universität innsbruck

Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik

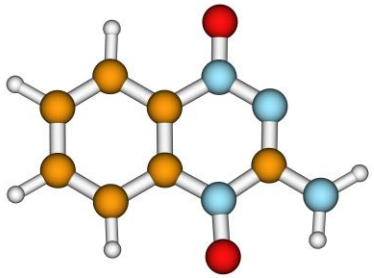
Computational Photophysics

Milan Ončák
Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik
Universität Innsbruck

13.1.2022

Quantenchemie und Theater (nach Dudley R. Herschbach)

?



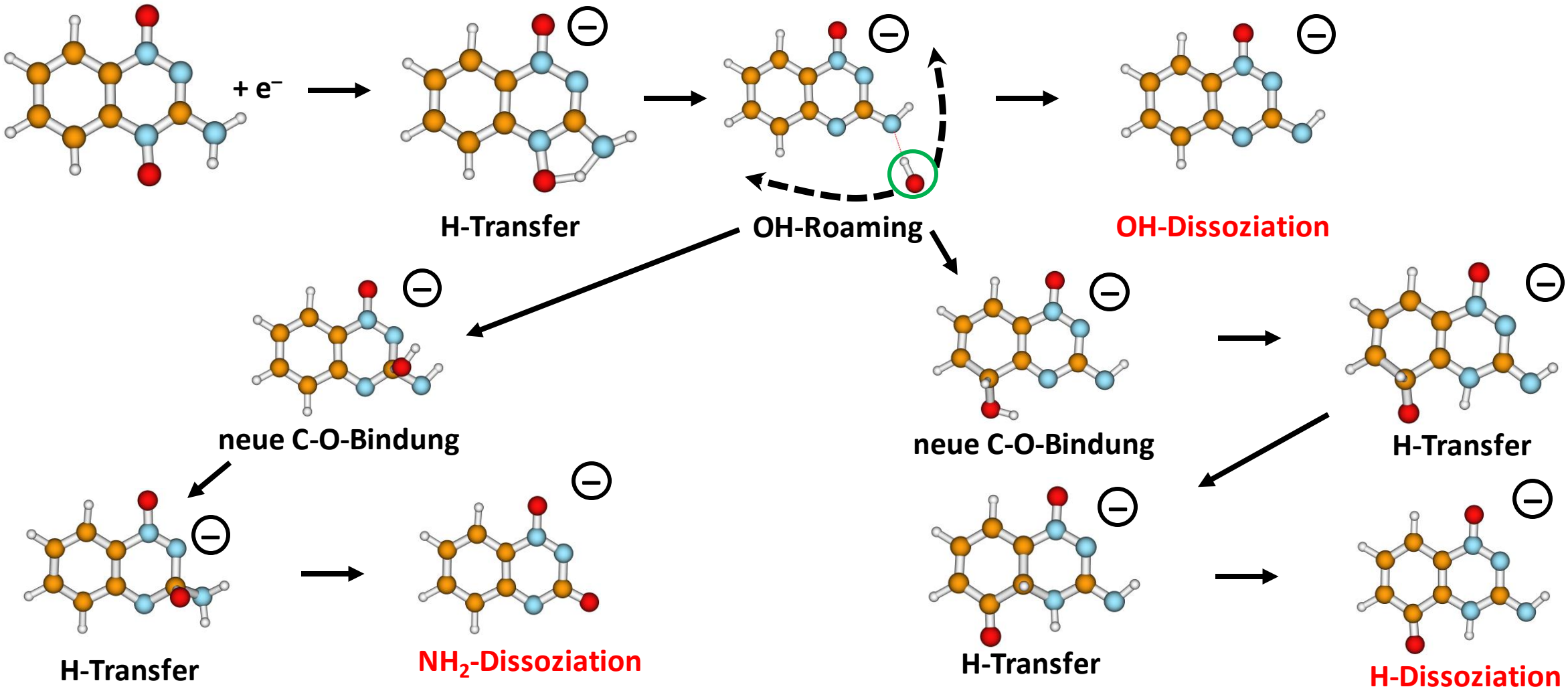
+ e^-

?

Dissoziation von OH, H und NH_2

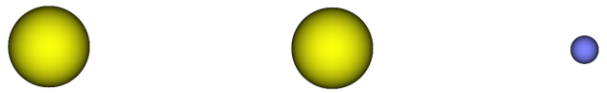
https://images.rapgenius.com/c4d577993f2c2162263323781638cf49.1000x796x1.jpg,
http://hollabernardo.blogspot.com/2012/11/act-5-scene-2.html

Durch Quantenchemie entsteht “das Drehbuch“

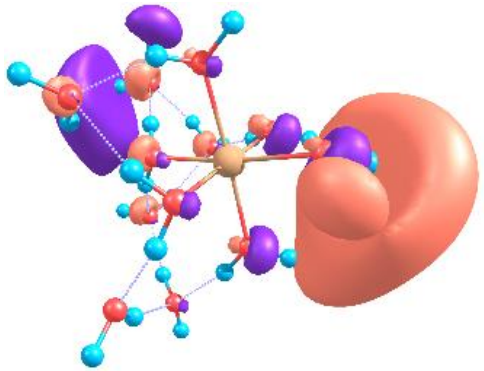


Vorteile und Nachteile der Quantenchemie

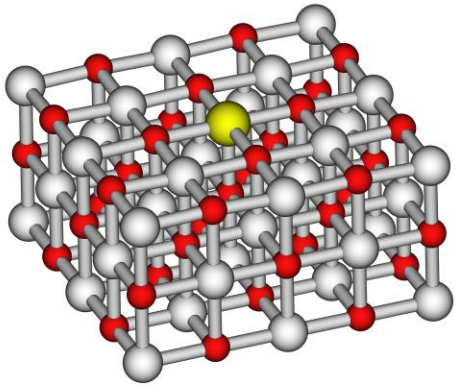
Nicht wirklich thematisch begrenzt: **Warum hat ein Molekül irgendwelche Farbe? Warum ist ein Molekül reaktiv? Wie funktioniert die (Photo)Katalyse? Was machen die Moleküle bei sehr kleinen Temperaturen? Wie schnell ist eine Reaktion?...**



Cs_2^+He



$Mg^+(H_2O)_n$



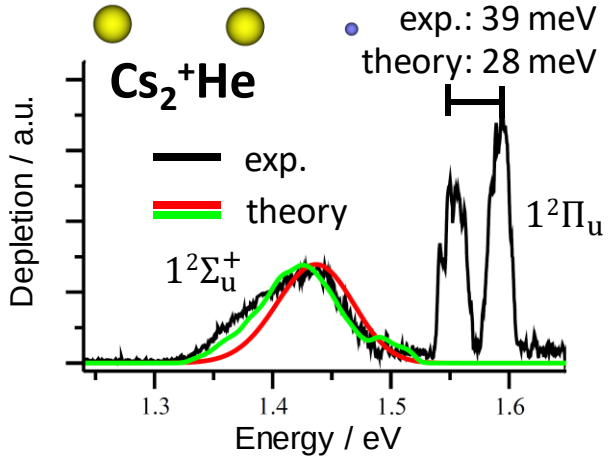
Co/MgO(001)

Eine Mischung der Physik, Chemie, IT und Mathematik

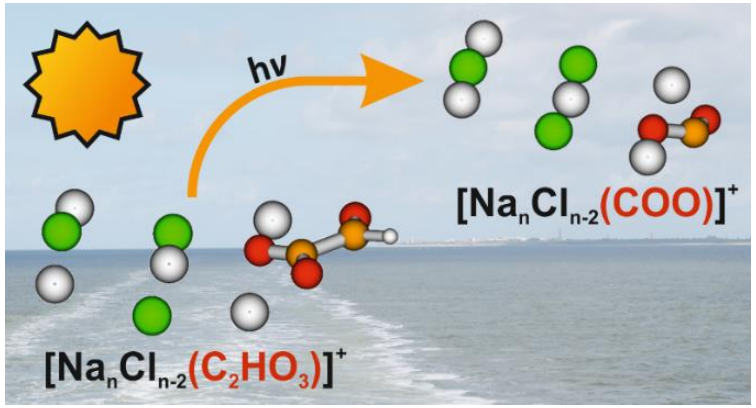
Man kriegt immer ein Ergebnis (gefährlich!)

Ein paar Themen aus meinem „Katalog“

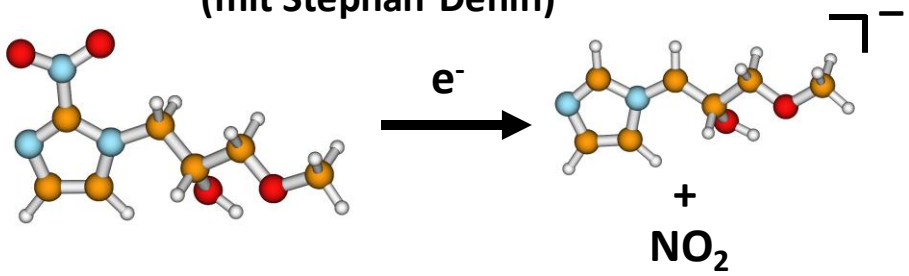
Photochemie von Ionen in Heliumtropfen
(mit Paul Scheier)



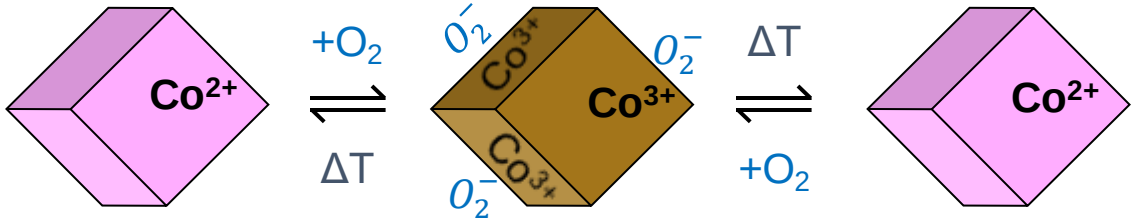
Atmosphärische Chemie, photochemische H_2-Entwicklung
(mit Martin Beyer)



Electron Attachment in Radiosensitizers
(mit Stephan Denifl)



Photochemie von Ionen auf der Oberfläche / im Festkörper
(mit Oliver Diwald, Salzburg)



+ Quantenchemie mit GPUs, Entwicklung von Methoden für Spektroskopie und effiziente Strukturoptimierung usw.