

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas		Mokslų kryptis (šaka)	Fakultetas	Katedra
Molekulių ir molekulinė darinių teorija (<i>pavasario semestras</i>)		Fizika 02P	Fizikos	Teorinės fizikos
Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)	Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)	
Paskaitos	1,5	Konsultacijos	1,5	
Individualus	4,5	Seminarai	1,5	

Dalyko anotacija

Kvantinė molekulių teorija. Adiabatini artinys. Daugiaelektronų sistemų būsenos funkcijos. Daugiaelektronų sistemų tyrimo metodai; Viendalelio 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, trikdyčių 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 parametrų 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 Mechanics. Oxford University Press, 2007, 573 p.
7. Martin R.M. Electronics structure. Basic theory and practical methods. Cambridge University Press, 2007. 624 p.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
1. Juozas Šulskus	Dr.	Doc.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Duffy, C.D.P., Chmeliiov, Jevgenij, Mačernis, Mindaugas Sulskus J., Valkūnas, Leonas: Modeling of fluorescence quenching by lutein in the plant light- harvesting complex LHCII. Journal of physical chemistry. B. Vol. 117, iss. 38 (2013) p. 10974-10986 2. Toliautas S., Mačernis M., Šulskus J., Valkūnas L. Solvent effect on the photo-induced proton transfer in 2-(N-methyl-α-iminoethyl)-phenol. Chemical physics letters. Amsterdam : Elsevier Science BV. ISSN 0009-2614. 2014, vol. 591, no. 1, p. 52-57. 3. Mačernis M., Šulskus J., Malickaja S., Ruban A.V., Valkūnas L. Resonance Raman spectra and electronic transitions in carotenoids: a density functional theory study. The journal of physical chemistry A. Washington : American Chemical Society. ISSN 1089-5639. 2014, Vol. 1178, iss. 10, p. 1817-1825. 4. Kadashchuk, A., Skryshevski, Yu., Vakhnin, A., Toliautas S., Šulskus J., Augulis R., Gulbinas V., Nespurek S., Valkūnas, L. Highly efficient intrinsic phosphorescence from a σ-conjugated poly(silylene) polymer. Journal of physical chemistry. C. Vol. 118, iss. 40 (2014) p. 22923-22934. 5. 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.
Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2017 m. vasario mėn. 21 d., protokolo Nr. 108			
Komiteto pirmininkas S. Juršėnas			