

Chemia – metody kwantowe. Aspekt wielodyscyplinarny

Lucjan Piela

1. Magia mechaniki kwantowej
2. Równanie Schrödingera i jego ścisłe rozwiązania (dla cząstki w pudle, oscylatora harmonicznego, rotatora sztywnego i atomu wodoru). Kluczowa rola tych rozwiązań w interpretacji zjawisk kwantowych, przykład: wykorzystanie do molekuł z aromatycznym układem wiązań (benzen, fulleren, nanorurki)
3. Metoda wariacyjna jako busola prowadząca do przybliżonych stanów kwantowych dowolnego układu
4. Fundamentalny charakter przybliżenia Borna-Oppenheimera („rozdzielenie ruchu jąder i elektronów”): koncepcja “struktury molekuł”, także podstawa interpretacyjna spektroskopii elektronowo-oscyłacyjno-rotacyjnej.
5. Ruch jąder: drgania normalne molekuł, pola siłowe i mechanika molekularna. Dynamika molekularna jako uniwersalne narzędzie do modelowania dowolnych procesów molekularnych (od oddziaływania molekuł przez pocisk rozbijający pancierz do mikronarzędzi).
6. Ruch elektronów (struktura elektronowa - wiązania chemiczne): minimalny model molekuły - orbitale molekularne (metoda Hartree-Focka, przybliżenie liniowej kombinacji orbitali atomowych - LCAO, lokalizacja orbitali molekularnych)
7. Poza modelem minimalnym czyli metody obliczeniowe zbliżania się do ścisłego rozwiązania (metoda oddziaływania konfiguracji - CI, metoda funkcjonału gęstości elektronowej - Density Functional Theory)
8. Pochodzenie i rola oddziaływań międzycząsteczkowych. Wstęp do chemii supramolekularnej, zasady działania w skali nano.

Wykład współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

