий Николаевич***

*Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,
Россия, Москва**Vladimir.Belikov@inbox.ru*

В квантово-химических расчётах различных систем использование небольших базисов приводит к появлению ошибки суперпозиции базисного набора. Но в то же самое время использование больших базисов сопровождается увеличением количества требуемых ресурсов для проведения расчётов. Цель данной работы – анализ ошибок суперпозиции базиса для явнокоррелированного метода CCSD(T)(F12) с целью изучения возможности применения небольших базисов для описания слабосвязанных систем с водородными связями.

Все расчёты были выполнены с использованием программного комплекса ACES II; использовалась версия метода CCSD(T)(F12), основанная на условиях заострения и сформулированная в приближении B. Все многоэлектронные интегралы были вычислены с использованием псевдоспектральных численных квадратур, используя радиальные и угловые решётки с 30 и 50 точками. Значение Слетеровской экспоненты равно γ = 1.5. В данной работе использовались расширенные базисы Даннинга aug-cc-PCVDZ и aug-cc-PCVTZ. Объект исследований – димер воды.

Энергии корреляции, полученные с помощью явнокоррелированного метода CCSD(T)(F12), демонстрируют быструю сходимость по угловому моменту использованного базиса благодаря включению геминалей Слетеровского типа.

При использовании явнокоррелированно метода было получено значительное уменьшение ошибки суперпозиции базиса. Внесение противовесных поправок улучшает точность полученного равновесного межмолекулярного расстояния. После исправления суперпозиционной ошибки результаты в традиционном методе CCSD(T) перестают соответствовать экспериментальному значению энергии диссоциации димера воды, тогда как соответствующие оценки CCSD(T)(F12) находятся в пределах ошибки экспериментального результата, равного 5.4 ± 0.7 ккал/моль.

Таким образом, CCSD(T)(F12) метод может стать хорошим инструментом для изучения слабосвязанных молекулярных комплексов.

**Литература**

1. V.V. Belikov, D.A. Bokhan, D.N. Trubnikov; Estimating the Basis Set Superposition Error in the CCSD(T)(F12) Explicitly Correlated Method Using the Example of a Water Dimer // Russian Journal of Physical Chemistry A, 2014, Vol. 88, №. 4, p. 629–633