

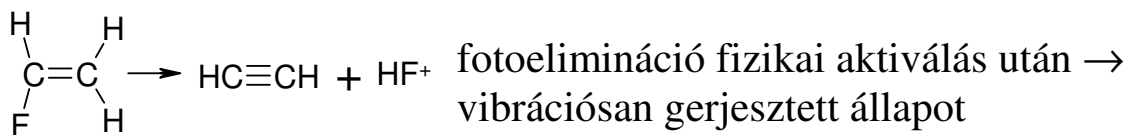
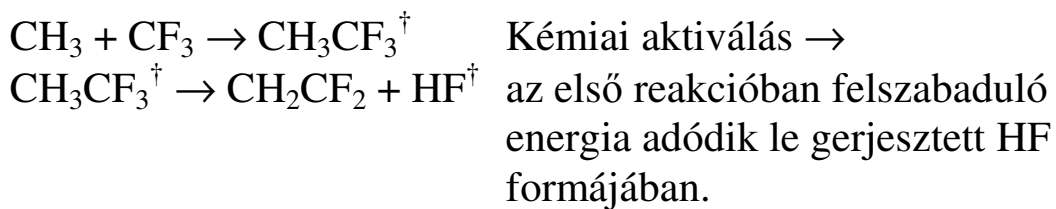
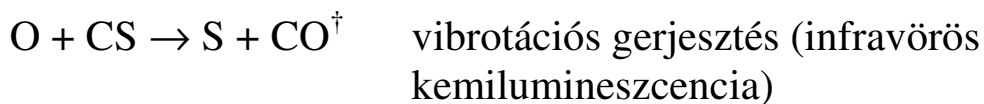
# Kémiai dinamika, kémiai reakciók

- Eddig túlnyomórészt 2 test ütközési közelítés

- Most többatomos rendszerek dinamikája következik (kémiai reakciókban minimum 3 atom szerepel)

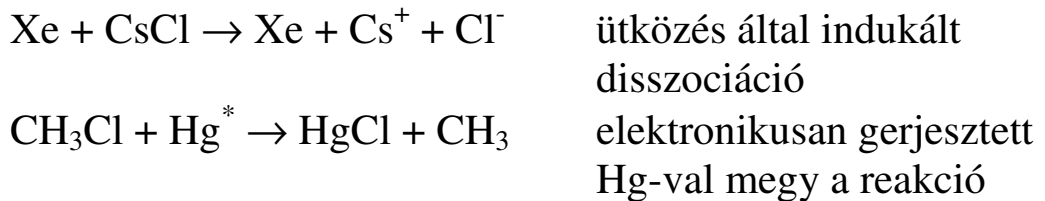
Nézzük az energetika szerepét néhány reakció példáján keresztül.  
Mi minden változhat?

a) energia leadás – exoergikus reakcióknál

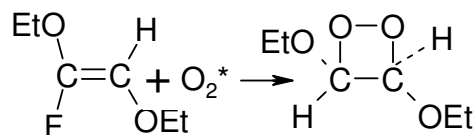


b) energia elnyelés → potenciál gáttal rendelkező reakciók  
 szelektívek (ez azt jelenti, hogy fontos az,  
 hogy honnan jön az energia!)

pl. transzlációs energiát lehet egy reakcióban a reakció  
 lejátszásához felhasználni.



Gerjesztett  $\text{O}_2 \rightarrow$  sztereospecifikusan addíciónálódik dupla  
 kötésre:



Összefoglalva:

Mivel a kémiai reakciókban már a belső mozgási állapotok  
 (módusok), sztérikus faktorok szerepét is figyelembe akarjuk venni,  
 akkor a reaktánsok molekuláris karakterét is figyelembe kell venni!

Szükséges:

- 1) időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása, közelítései
- 2) általánosítani kell a potenciál fogalmát
- 3) ütközési trajektóriák számítási módjait kell kidolgozni

Vázlatos példák következnek!