

Kémiai reakciók dinamikája *ab initio* potenciális energia felületeken

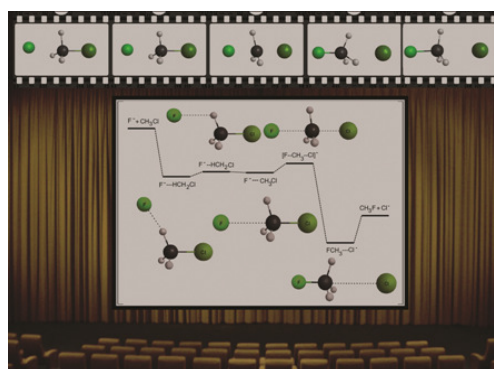
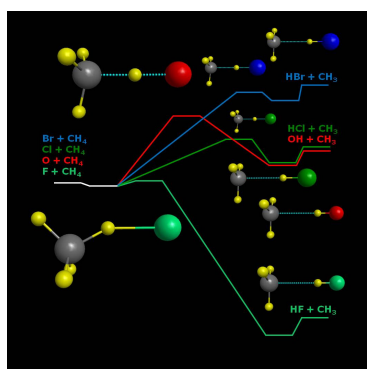
Czakó Gábor

ELTE Kémiai Intézet

E-mail: czako@chem.elte.hu

A kémia egyik alapkérdése, hogy miként mennek a kémiai reakciók a legmélyebb atomi és molekuláris szinten. Az elméleti kutatás a fizika törvényeit alkalmazza a kémiai rendszerekre és számításokat végez a matematika és informatika eszköztárának felhasználásával. A reakciódinamikai számítások lépésről-lépésre követik a kémiai reakciók lefolyását, új reakció utakat találhatnak és megjósolhatják a reakciók kimenetelét. A számított eredmények bővítik a kémiai reaktivitásról szerzett alaptudásunkat, ezáltal segítve a kémikusokat a reakciók kontrolálásában, az energiahatékonyság javításában és a reaktánsok irányításában a hasznos termékek felé.

Előadásomban bemutatom, hogyan fejleszthetünk *ab initio* alapú [1] pontos globális potenciális energia felületeket (*potential energy surface*, PES) és hogyan vizsgálhatjuk a kémiai reakciók dinamikáját az analitikus PES-ek felhasználásával. A módszerfejlesztési eredmények [2,3] mellett számos alkalmazást is tárgyalok: $X + \text{CH}_4 \rightarrow \text{HX} + \text{CH}_3$ ($X = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{O}(^3\text{P})$) [4–7], $\text{Cl} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H} + \text{CH}_3\text{Cl}$ [3], $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{Cl} \rightarrow \text{Cl}^- + \text{CH}_3\text{F}$ [8,9] és $(\text{H}_2\text{O})_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ [10].



- [1] G. Czako, I. Szabó and H. Telekes, *J. Phys. Chem. A* **118**, 646 (2014)
- [2] G. Czako and J. M. Bowman, *J. Chem. Phys.* **131**, 244302 (2009)
- [3] G. Czako, *J. Phys. Chem. A* **116**, 7467 (2012)
- [4] G. Czako, B. C. Shepler, B. J. Braams and J. M. Bowman, *J. Chem. Phys.* **130**, 084301 (2009)
- [5] G. Czako and J. M. Bowman, *Science* **334**, 343 (2011)
- [6] G. Czako, *J. Chem. Phys.* **138**, 134301 (2013)
- [7] G. Czako and J. M. Bowman, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **109**, 7997 (2012)
- [8] I. Szabó, A. G. Császár and G. Czako, *Chem. Sci.* **4**, 4362 (2013)
- [9] I. Szabó and G. Czako, *Nat. Commun.* megjelenés alatt (2015)
- [10] G. Czako, Y. Wang and J. M. Bowman, *J. Chem. Phys.* **135**, 151102 (2011)