



Debreceni Egyetem Informatikai Kar
Információ Technológia Tanszék

Nemadiabatikus tulajdonságok vizsgálata: potenciális molekuláris kapcsolók

Csehi András
III. PhD

Témavezető:
Dr. Halász Gábor

Mivel foglalkozunk?

Fizika

Elméleti Fizika

Elméleti Molekulafizika

- Elektronszerkezet
- Magdinamika



Molekuláris Kapcsolók

Eszközök:

- Matematika
- Kvantummechanika
- (Szuper)számítógép

Molekulák kvantummechanikai vizsgálata

Born-Oppenheimer (adiabatikus) közelítés:

$$(m_{\text{elektron}} \ll m_{\text{mag}}) \longrightarrow (v_{\text{elektron}} \gg v_{\text{mag}})$$

Elektronmozgás:

$$\hat{H}_e \Psi_e(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = E(\mathbf{R}) \Psi_e(\mathbf{r}; \mathbf{R})$$

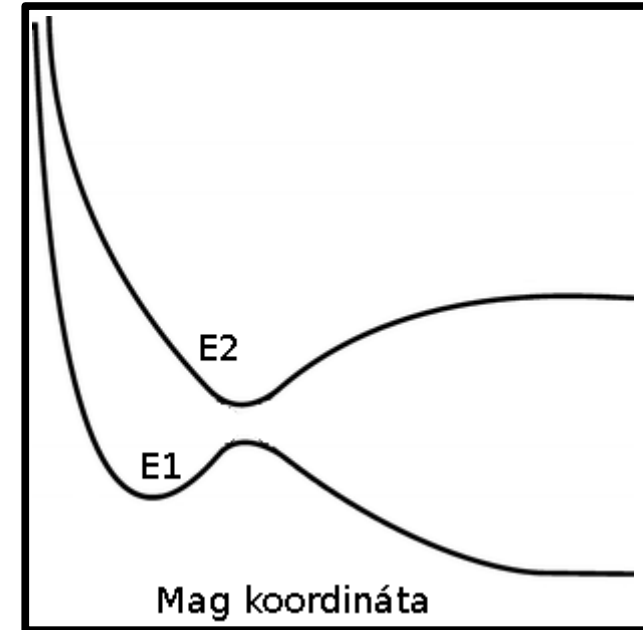
Magmozgás:

$$\left(\hat{T}_N + E_j \right) \Psi_N^j - \sum_i \hat{\Lambda}_{ji} \Psi_N^i = \varepsilon \Psi_N^j$$

Ahol:

$$\hat{\Lambda}_{ij} = \frac{1}{2M_\alpha} (2\mathbf{F}_{ij} \nabla + G_{ij})$$

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{\langle \Psi_e^i | \nabla \hat{H}_e | \Psi_e^j \rangle}{E_i - E_j}$$



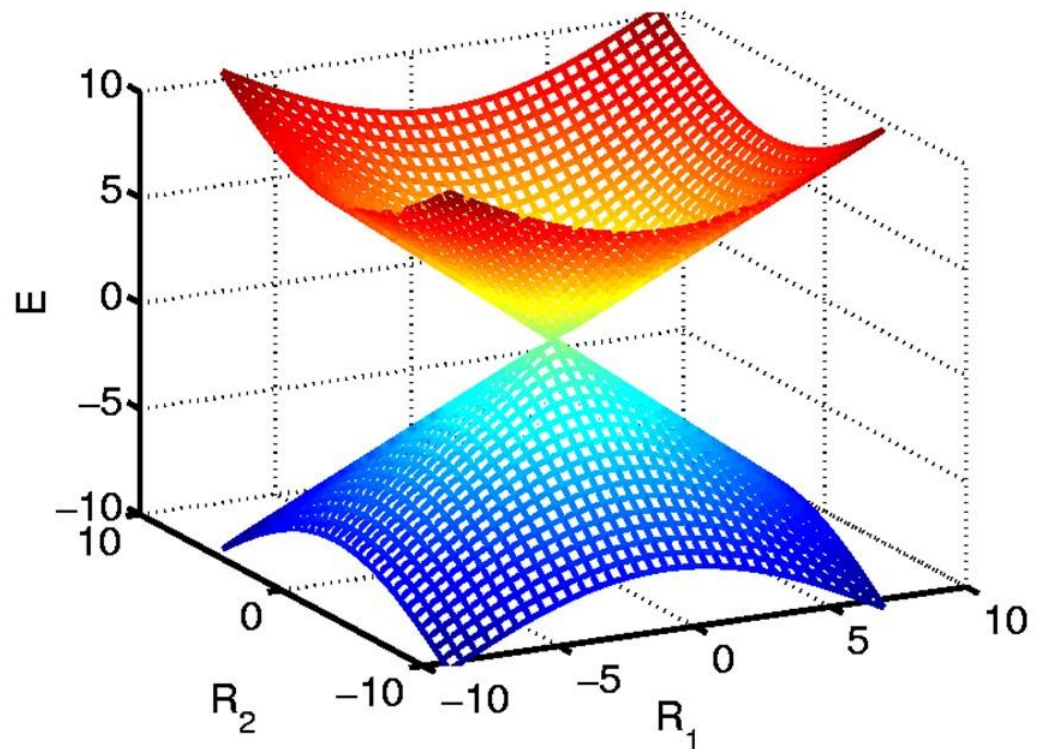
Nemadiabatikus közelítés:

- ha az elektronállapotok közel kerülnek egymáshoz, közöttük a csatolás jelentőssé válik
- elfajulás esetén a csatolás végtelen ($\mathbf{F}_{ij} \rightarrow \infty$)
- ekkor a magok és az elektronok mozgása nem választható szét, a BO közelítés érvényét veszti

Degenerált állapotok

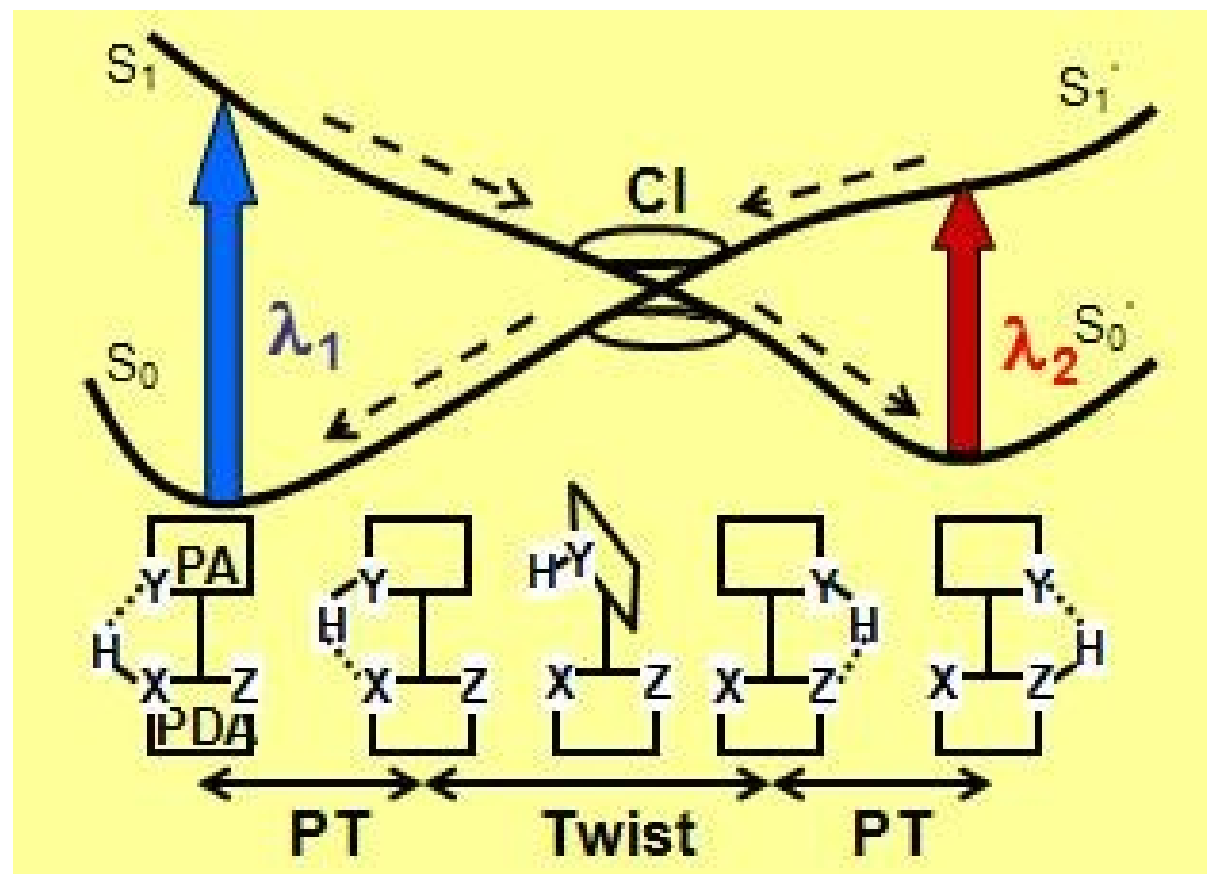
- N atom \rightarrow $(3N-6)$ belső szabadsági fok
- az energia felületek hiperfelületek
- elfajulások jelenléte (pl. kónikus kereszteződés)
- gyors, sugárzásmentes lebomlás \rightarrow számos érdekes jelenség
 - sugárzás: $10^{-9} - 10^{-6}$ s
 - sugárzásmentes: 10^{-15} s

- \rightarrow a DNS fotostabilitása
- \rightarrow orvosi alkalmazás
(képalkotás)
- \rightarrow informatika
(információ tárolás)



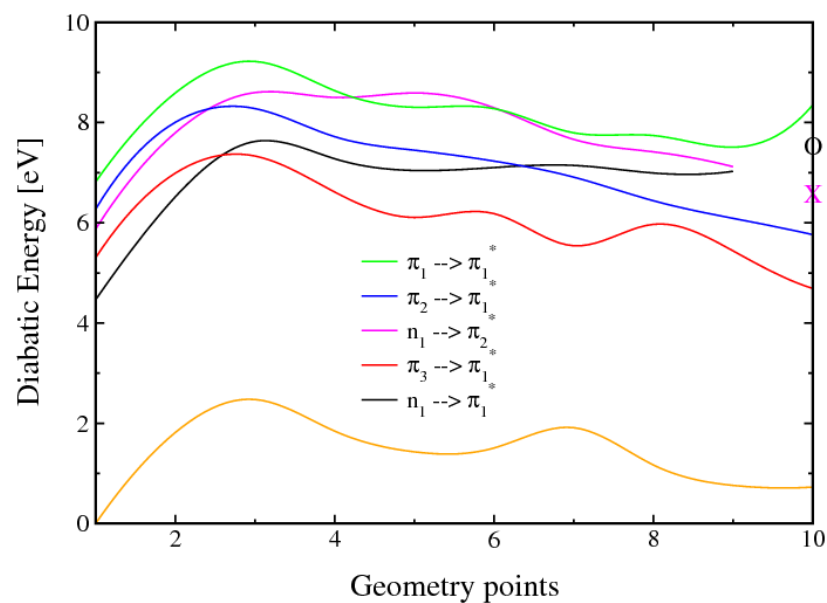
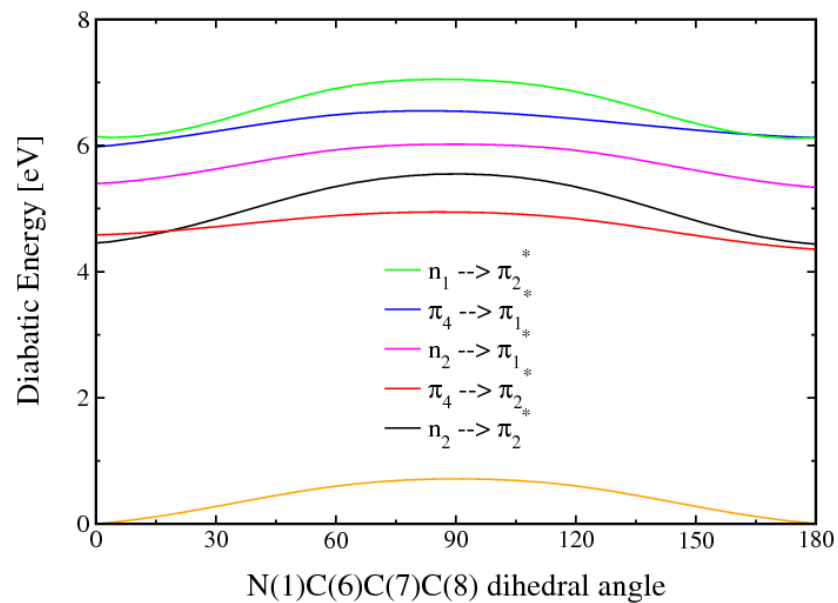
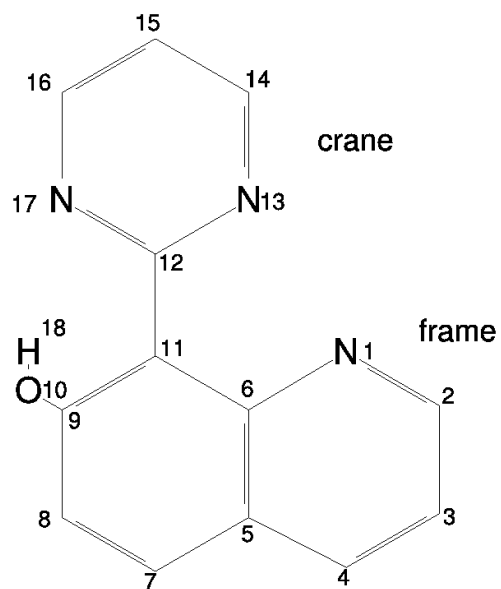
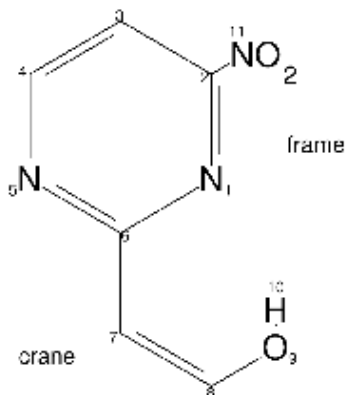
Molekuláris kapcsoló

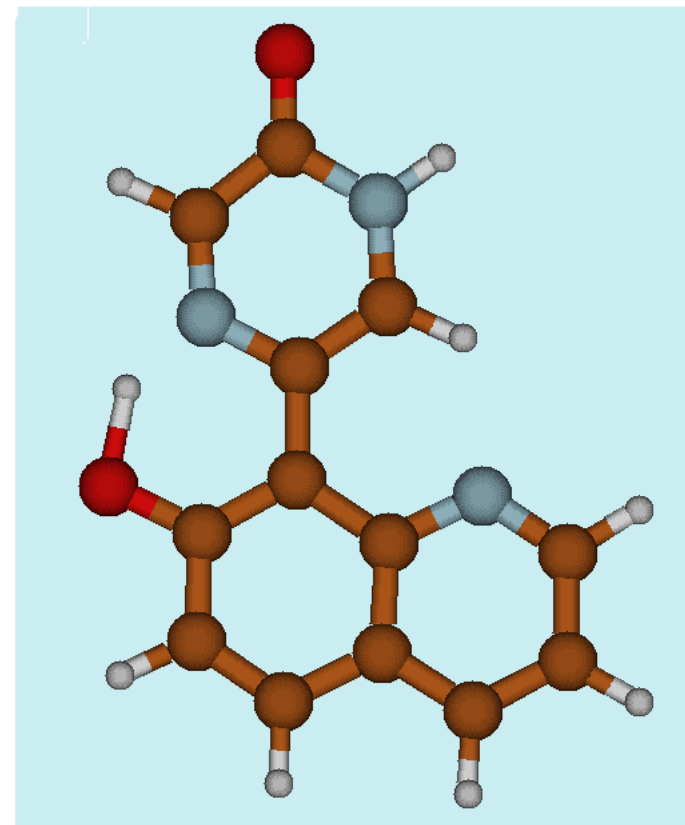
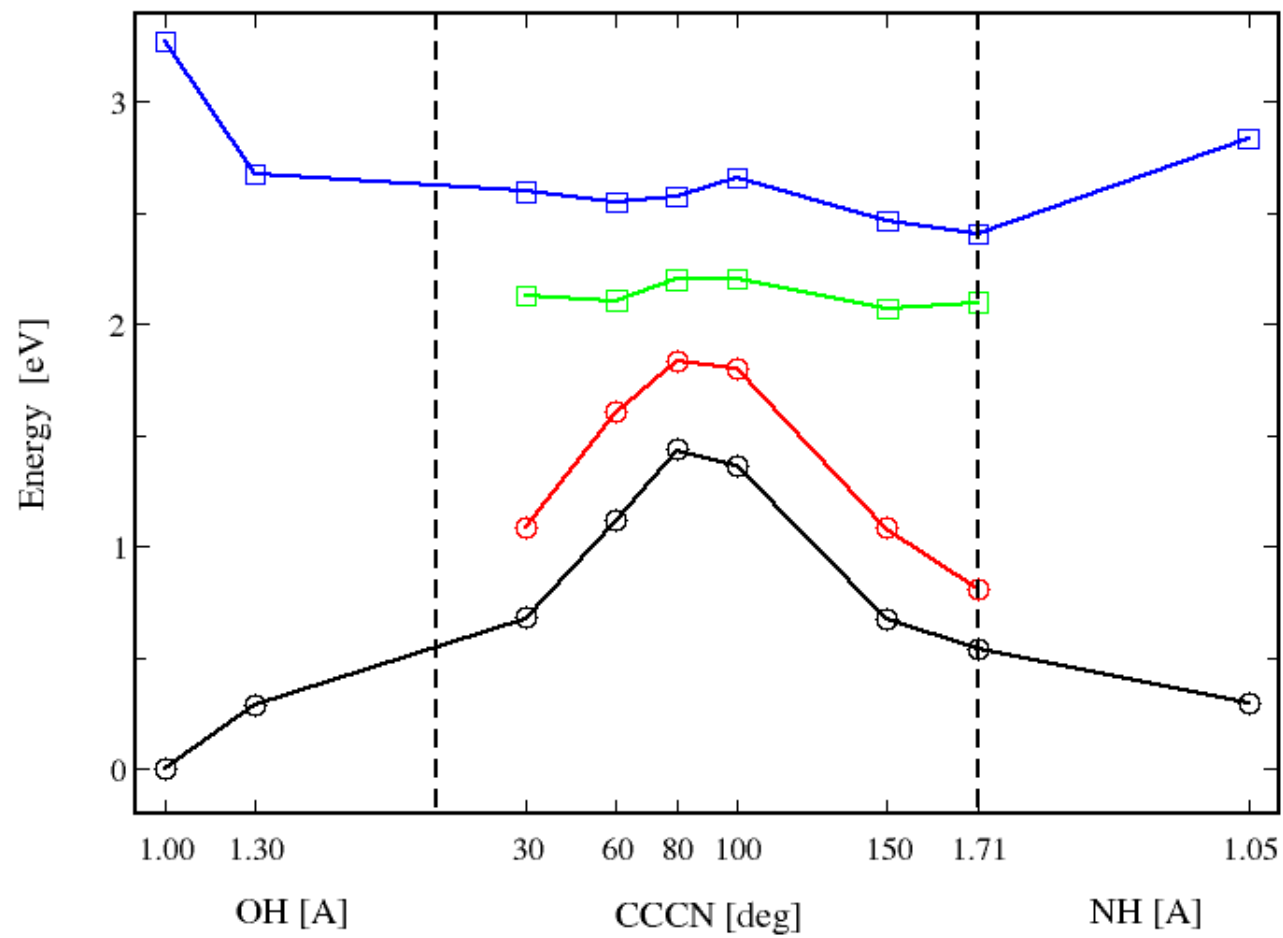
- termikus stabilitás
- reverzibilitás
- megkülönböztethetőség
- CI jelenléte
- mikrofizikai reakcióút

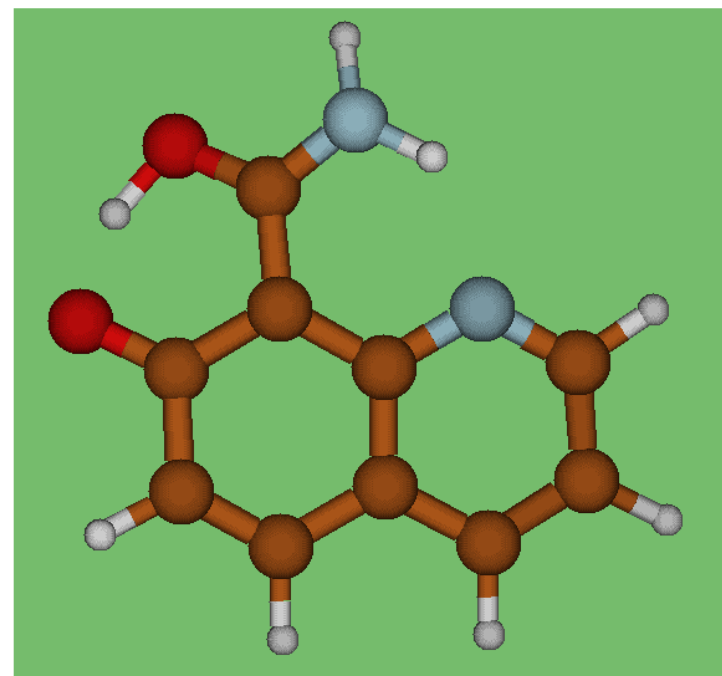
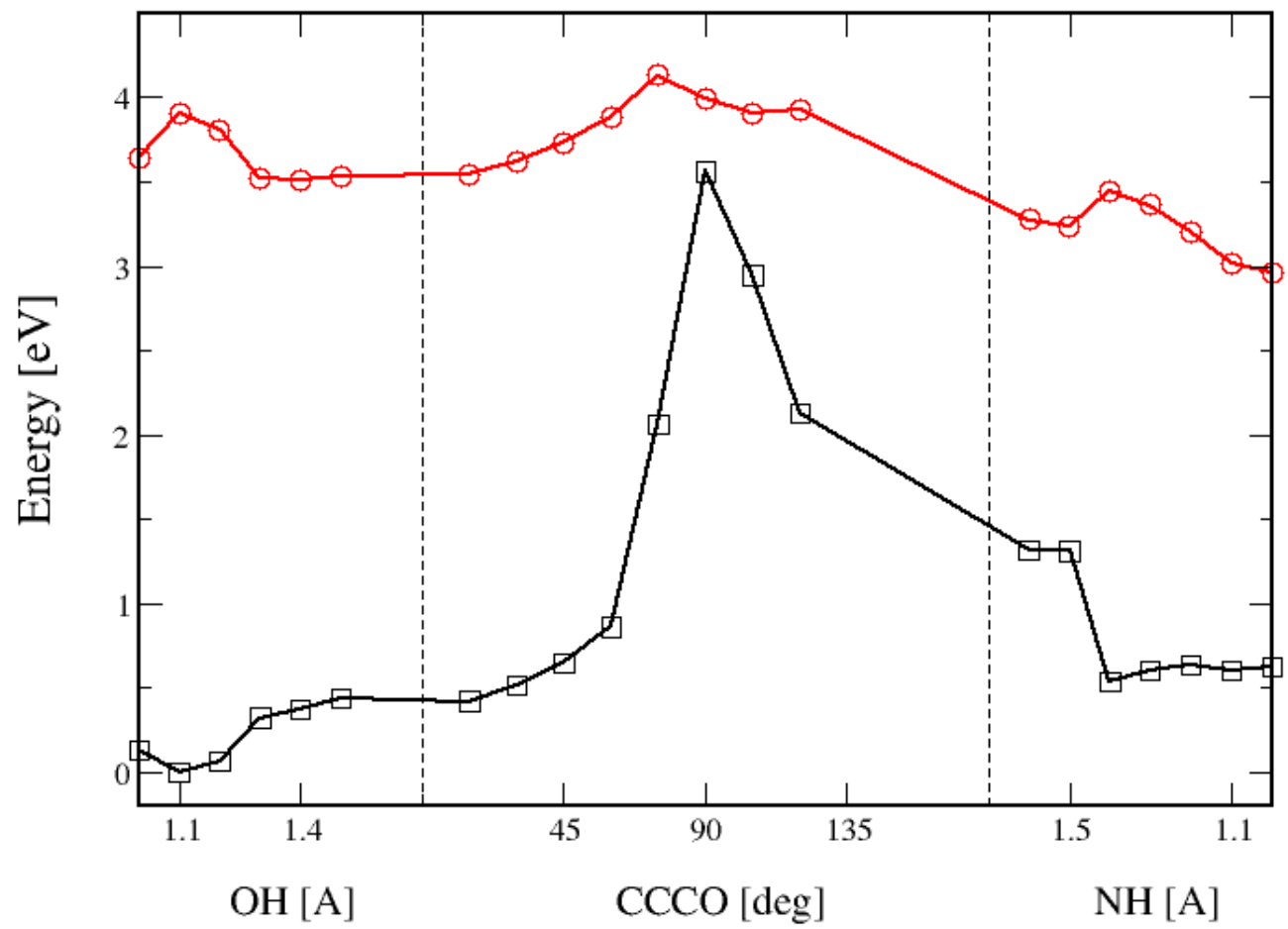


A.L. Sobolewski, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 10 (2008) 1243

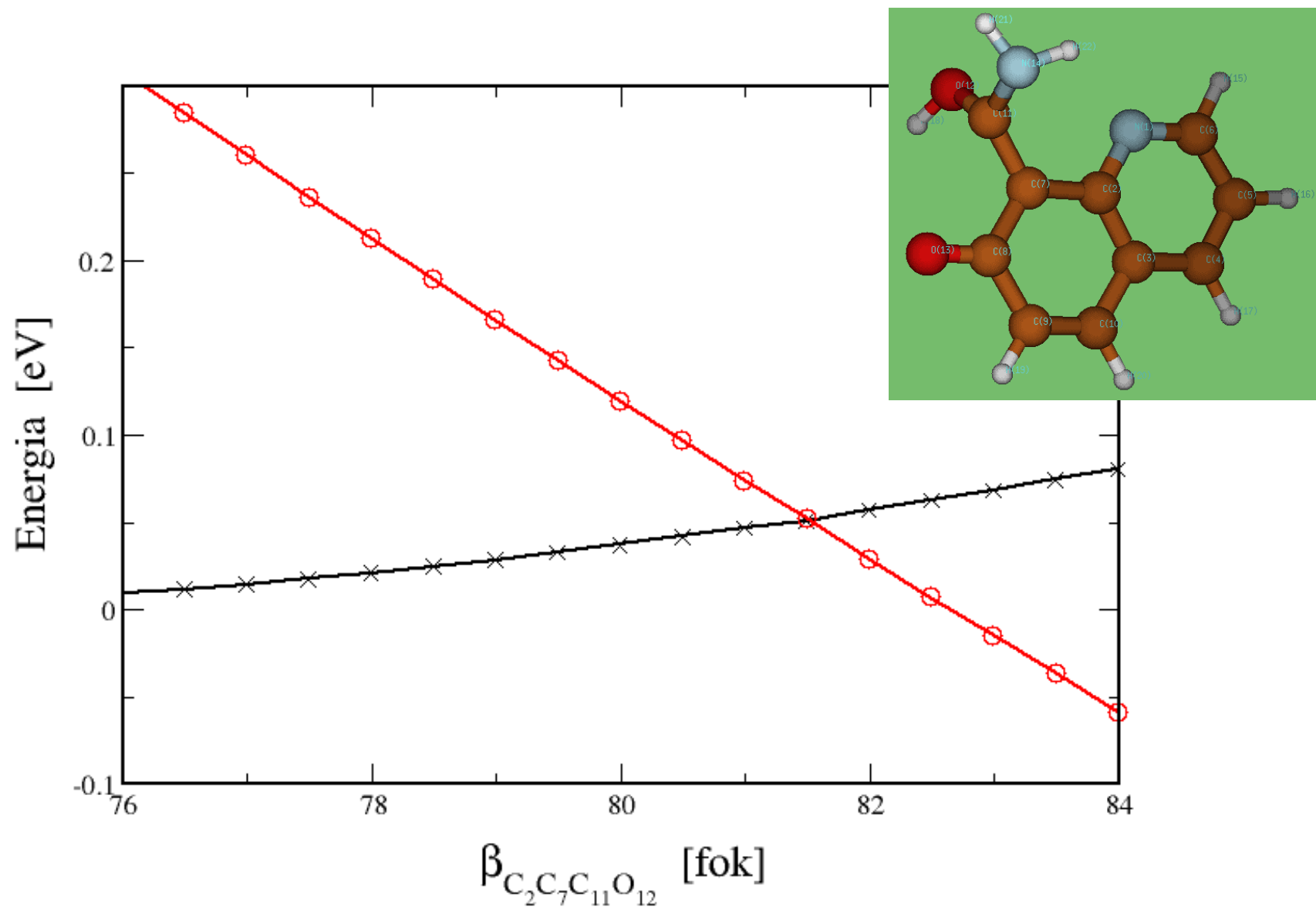
A. Csehi, C. Woywod, G. J. Halász, Á. Vibók: Ab initio studies of two pyrimidine derivatives as possible photo-switch systems. (elfogadva: *Cent. Eur. J. Phys.* DOI: 10.2478/s11534-013-0174-8)







Jelenleg



Eddigi referált publikációk:

[1] Á. Vibók, **A. Csehi**, E. Gindensperger, H. Köppel, and G. J. Halász: Quantum dynamics through conical intersections: Combining effective modes and quadratic couplings. *J. Phys. Chem. A*. 116, 2629, (2012).

[2] **A. Csehi**, G. J. Halász and Á. Vibók: Conical intersections in the H₂CN molecule induced by the distortion from its Renner-Teller arrangement. *Chem. Phys. Lett.* 533, 10, (2012).

[3] **A. Csehi**, A. Bende, G. J. Halász, Á. Vibók, A. Das, D. Mukhopadhyay and M. Baer: A tri-atomic Renner-Teller system entangled with Jahn-Teller conical intersections. *J. Chem. Phys.* 138, 024113 (2013).

[4] **A. Csehi**, A. Bende, G. J. Halász, Á. Vibók, A. Das, D. Mukhopadhyay, S. Mukherjee, S. Adhikari and M. Baer: Dressed Adiabatic and Diabatic Potentials for the Renner-Teller/ Jahn-Teller F+H₂ System. *J. Phys. Chem. A* dx.doi.org/10.1021/jp311014z (2013).

[5] **A. Csehi**, C. Woywod, G. J. Halász, Á. Vibók: Ab initio studies of two pyrimidine derivatives as possible photo-switch systems. (elfogadva: *Cent. Eur. J. Phys.* DOI: 10.2478/s11534-013-0174-8)

[6] C. Woywod, **A. Csehi**, G. J. Halász, K. Ruud, and Á. Vibók: Theoretical investigation of two model systems for molecular photoswitch functionality. I. 2-(4-nitropyrimidin-2-yl)ethenol. (referálás alatt: *Chem. Phys.*)