

Kazalo

1	Uvod	1
1.1	Thomsonov poskus	1
1.2	Millikanov poskus	4
1.3	Črtasti spekter plina	6
1.4	Fotoefekt	8
1.5	Bohrov model atoma	11
1.6	Stern-Gerlachov poskus	13
1.7	Valovne lastnosti elektronov – Davisson-Germerjev poskus	15
1.7.1	Valovne lastnosti elektronov in Bohrov model atoma	17
1.7.2	Heisenbergovo načelo nedoločenosti	18
2	Uvod v kvantnomehanski opis fizikalnih sistemov	21
2.1	Schrödingerjeva enačba	21
2.1.1	Lastnosti valovne funkcije	22
2.1.2	Kvantnomehanski operatorji	23
2.2	Delec v prostoru brez polja – prosti delec	26
2.3	Delec v neskončno globoki potencialni jami	27
2.3.1	Razširitev na tridimenzionalno potencialno jamo	30
2.4	Delec v končno globoki potencialni jami	31
2.4.1	Prehod delca skozi energijsko bariero – tunelski pojav	32
3	Kvantnomehanski opis atomov	37
3.1	Opis vodikovega atom z valovno funkcijo	37
3.1.1	Lastnosti vodikovega atoma	41
3.2	Metode za približno računanje	48
3.2.1	Variacijska metoda	48
3.2.2	Metoda motnje	50
3.3	Paulijevo izključitveno načelo	52
3.4	Hundovo pravilo multiplicitete	53
3.4.1	Primerjava energij stanj z različno multipliciteto za 1. vzbujeno stanje atoma He	54
3.5	Opis večelektronskih atomov – Hartree-Fockova metoda	55
3.5.1	Orbitale v večelektronskih atomih	57

4	Kvantnomehanski opis molekul	59
4.1	Metoda valenčne vezi	59
4.1.1	Razlaga nastanka molekule vodika s teorijo valenčne vezi	59
4.1.2	Hibridne orbitale	63
4.2	Metoda molekulskih orbital	65
4.2.1	Razlaga nastanka molekule vodika s teorijo molekulskih orbital	65
4.3	Hartree-Fockova metoda za molekule – Roothaan-Hallove enačbe	69
4.3.1	Bazne funkcije in bazni seti	72
4.4	Semiempirične metode	73
4.5	Molekulske lastnosti	73
4.5.1	Oblika molekule – molekulska površina	73
4.5.2	Ionizacijski potencial in elektronska afiniteta	74
4.5.3	Električni dipol – polarnost molekule	75
4.5.4	Elektrostatični potencial	77
4.5.5	Parametri polj sil	77
5	Molekulskomehanski opis molekul – polja sil	81
5.1	Uporaba polj sil	82
5.1.1	Določanje konformacije molekule	82
5.1.2	Določanje lastnosti skupine molekul	83
6	Struktura proteinov	85
6.1	Gonilne sile pri procesu zvijanja proteinov	88
6.1.1	Hidrofobne interakcije	88
6.1.2	Van der Waalove kratkosežne interakcije	92
6.1.3	Vodikove vezi	92
6.1.4	Elektrostatične interakcije	93
6.2	Iskanje native konformacije proteinov	93
6.2.1	Enostaven model zvijanja proteina	93
7	Dodatna literatura	97