

Molekuláris rezgések és kémiai reakciók dinamikája (KDIT73) tematika

Oktató: Dr. Czakó Gábor (gczako@chem.u-szeged.hu)

1. A Born-Oppenheimer közelítés
2. A variációs és perturbációs módszerek elvi alapjai
3. Potenciálisenergia-felületek
4. A rezgési-forgási Schrödinger-egyenlet variációs megoldása
 - Koordináták
 - Operátorok (*kinetikus és potenciális energia*)
 - Bázisfüggvények
 - Mátrixreprezentáció (*véges bázis reprezentáció (FBR), diszkrét változójú reprezentáció (DVR), variációs bázis reprezentáció (VBR)*)
 - A Hamilton-mátrix diagonalizálása
5. Kétatomos molekulák (*egy rezgési-forgási DVR kód lépésről-lépésre*)
6. Reakciódinamika
 - A kvázi-klasszikus trajektória (QCT) módszer
 - Kezdeti feltételek
 - Termékanalízis (*standard módszerek és új fejlesztések (1GB)*)
 - A zérus-ponti energia probléma a klasszikus dinamikában (*aktív és passzív megszorítások*)
 - Alkalmazások (*mód-szelektív kémia*)