

Chemická struktura B

Elektronová struktura molekul

Lubomír Rulíšek, Martin Srnec

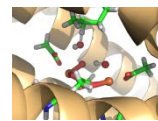
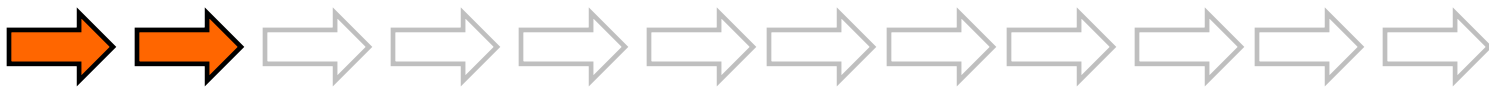
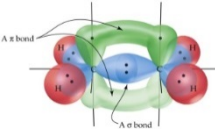
rulisek@uochb.cas.cz; srnec@jh-inst.cas.cz



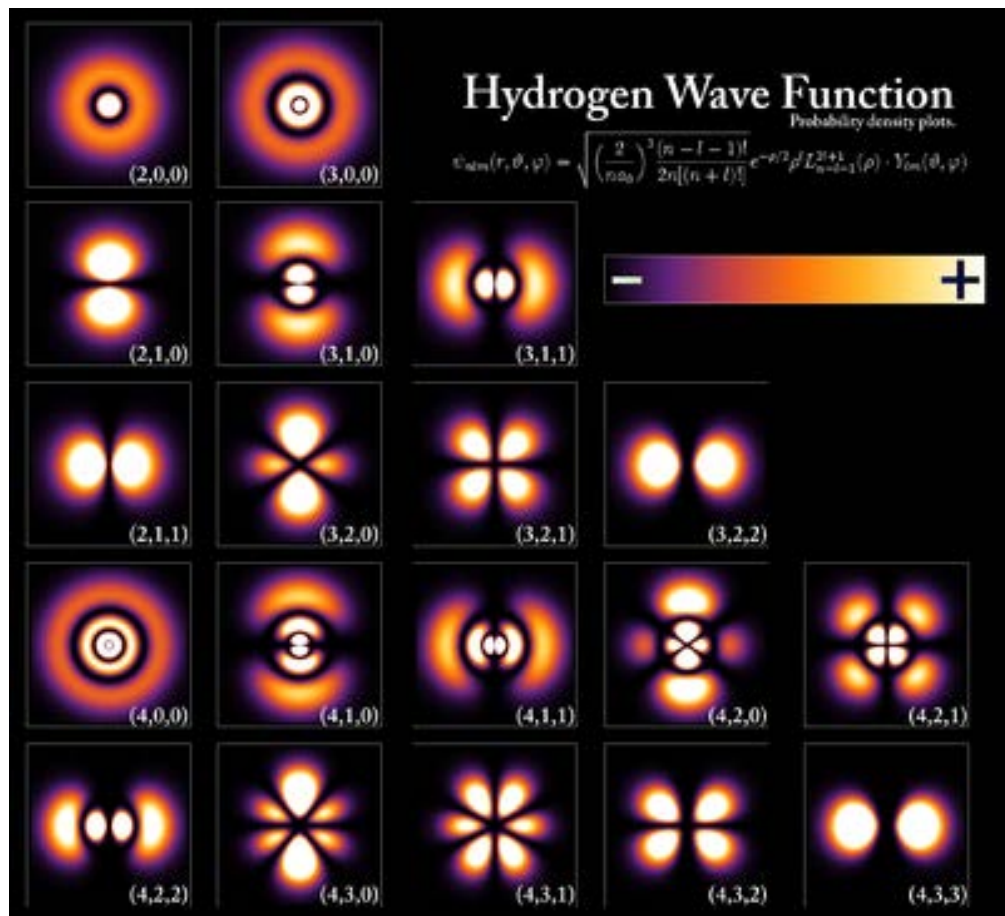
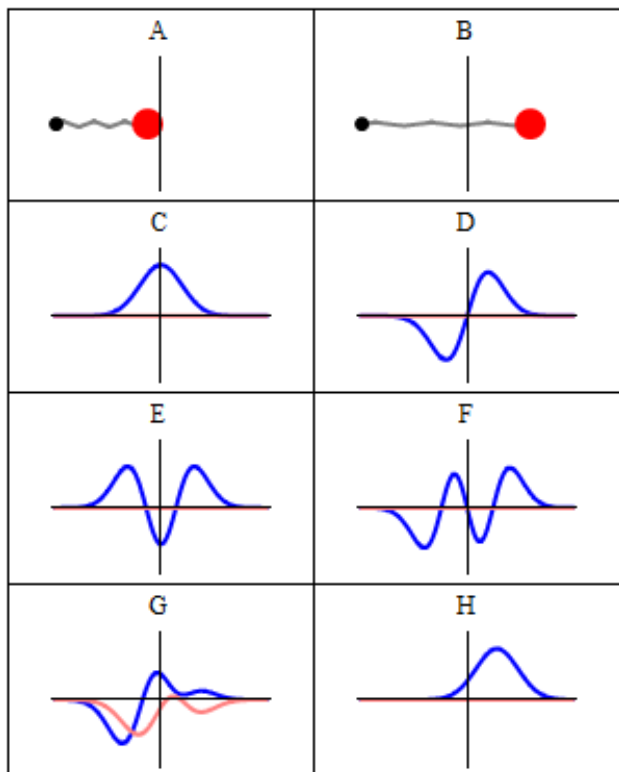
ÚOCHB AV
ČR
IOCB PRAGUE

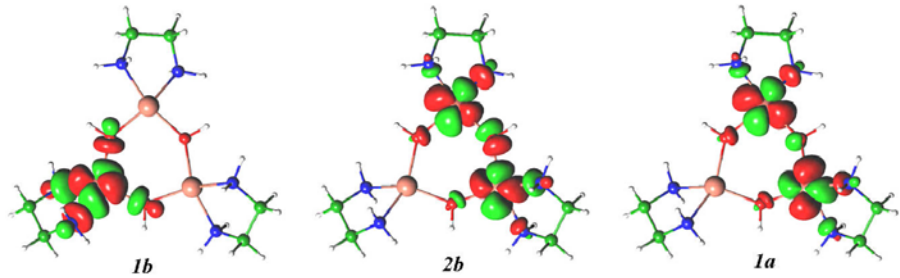
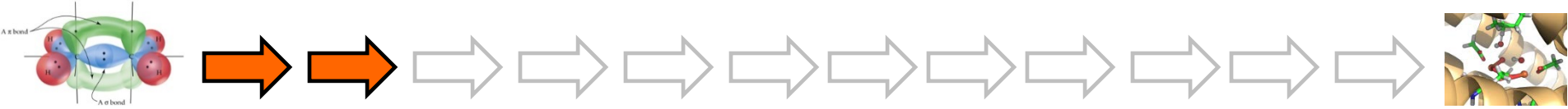


(2016/17: pondělí CH3 8:10–9:40, CH3 9:50–10:35)

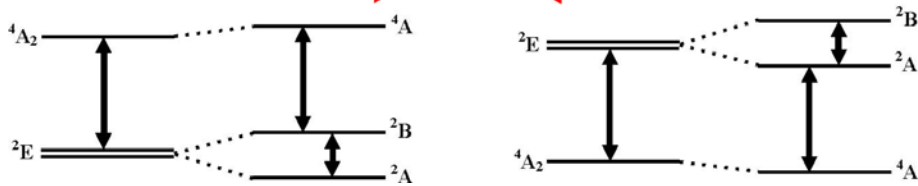


Motivace: od jednoduchých modelů k atomům (vodíku 😊)

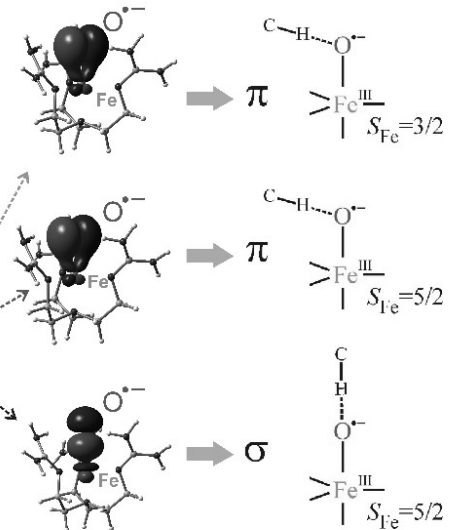
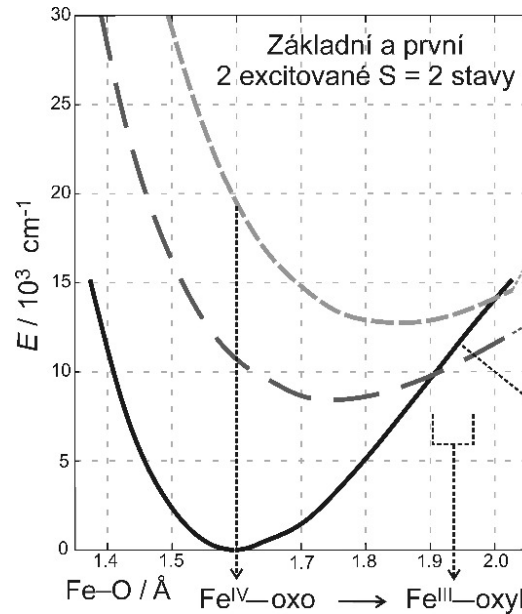


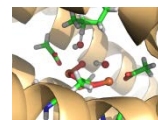
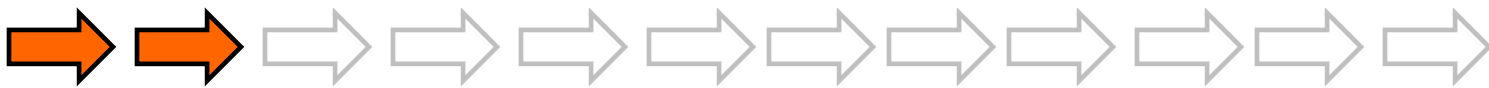
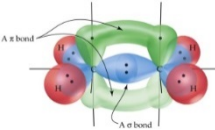


$$\begin{aligned}
 1^2A(D_1) &\sim 0.61((1a)^\alpha(1b)^2 - (1a)^\alpha(2b)^2) + 0.43(1a)^\alpha(1b)^\beta(2b)^\alpha - 0.25(1a)^\alpha(1b)^\alpha(2b)^\beta \\
 1^2B(D_2) &\sim 0.68((1a)^2(1b)^\alpha + (1b)^\beta(2b)^2) + 0.20((1b)^2(2b)^\alpha - (1a)^2(2b)^\alpha) \\
 1^4A(Q_1) &\sim 1.00(1a)^\alpha(1b)^\alpha(2b)^\beta
 \end{aligned}$$



Motivace: od atomu vodíku k elektronové struktuře komplexních molekulových systémů





Přednáška 2: Základy kvantové mechaniky (Atkins: Molecular Quantum Mechanics, větší část kapitoly 1)

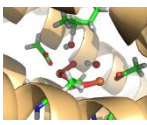
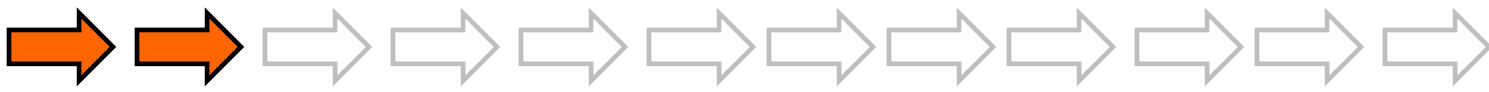
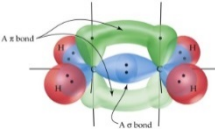
Formální struktura, postuláty kvantové mechaniky, vlnová funkce, operátory

Heisenberg - maticová formulace (*stavový vektor konstantní, operátory se mění v čase*)

Schrödinger – „vlnová“ formulace (funkce, diferenciální rovnice; *operátory konstantní, stavový vektor*)

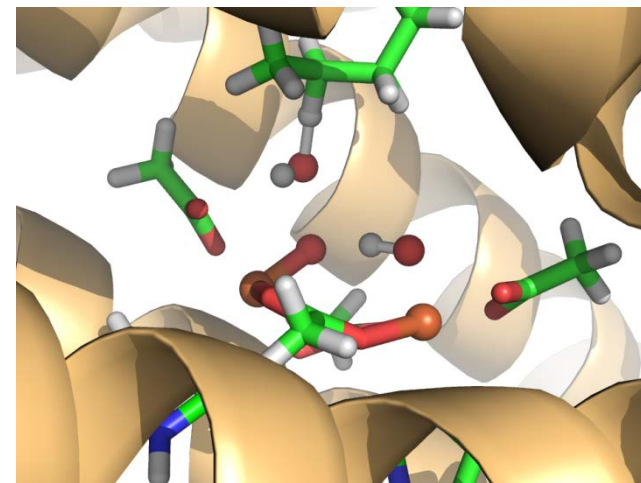
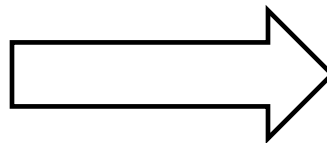
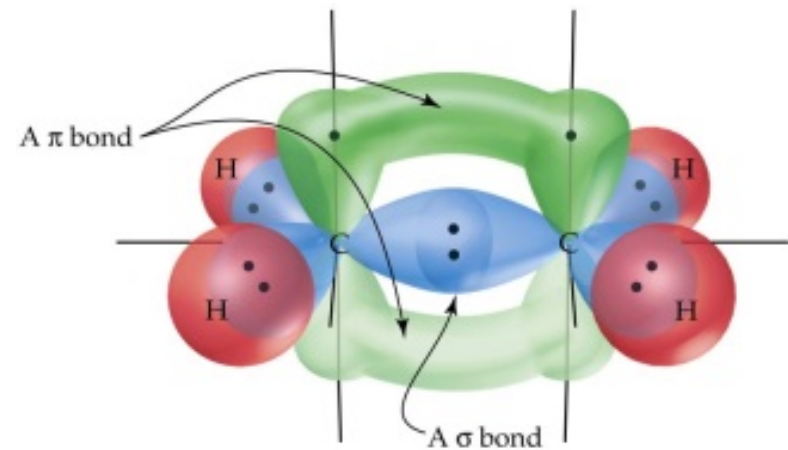
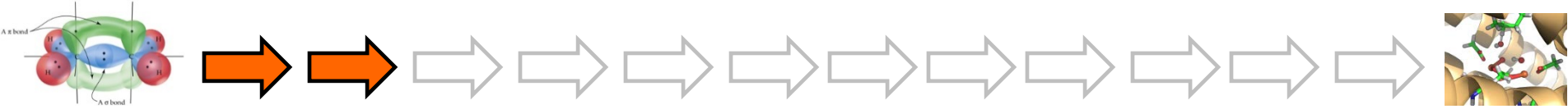
Později bylo ukázáno, že jde o dvě ekvivalentní formulace

Max Planck: „*Experiments are the only means of knowledge at our disposal. The rest is poetry, imagination*“



Podrobnější obsah přednášky 2

- Pozorovatelné veličiny v klasické a kvantové mechanice
- Operátory
- Vlastní funkce, vlastní hodnoty
- Rerezentace
- Komutační relace
- Konstrukce operátorů
- Integrály (z výrazů obsahujících operátory)
- **Postuláty kvantové mechaniky**
- Časově závislá a časově nezávislá Schrödingerova rovnice
- Hermitovské operátory
- Diracova „braket“ notace
- Vlastosti hermitovských operátorů
- Komplementarita veličin
- Princip neurčitosti
-



Paul Dirac: „*The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved.*“