

I. Bevezetés a kvantumkémia gyakorlatába (Fogarasi Géza)

Ezen első két gyakorlat célja a kvantumkémia alapfogalmainak, szemléletének és fontosabb alkalmazásainak bemutatása. A kvantumkémiai számításokat itt még egyszerűbb szinteken, az (*ab initio*) Hartree–Fock, illetve a DFT (*Density Functional Theory*) módszerekkel végezzük. A konkrét számítási feladat lehet egy molekula adott tulajdonságainak (molekulageometria, rezgési színekép, potenciálfelület, ionizációs energia, NMR kémiai eltolódások, stb.) meghatározása.

A számításokhoz a Pulay-csoportban kidolgozott, kereskedelemben is forgalmazott PQS-programot használjuk: www.pqs-chem.com/.

Átnézendő elméleti alapok: a H-atom és a H₂-molekula elektronszerkezete, az LCAO-MO-elmélet (molekulapályák, pályaenergiák, elektronkonfiguráció). Ionizációs energia és elektronaffinitás; a szimmetria csoportelméleti alapjai.

A következőkben –módszeres tematika helyett–korábban végzett gyakorlatok példáin mutatom be a feladatok típusát.

Ia, feb. 14.

1. feladat

Egyelektronos rendszerek (H, H₂⁺) energiájának bázisméret-függése, összehasonlítás az egzakt értékkel.

2. feladat

Az O₂ molekula és az O₂²⁻ anion pályaenergiáinak kiszámítása, elektronkonfigurációjuk megadása, a lokalizált pályák értelmezése, ionizációs energia kiszámítása.

3. feladat

A H₂F⁺ molekula ion geometriaoptimalása, linearitás vagy C_{2v} szimmetria megállapítása, a rezgési frekvenciák és intenzitások (infravörös spektrum) kiszámítása.

Ib, feb. 21

4. Feladat:

A vinil-amin – acetaldimin *tautomer pár* geometriaoptimalása, IR-spektrumának, NMR-eltolódásainak és XPS (fotoelektron-)spektrumának számítása. A protonvándorlás átmeneti állapotának (*Transition State, TS*) meghatározása és az *Intrinsic Reaction Coordinate* (IRC) szerinti reakcióút kiszámítása.