

Chemia kwantowa

Wykładowca:

prof. dr hab. Stanisław Kucharski

Treści merytoryczne:

Przesłanki doświadczalne mechaniki kwantowej: promieniowanie ciała doskonale czarnego, zjawisko fotoelektryczne, zjawisko Comptona. Dualizm korpuskularno-falowy. Hipoteza de Broglie. Fale materii. Zasada nieoznaczoności Heisenberga, wielkości sprzężone: pęd - położenie, energia - czas. Teoria Bohra budowy atomu wodoru. Aksjomatyczna konstrukcja mechaniki kwantowej. Postulaty. Pierwszy postulat mechaniki kwantowej: funkcja falowa, porządność, normalizacja. Drugi postulat mechaniki kwantowej: operatory kwantowo-mechaniczne. Liniowość i hermitowskość. Przykłady operatorów kwantowomechanicznych. Trzeci postulat mechaniki kwantowej: równanie Schroedingera zależne od czasu. Stany stacjonarne. Zależność od czasu funkcji falowej w stanach stacjonarnych. Równanie Schroedingera nie zawierające czasu. Czwarty postulat mechaniki kwantowej: równanie własne operatora, wartości własne i funkcje własne, ortogonalność funkcji własnych operatora hermitowskiego, rzeczywiste wartości własne. Rozwijanie funkcji falowej na układ zupełny funkcji własnych. Notacja Diraca. Równanie Schroedingera dla cząstki swobodnej. Funkcje własne. Równanie Schroedingera dla cząstki w pudle potencjału. Wartości i funkcje własne. Kwantowanie wartości własnych. Rozkład poziomów energii translacyjnej. Równanie Schroedingera dla oscylatora harmonicznego. Wartości własne. Oscylacyjne funkcje własne. Stany oscylacyjne cząsteczek dwuatomowych. Przejścia oscylacyjne. Równanie Schroedingera dla rotatora sztywnego. Wartości własne. Degeneracja. Przejścia rotacyjne, rozkład intensywności. Równanie Schroedingera dla atomu wodoru. Wartości własne. Funkcja falowa dla pojedynczego elektronu. Spin, orbitale i spinorbitale. Korelacja z teorią Bohra. Jony wodoropodobne. Atomy wieloelektronowe. Zabudowa elektronowa atomu, powłoki, podpowłoki, konfiguracje elektronowe. Terminy atomowe. Zasada i metoda wariacyjna. Metoda Ritza. Przybliżenie jednoelektronowe. Funkcje jednoelektronowe w atomach i cząsteczkach. Pojęcie energii korelacji. Wiązanie chemiczne, orbitale i spinorbitale molekularne. Cząsteczka wodoru. Idea metody Hartree-Focka. Hybrydyzacja orbitali atomowych, cząsteczki wieloatomowe, bazy funkcyjne, przykłady obliczeń kwantowochemicznych. Metoda funkcjonałów gęstości (DFT).

Cele przedmiotu:

Zapoznanie studenta z podstawowymi pojęciami mechaniki i chemii kwantowej, przedstawienie najważniejszych możliwości wykorzystania chemii kwantowej do opisu struktury i własności cząsteczek chemicznych oraz zjawisk spektroskopowych.

Efekty kształcenia:

Student powinien rozumieć i stosować podstawowe pojęcia mechaniki kwantowej, umieć wyjaśnić strukturę elektronową cząsteczek organicznych i nieorganicznych, przeprowadzić proste obliczenia kwantowochemiczne.

Zalecana literatura:

1. A. Gołębiewski, Elementy mechaniki i chemii kwantowej, PWN, Warszawa 1982,
2. L. Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, Warszawa, 2004,
3. D.O. Hayward, Mechanika kwantowa dla chemików, PWN, Warszawa, 2006.