**C9920: Úvod do kvantové chemie a elektronové struktury molekul**

**Sylabus pro období podzim 2015**

* 1. **ÚVOD DO STRUKTURY ATOMŮ A MOLEKUL**
  2. **Základní pojmy kvantové mechaniky** 
     1. Co je kvantová mechanika (QM) a na čem je založena?
     2. Stav systému v klasické a kvantové mechanice
     3. Pojem funkce jedné proměnné, Postulát o vlnové funkci
     4. Jak získat informace obsažené v Ψ?
     5. Dodatek k Postulátu o vlnové funkci: Bornova pravděpodobnostní interpretace
     6. Hodnoty fyzikálních veličin, operátory, vlastní funkce a vlastní hodoty
     7. Důležité QM operátory
     8. Postulát o operátorech
     9. Základní vlastnosti QM operátorů
  3. **Atom vodíku** 
     1. Schrödingerova rovnice pro elektron v poli jádra
     2. Symetrie problému, sférické polární souřadnice, atomové jednotky
     3. Dovolené hodnoty energie a atomová spektra
     4. Názvosloví vlnových funkcí
     5. Popis vlastních funkcí

1. Analytický tvar
2. Funkce 1s (*n* = 1, *l* = 0, *m* = 0) a 2s (*n* = 2, *l* = 0, *m* = 0)
3. Funkce 2p (*n* = 2, *l* = 0, *m* = +1, 0, −1)
4. Radiální hustota pravděpodobnosti

**1.3 Atomy s více elektrony**

**1.3.1** Orbitální aproximace, součet energií orbitalů vs. celková energie

**1.3.2** Matematický popis a názvosloví atomových orbitalů

**1.3.3** Výměnná symetrie VF, elektronový spin

**1.3.4** Elektronová konfigurace Li, antisymetrie VF

**1.3.5** Elektronové konfigurace atomů

(a) Pauliho princip výlučnosti

(b) Aufbau proces, Klechowského pravidlo

**1.3.6** Hundovo pravidlo

**1.3.7** Vnitřní a valenční elektrony

**1.3.8** Elektronové parametry mnohaelektronových atomů

(a) Stínění

(b) Efektivní náboj: Slaterova pravidla

(c) Orbitální poloměry a velikost atomu

**1.3.9** Vývoj atomových vlastností v periodické tabulce

(a) Trendy v efektivních nábojích vnímaných valenčními elektrony

(b) Trendy v atomových poloměrech

(c) Trendy v orbitálních energiích

**1.3.10** Vztahy k měřitelným vlastnostem

(a) Ionizační potenciál a elektronová afinita

(c) Škály elektronegativity

* 1. **VÝSTAVBA MO A ELEKTRONOVÁ STRUKTURA**
  2. **Interakce dvou atomových orbitalů na různých centrech** 
     1. Základní aproximace:

1. Bornova-Oppenheimerova
2. Orbitální
3. MO-LCAO
   * 1. Konstrukce MO
4. Interakce dvou identických AO
5. Interakce dvou různých AO
6. Orbitaly s nulovým překryvem
   * 1. Aplikace na některé jednoduché dvouatomové molekuly
7. Pravidla pro zaplňování hladin
8. Systémy se 2, 4, 1 a 3 elektrony
   * 1. Překryv a symetrie
9. Překryv 1s/1s, překryv 2p/2p, překryv 1s/2p
10. Překryvové integrály nulové díky symetrii
11. Elementy symetrie

**2.1.5** Aplikace konceptů symetrie na některé polyatomické molekuly

(a) / separace

(b) MO ethylenu a formaldehydu

* 1. **Metoda fragmentrových molekulových orbitalů**
     1. MO některých modelových systémů, H*n*

1. Čtvercově planární a obdélníková H4
2. Lineární H3
3. Lineární H4
4. Triangulární H3
5. Tetraedrální H4
6. Hexagonální H6
   * 1. Vliv elektronegativity na tvar a energii MO
   1. **Interakce mezi dvěma fragmentovými orbitaly**
      1. Lineární molekuly AH2
7. Symetrickévlastnosti fragmentových orbitalů
8. MO lineární AH2 a aplikace na BeH2
   * 1. Trigonálně planární molekuly AH3
9. Symetrickévlastnosti fragmentových orbitalů
10. MO trigonálně planární AH3 a aplikace na BH3
    * 1. Tetraedrální molekuly AH4
11. Symetrickévlastnosti fragmentových orbitalů
12. MO tetraedrální AH4 a aplikace na CH4
    1. **Interakce mezi třemi fragmentovými orbitaly**
       1. Pravidla pro interakci tří orbitalů
13. Formulace problému
14. Pravidla pro konstrukci MO
    * 1. Elektronová struktura molekul AH
15. Formulace problému a tvary MO
16. Elektronová struktura LiH, BH a FH
    * 1. Lomené molekuly AH2
17. Symetrie fragmentových orbitalů
18. Interakční diagram a MO pro H2O
    * 1. Pyramidální molekuly AH3
19. Symetrie fragmentových orbitalů
20. Interakční diagram a MO pro NH3
    1. **Interakce mezi čtyřmi fragmentovými orbitaly**
       1. Homonukleární diatomické molekuly A2
       2. Heteronukleární diatomické molekuly AB
    2. **Velké molekuly**
       1. MO acetylenu, ethylenu a ethanu
       2. Konjugované polyeny
    3. **ÚVOD DO STUDIA GEOMETRIE A REAKTIVITY**

**3.1 Orbitální korelační diagramy: Modelové systémy H3+ a H3-**

**3.1.1** Pravidla pro kreslení orbitálních korelačních diagramů

**3.1.2** Orbitální korelační diagram pro ohýbání H3

**3.1.3** Geometrie H3+

**3.1.4** Geometrie H3− a pravidlo nejvyššího obsazeného MO

**3.2 Geometrie molekul AH2 a AH3**

**3.2.1** Molekuly AH2

(a) Orbitální korelační diagram mezi lineární a lomenou strukturou

(b) Geometrie molekul AH2

**3.2.2**  Molekuly AH3

(a) Orbitální korelační diagram mezi trigonální a pyramidální strukturou

(b) Geometrie molekul AH3

**3.3 Úvod do studia chemické reaktivity**

**3.3.1** Popis chemické reakce

**3.3.2** Aproximace hraničních orbitalů

**3.3.3** Cykloadiční reakce

**Literatura:**

Y. Jean, F. Volatron, *An Introduction to Molecular Orbitals,* Oxford University Press, Oxford, 1993.

John P. Lowe: *Quantum Chemistry - 2nd ed*, Academic Press, San Diego, California, 1993.

Obě učebnice budou zveřejněny ve studijních materiálech ISu.

**Zkouška**: Písemná + ústní v rámci řádného ZK období.