



---

## 1. PREDMET: STRUKTURA ATOMOV IN MOLEKUL

---

Šifra: 30-0016

Število kreditnih točk (ECTS): 10,5

Obseg ur: 135; predavanja 90, seminarji 45

Program: univerzitetni študijski program Kemija

---

## 2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

---

Pri predmetu naj bi slušatelji poglobili razumevanje o strukturi in lastnosti snovi. Te naj bi se naučili napovedovati iz osnovnih principov, ki temeljijo na kvantni mehaniki. Predmet jih seznanja s koncepti kvantne mehanike ob uporabi najnujnejšega matematičnega formalizma, z osnovami metod kvantne kemije in uporabo teh metod za razlago bistva kemijske vezi, z obravnavo kemijske vezi in reaktivnosti ter daje kvantne osnove eksperimentalnih metod in smisel za logično mišljenje. Študentje se seznanijo s formalnimi koncepti, ki jih kasneje potrebujejo pri študiju strokovne literature. Potrebno je osnovno znanje matematike (linearna algebra, diferencialni in integralni račun, navadne in parcialne diferencialne enačbe) ter fizike (klasična mehanika, elektrika in magnetizem), ki se pri predavanjih in na seminarjih obnavlja in dopolnjuje. Pri vajah se znanje, pridobljeno na predavanjih, utrjuje ob obravnavi konkretnih realnih in modelnih primerov. Poudarek je na računanju, pri čemer se utrjuje tudi znanje matematike in fizike, ki ga je študent pridobil v nižjih letnikih.

---

## 3. VSEBINA

---

*Uvod v kvantno mehaniko.* Modeli atoma (Rutherford, Bohr), Rutherford - Geigerjev poskus. Kvantni pojavi. Dvojnost narave. Heisenbergov princip nedoločljivosti. Bohrov princip korespondence. Valovna enačba za struno. Schrödingerjeva enačba, valovne funkcije, verjetnostna gostota in verjetnost, princip superpozicije. Kvantnomehanski operatorji, konstruiranje, kvantnomehansko povprečje. Enačbe za lastne vrednosti, lastni vektorji. Hermitski operatorji, komutatorji in komutacija.

*Modelni sistemi.* Gibanje kvantnega delca ob preprostejših pregradah in v potencialnih jamah (energije, valovne funkcije, izrojenost). Togi in netogi rotator. Harmonski in anharmonski oscilator. Momenti prehoda, Einsteinovi koeficienti.

*Teorija grup.* Osnove teorije grup. Točkovne grupe. Simetrijske operacije.

*Metode približnega računanja.* Variacijska metoda. Linearna variacijska metoda. Teorija motenj (neizrojeni in izrojeni sistemi).

*Atomi.* Vodikov in vodiku podoben atom (Schrödingerjeva enačba, način reševanja, lastne funkcije in lastne vrednosti), primerjava z rezultati Bohrovega modela, radialna verjetnostna gostota, najbolj verjetni in povprečni radij. Helijev atom. Perturbacijska metoda: osnovno in vzbujeno stanje v ničelnem približku, prvi popravek, orto- in parahelij, prehodi med osnovnimi in vzbujenimi stanji. Variacijski pristop za helijev atom. Orbitalna vrtilna količina in magnetni moment elektrona. Spinska vrtilna količina (operatorji in njihove lastnosti, spinsko - orbitalna sklopitev). Spinski magnetni moment, giromagnetno razmerje. Atomi v

magnetnem polju (normalni in anomalni Zeemanov efekt, Stern - Gerlachov poskus). Paulijev princip (simetrične in antisimetrične valovne funkcije, Slaterjeva determinanta). Hartreejeva in Hartree - Fockova SCF metoda za atome. Paulijeve sile. Hundova pravila. Sklapanje vrtilnih količin pri atomih z večimi elektroni (LS in jj sklopitev). Sklapanje magnetnih momentov pri večielektronskih atomih, Landéjev faktor g. Ionizacijski potenciali, elektronske afinitete, efektivni radiji. Elektronska konfiguracija atomov in periodni sistem.

*Metoda molekularnih orbital (MO) in metoda valenčnih vezi (VB).* Metoda molekularnih orbital (Heitler in London), LCAO približek, obravnavanje sistemov  $H_2^+$  in  $H_2$ . Metoda valenčnih vezi (Slater in Pauling), sistem  $H_2$  z metodo valenčnih vezi. Uporaba linearne variacijske metode za določanje koeficientov MO in VB funkcij, ekvivalentnost obeh funkcij, če uporabimo najboljše koeficiente. Povezava med obema metodama.

*Dvo- in večatomne molekule.* Slike in označevanje molekulskih orbital. Neto valenčnost. Hibridne orbitale (vpeljava in grafična predstavitev). Princip maksimalnega prekrivanja. Dipolni momenti hibridnih orbital. Dipolni momenti molekulskih orbital. Elektronegativnost (definicija, skala po Paulingu, skala po Mullikenu). Ionski karakter vezi. Večatomne molekule: elektronski problem (Hartree - Fockove enačbe, Roothaanove enačbe, postopek samouglašene polja - SCF, zgradba računalniških programov). Interakcija konfiguracij. Korelacijska energija. Semiempirične metode ( $\pi$ , ZDO), Hückelova metoda ( $\sigma$ - $\pi$  separacija, aromatičnost in pravilo  $4n+2$ , alternirajoči in nealternirajoči ogljikovodiki). Strukturni indeksi in reaktivnost molekul. Fulereni (zgodovina, teoretični in eksperimentalni koraki pri odkrivanju fullerenskih struktur, možnosti uporabe).

*Kvantnomehanske osnove spektroskopije.* Splošno o molekulskih spektrih. Izbirna pravila. Boltzmannova porazdelitev za nedegenerirane in degenerirane nivoje. Born - Oppenheimerjev približek za molekule. Širina spektralnih črt (naravna širina, razširitev zaradi Dopplerjevega pojava). Čisti rotacijski spektri (približek togega rotatorja, degeneriranost nivojev, zasedenost, izbirna pravila, račun ravnovesnih razdalj). Starkov efekt pri rotacijskih spektrih. Vibracijski spektri dvoatomnih molekul (približek harmonskega oscilatorja, anharmoničnost in energija disociacije). Vibracijsko aktivna nihanja večatomnih molekul. Vibracijsko - rotacijski spektri dvoatomnih molekul. Elektronski spektri (vibracijska in vibracijsko - rotacijska struktura), Franck - Condonov princip. Ramanski spektri (princip, rotacijski in rotacijsko - vibracijski ramanski spektri). Neradiacijski procesi deaktivacije (interna konverzija, fluorescenca, fosforescenca). Fotoelektronska spektroskopija (princip, vibracijska struktura črt, rentgenska fotoelektronska spektroskopija, ESCA). Jedrska magnetna resonanca (osnove in eksperiment, kemijski premik, spin - spin konstanta sklopitve, NMR v tekočinah in trdnih snoveh). Elektronska spinska resonanca. Vodikov atom v magnetnem polju.

Seminar iz Strukture atomov in molekul: računske naloge iz predelane snovi

---

#### 4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

---

Za razumevanje predmeta potrebuje študent osnovno znanje matematike in fizike. Naslanja se na predmet Fizikalna kemija ter teoretično dopolnjuje predmeta Anorganska in Organska kemija ter predmet Instrumentalna analiza.

---

#### 5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

---

OSNOVNI UČBENIKI:

- Koller, J. *Struktura atomov in molekul – osnove kvantne mehanike, atomi*, Ljubljana: FKKT, 2002.

- Koller, J. *Struktura atomov in molekul – molekule, osnove spektroskopije*, Ljubljana: FKKT, 2000.

DODATNA LITERATURA:

- Koller, J. *Struktura atomov in molekul – zbirka nalog z rešitvami* Ljubljana: FKKT, 1998.
- Szabo, A. in Ostlund, N. S. *Modern Quantum Chemistry* McGraw-Hill, 1989.
- Pilar, F. L. *Elementary Quantum Chemistry* McGraw-Hill, 1992.
- Karplus, M. in Porter, R. N. *Atoms and Molecules* New York: Benjamin, 1970.
- Atkins, P. W. *Physical Chemistry* (peta izdaja), Oxford: Oxford University Press, 1994.

---

## 6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

---

Pisne vaje, pisni in ustni izpit.

**PRIPRAVIL:** Jože Koller

**DATUM:** 18. 7. 2003