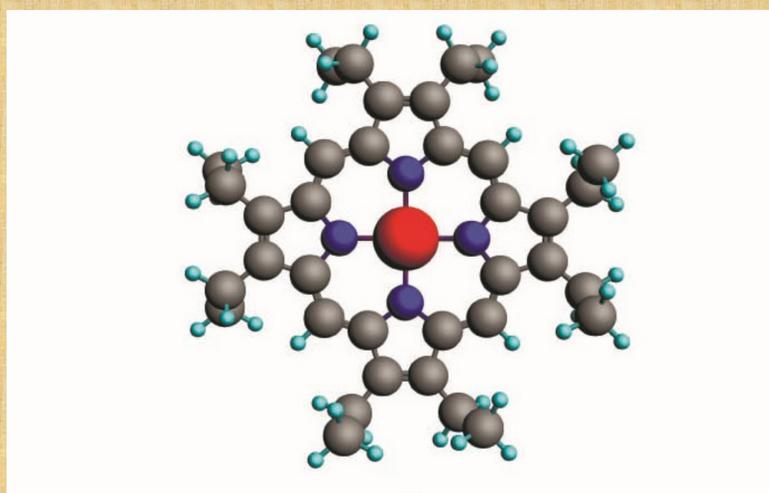


Ab initio расчет диэлектрических свойств октаэтилпорфирина кобальта методом присоединенных плоских волн в рамках *GW*-приближения

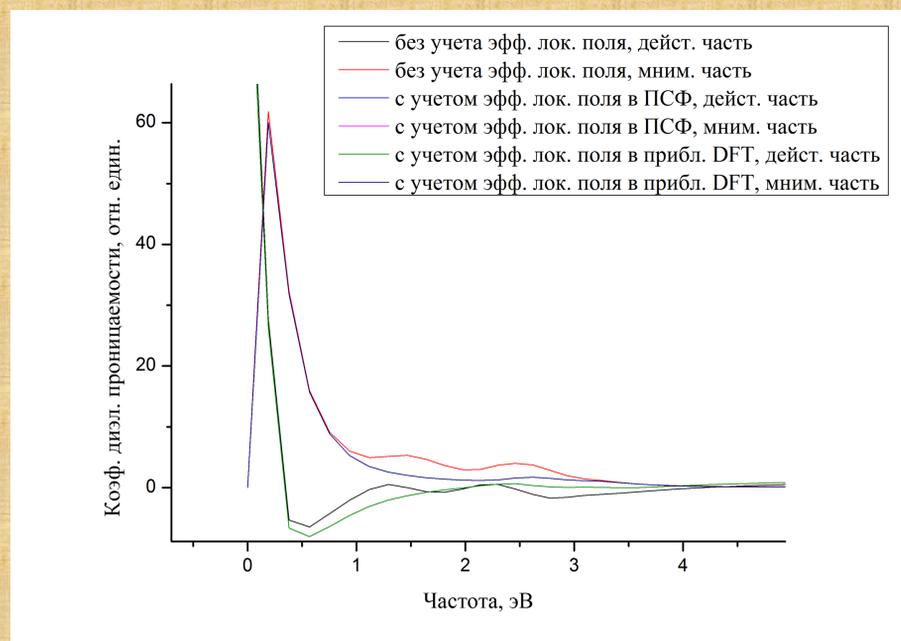
Д.С. Чуб¹, О.В. Фарберович^{1,2,3}

1. Южный федеральный университет, МИЦ «Интеллектуальные материалы», Ростов-на-Дону, Россия
2. Тель-Авивский университет, Тель-Авив, Израиль
3. Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

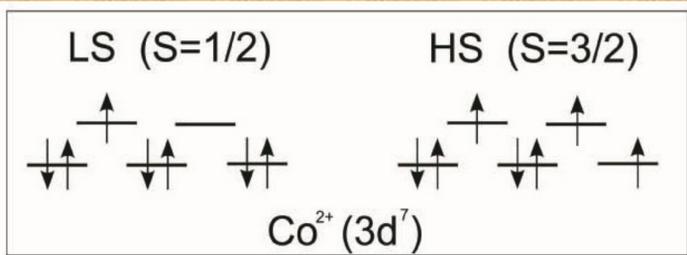
Представлены результаты *ab initio* расчетов действительной и комплексной частей диэлектрической проницаемости октаэтилпорфирина кобальта. Расчеты проводились в рамках *GW*-приближения, моделирующего собственную энергию квазичастиц произведением функции Грина и динамически экранированного кулоновского потенциала в программном комплексе VASP. Для расчета функций отклика использовались как приближение случайных фаз, так и приближение в рамках теории функционала плотности.



Структура молекулы октаэтилпорфирина кобальта



Результаты расчетов действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости октаэтилпорфирина кобальта. Для расчета функций отклика использовались как приближение случайных фаз, так и приближение в рамках теории функционала плотности.



Электронная конфигурация молекулы октаэтилпорфирина кобальта

Благодарности:

Авторы выражают благодарность Министерству образования за финансовую поддержку (соглашение №14.587.21.0002, идентификационный номер RFMEFI58714X0002).

Используемая литература:

1. Rosa A., Ricciardi G., Baerends E. J., Zimin M. et al., *Inorg. Chem.* 44, 19 (2005).
2. Ray P. C., et al., *Chem. Phys. Lett.* 419, 4 (2006).
3. Li C., et al., *J. Phys. Chem. B.* 108, 28 (2004).
4. Balzani V., et al., *Chem. Eur. J.* 14, 1 (2008).
5. Lovett J. E., et al., *J. Am. Chem. Soc.* 131, 38 (2009).
6. Sedghi G., et al., *J. Am. Chem. Soc.* 130, 27 (2008).
7. Kan J., et al., *Inorg. Chem.* 52, 15 (2013).
8. Demel J., et al., *Inorg. Chem.* 52, 5 (2013).
9. Aulbur W. G., et al., *Academic Press N. Y.* 44, 1 (2000)
10. Shishkin M., et al., *Phys. Rev. B.* 75, 235102 (2007)
11. Shishkin M., et al., *Phys. Rev. B.* 74, 035101 (2006)