

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (kodas)	Fakultetas	Centras/Institutas/Skyrius
<b>Molekulių ir molekulinų darinių teorija</b> (pavasario semestras) (8 ECTS kreditai)	Fizika N 002	Fizikos	Cheminės fizikos institutas
Studijų būdas	Valandų skaičius	Studijų būdas	Valandų skaičius
Paskaitos	4	Konsultacijos	16
Individualus	170	Seminarai	10

**Dalyko anotacija**

Kvantinė molekulių teorija. Adiabatini artinys. Daugiaelektronių sistemų būsenos funkcijos. Daugiaelektronių sistemų tyrimo metodai; Viendalelis artinys, Hukelio metodas, Hartrio ir Foko metodas. Kupmanso (Cupmans) ir Brijueno (Brillouin) teoremos. Atominės bazinės funkcijos, Molekulių teorijos daugiacentriai integralai. Elektronų sąsają įskaitantys metodai: daugiakonfigūracinis suderintinio lauko, konfigūracijų superpozicijos, sąveikaujančių klasterių, trikdžių teorijos metodai, valentinių ryšių metodas.. Tankio funkcionalo teorija, Kohn-Sham lygtys. Nuo laiko priklausanti tankio funkcionalo teorija. Pusempiriniai metodai. QM/MM, ONIOM metodai. Molekulių reakcijos. Molekulių susidūrimai, daugiatomų molekulių dinamika. Reakcijų greičiai. Energijos pernaša molekulėse. Dinamika kondensuotoje fazėje, prie paviršių. Tirpiklio įtaka. Kvantinė molekulių dinamika. Grupių teorija ir jos taikymai kvantinėje molekulių teorijoje. Grupės apibrėžimas. Pogrupis. Jungtiniai elementai ir jų klasės. Izomorfinės ir homomorfinės grupės. Tiesioginė grupių sandauga. Grupių įvaizdžių teorija. Redukuojamieji ir neredukuojamieji grupės įvaizdžiai. Šuro lemos. Įvaizdžių charakteriai ir jų savybės. Projektavimo operatoriai. Banginių funkcijų simetrija. Tikrinių funkcijų klasifikavimas pagal simetriją. Erdvinė molekulių simetrija. Taškinės grupės. Virpesinių spektrų klasifikacija. Matricinių elementų atrankos taisyklės. Kvantinės molekulių teorijos taikymai. Molekulių pusiausvyrinės struktūros geometrinių parametru nustatymas; dipolinių momentų, molekulių elektroninių būsenų potencinės energijos paviršių, atomizacijos energijos; reakcijos entalpijos; konformacinių barjerų, elektroninių ir virpesinių spektrų skaičiavimas.

**Pagrindinė literatūra**

1. Helgaker T., Jorgensen P., Olsen J. Molecular Electronic Structure Theory. John Wiley & sons, Ltd, 2004. 908 p.
2. David S. Sholl, Janice A. Steckel. Density Functional Theory. A JohnWiley & Sons, inc., 2009, 238 p.
3. Levine R.D. Molecular Reaction Dynamics. Cambridge University Press, 2004. 554 p.
4. John Zeng Hui Zhang. Theory and Application of Quantum Molecular Dynamics. World Scientific, 1999, 366 p.
5. David M. Bishop. Group Theory and Chemistry. Dover Publications, Inc., 1993, 300 p.
6. Atkins P., Friedman R. Molecular Quantum Mechanins. Oxford University Press, 2007, 573 p.
7. Martin R.M. Electronics structure. Basic theory and practical methods. Cambridge University Press, 2007. 624 p.

Konsultuojantys dėstytojai	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
----------------------------	-----------------	---------------	--

Juozas Šulskus	dr.	prof.	<p>1. Mačernis M., Galzerano D., Šulskus J., Kish E. , Kim Y. , Koo S. Valkūnas L. , Robert B. Resonance Raman spectra of carotenoid molecules: influence of methyl substitutions. Journal of physical chemistry. A. Vol. 119, iss. 1 (2015) p. 56-66.</p> <p>2. Redeckas K.,Toliautas S., Steponaviciute R., Sackus A., Sulskus J., Vengris M. A femtosecond stimulated Raman spectroscopic study on the oxazine ring opening dynamics of structurally-modified indolobenzoxazines. Chem. Phys. Lett. Vol. 653 (2016) p. 67-72.</p> <p>3. Toliautas S., Dodonova J, Zvirblis A, Ciplys I, Polita A, Devizis A, Tumkevicius S Sulskus J. Vysniauskas A. Enhancing the Viscosity-Sensitive Range of a BODIPY Molecular Rotor by Two Orders of Magnitude. Chemistry-A European Journal. Vol. 25, iss. 44, (2019) p. 10342-10349.</p> <p>4. Jasiūnas R., Zhang H., Yuan J., Zhou X., Qian D., Zou Y., Devižis A., Šulskus J., Gao F., and Gulbinas V. From Generation to Extraction: A Time-Resolved Investigation of Photophysical Processes in Non-fullerene Organic Solar Cells. J. Phys. Chem. C 2020, 124, 21283–21292.</p>
Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2022 m. vasario 02 d., protokolo Nr. (7.17 E) 15600-KT-32			
Komiteto pirmininkas S. A. Juršėnas			