

A $F^- + PH_2I$ reakció dinamikájának modellezése saját fejlesztésű *ab initio* potenciálisenergia-felületen

Erdei Laura Csenge^a, Papp Dóra^{a,b}, Czakó Gábor^{a,b}

^aMTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

^bSZTE TTIK Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

erdeilaura21@gmail.com

Az elméleti kémia különféle kémiai rendszerek és reakciók modellezésével foglalkozik, amelyhez számítógépes szoftvereket hív segítségül. Számítógépes módszereket az egyik legfontosabb szerves reakciótípus, a bimolekuláris nukleofil szubsztitúció (S_N2) vizsgálatára is előszeretettel alkalmaznak. A szén és nitrogén centrumon lejátszódó S_N2 reakciókat már jóval régebben elkezdtek felderíteni, de a foszfor, mint központi atom szerepe még kevésbé tisztázott.

Előadásom témája a $F^- + PH_2I$ reakció dinamikájának modellezése. Először a már rendelkezésre álló stacionárius pontokból [1] kiindulva random kitérítéseket végeztünk, hogy előállítsuk a kezdeti illesztési készletet egy potenciálisenergia-felület (PES) fejlesztéséhez. Az így kapott pontokra *single point* energiaszámításokat végeztünk ManyHF-BCCD(T)-alapú kompozit módszerrel a MOLPRO programcsomag alkalmazásával. Az analitikus PES fejlesztését a ROBOSURFER programcsomaggal végeztük. Ezután kvázi-klasszikus trajektória szimulációkat futtattunk, és az így kapott adatokat saját készítésű elemzőkóddal értékeltük ki.

A két fő termékcsatorna közül alacsony ütközési energiákon a szubsztitúció reaktivitása nagyobb, magasabb energiákon pedig a protonabsztrakció válik kisebb mértékben dominánssá. A szórási szögeloszlás mindkét csatorna esetén előreszóródási hajlamot mutat, ami a lehasításos mechanizmusra utal. A relatív translációsenergia-eloszlásokból azt állapítottuk meg, hogy a szubsztitúció inkább indirekt, míg a protonabsztrakció inkább direkt reakció. A belső, rezgési- és forgásienergia-eloszlások is ezt támasztják alá, mert a szubsztitúciós PH_2F termék – a protonabsztrakciós termékekkel ellentétben – rezgésileg jelentősen gerjesztett. Sztereo-kémiai szempontból a szubsztitúciós termékek nagyobb része inverziós, de az ütközési energia növekedésével a retenció aránya nő.

Eredményeink hozzájárulnak a központi atom és a távozó ion reakciódinamikára gyakorolt hatásának szélesebb körű megértéséhez.

[1] B. Ballay, T. Szűcs, D. Papp, G. Czakó: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2023** (25), 28925-28940.