

DOKTORI ÉRTEKEZÉS

AZ ELEKTRONKORRELÁCIÓ
SZEREPE A KÉMIÁBAN.
A SÛRÛSÉG FUNKCIONÁL ELMÉLET ALKALMAZÁSAI

Csonka Gábor István

Készült

a Budapesti Műszaki Egyetem Szervetlen Kémia Tanszékén

Budapest

1997

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Számítási módszerek	4
3. Az elektronkorreláció és a bázis függvények hatása a disziloxán hajlítási potenciális energiagörbéjére	15
4. A Cl-S(H)OH-Cl molekula ab iníció egyensúlyi molekulageometriája és egy disszociációs csatornája. A CT2 módszer. A DFT módszerek teljesítőképessége kén tartalmú molekulák esetében	22
5. Az elektronkorreláció szerepe a metil-amin nagy amplitúdójú mozgásainak leírásában. DFT és poszt Hartree-Fock számítások	27
6. Az elektronkorreláció szerepe hidrogén-kötések kialakításában	32
7. Szilatránok: az elektronkorreláció szerepe az intramolekuláris Si-N kölcsönhatás leírásában. A szilatránváz geometriájának függése az Si-N távolságtól	48
8. Egyszerű tesztek sűrűség funkcionál módszerek minősítésére	53

Melléklet

- XXI. **Csonka**, G. I., **Éliás**, K., **Kolossváry**, I., **Sosa**, C. P., **Csizmadia**, I. G., Theoretical study of alternative ring forms of α -L-fucopyranose, *J. Phys. Chem. A*, 102 (1998) 1219.
- XXII. **Csonka**, G. I., **Johnson**, B. G., Inclusion of exact exchange for self-interaction corrected H_3 density functional potential energy surface, *Theor. Chem. Acc.*, nyomdában.