

Gerjesztési energia számítása molekulafragmensen

Tóth Zsuzsanna

Vegyész MSc

Témavezető: Szabados Ágnes

Gyakran előfordul, hogy egy nagy kémiai rendszernek csak egy része érdekes, mert a megérteni kívánt jelenség lokalizált. Ilyen jelenség lehet például az elektronikus gerjesztés. Az a kísérleti tapasztalat, hogy az abszorpciós sávért felelős molekularészlet – úgynevezett kromofór csoport – tipikus gerjesztési energiája szűk határok között mozog, amennyiben a csoporthoz nem kapcsolódik olyan oldallánc, ami a gerjesztést térben kiterjesztené.

Dolgozatomban az FLMO(Frozen Localized Molecular Orbital) módszer alkalmazhatóságát vizsgáltam gerjesztési energia számítására. A kvantumkémiai módszerek erőforrásigénye a molekula méretének növelésével hatványfüggvény szerint nő. Az FLMO-módszerrel ezt a nehézséget tudjuk részben megkerülni. Az eljárás alapgondolata, hogy az egész molekulára Hartree-Fock (HF) szintű számítást végzünk. Ezek után a számunkra érdekes kis molekula részletre (fragmentsre) végzünk magas szintű korrelációs számítást, a molekula maradék részét HF-szinten befagyasztva. A fagyasztás úgy történik, mint „frozen core” számolás esetén, azzal a különbséggel, hogy nem a törzselektronok atompályáit fagyasztjuk be, hanem a fragmensen kívül lokalizált molekulapályákat.

A számítások kivitelezésekor több ponton is választások elé kerülünk. Az egyik legfontosabb döntés, hogy milyen molekularészletet választunk ki és hogyan kezeljük a fragmens és a befagyasztott rész közötti pályákat. Ezen kívül hoznunk kell több technikai jellegű döntést. Tudományos diákköri munkám során kísérletet tettem arra, hogy megtaláljam az optimális választási lehetőségeket.