

ZUSAMMENFASSUNG

Dissertation von Ioan Cristian Morari: "Zeitabhängige Untersuchungen zu reaktiven Streuprozessen", Universität Siegen, Deutschland, 2001.

Nach einer kurzen Einführung in die Methoden zur Untersuchung reaktiver molekularer Prozesse (**Kapitel 1**) werden in **Kapitel 2** die gängigen Observablen bei Streuprozessen diskutiert. Zeitunabhängige und zeitabhängige Methoden werden in **Kapitel 3** dargestellt. Im **Kapitel 4** werden die Grundlagen für die Atom-Diatom Streuung, Koordinatensysteme und der Hamilton-Operator diskutiert. **Kapitel 5** beschreibt die Implementierung des FORTRAN-Programmes zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung: a) der Entwicklungsoperator wird in eine Reihe von Chebyshev-Polynomen entwickelt, b) die diskrete Variablen-Darstellung wird für die Darstellung von Wellenpaketen benutzt, c) die Fast-Fourier Methode wird für die Berechnung der kinetischen Energie benutzt, d) optische Potentiale dienen zur Festlegung der Randbedingung, e) im asymptotischen Bereich kann das Wellenpaket mit Hilfe einer "split-", Autokorrelations- oder Strömungs-Methode analysiert werden. Es können Wellenpaketuntersuchungen (mit Gesamtdrehimpuls $J \geq 0$) auf gekoppelten Potentialenergieflächen durchgeführt werden. Eine Version des Programms läuft effizient auf Parallel-Rechnern. Die $D+H_2(v=0, j=0) \rightarrow DH + H$ Reaktion diene als "benchmark" für das neu entwickelte Programm. Genaue und approximative Berechnungen von Wirkungsquerschnitten und Reaktionsgeschwindigkeiten werden in **Kapitel 6** dargestellt. Eine Wellenpaket-Simulation der Ladungsübertragungs-Reaktion $H^+ + H_2(v=0, j=0) \rightarrow H_3^+ \rightarrow H_2^+ + H$ wird am Ende von **Kapitel 6** vorgeführt.