
Didactica
D!dact!ce
Cover Me
(DM)
space
initial
final
time
coherence
divergence
interference
1 Science Symphony
2. QM in 60s
5. Cover Me DM


Space Oddity
David Bowie
David Bohm
(Hidden Variables!)
Experimentul cu Două Fante
- La Originea Minunii Cuantice
Particle
Arrow
Romantic
Asymptotic
white - black
Waves Particles as a Whole
(Nature of Things)


Experimentul cu Două Fante
La Originea Moleculei Cuantice
Paradox → 1). Interferența e⁻ în timp!
2) Divizarea e⁻
LUMO
Anti-Bond.
Bond


Quantum Poetry
Viața
Puneți-vă
și dați-vă
(un) răspuns!
GAP
TRANSITION
MISSION
Others

Fields

V (potential)

Forms

Entanglement Waves

Molecule

Atom R

Q

Energy

P

Doppler Effect

Future

Decoherence

Front

Past

Coherence

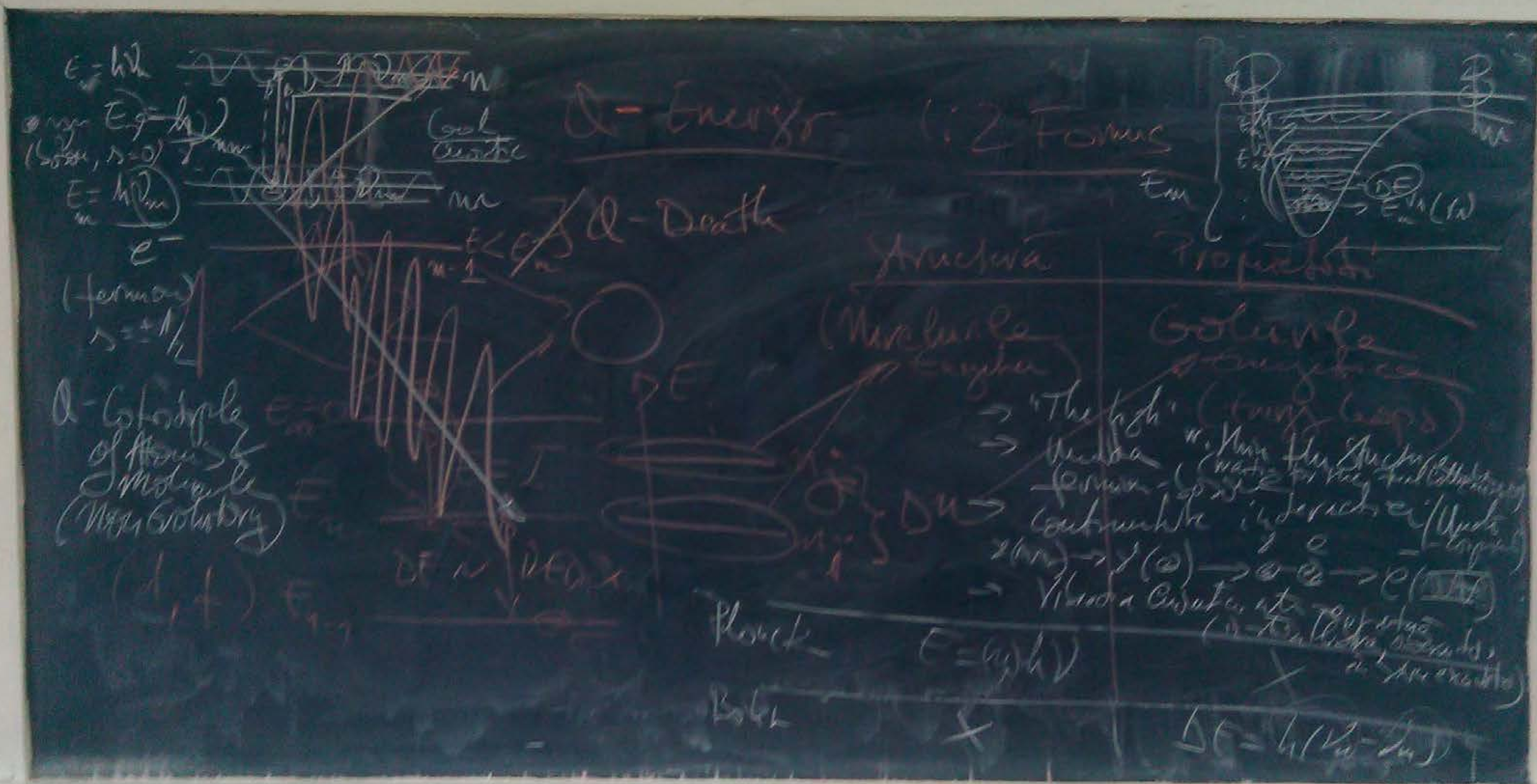
Q - Atom
Quantum-Dots

Vortices

Filling the whole space
(Ergodicity)

Scattering


Gaps
Colour
Temperature
Q-Secrets / Q-Play / 60"-Q
(Future → Death of universe)
Primordial Scream
Dust
Wind
Collapse
Standing Waves
Cold
Box
Vacuo
Photon (8)
Light
Cat
Wind
Dead
Alive
Scattering
Superposition
Connection
(Entangled)
Don't Touch
Atom
Dark


Q - Energy
Q - Death
Planck
Bohr

Quantum Statement
Undă
Nature
Particulă
the small Big Bang
Cuantica
Relativitatea
in evolution
in Reference Relative

Quantum Statement
molecula
legătură
particule
ecuatie
sferă
interactiuni
atom
foton
light
time
electron
paralel
direcție
număr
suflet
meditatie
iubire
necunoscut
experiment mintal
melancolie
fizică
Etic
Poetic
Mistic
Wave = Representation of THINGS of every-thing!!
Soul =

Observability Issue
(Problema Observabilității)

Idă Molecule

"Molecula X"

- Formulă / Structură / Proprietăți
- Nume / ACS - American Chemical Society

→ (&) Key Words: + Observability → Science Direct
(.pdf, .ppt, .doc)

Structură → Proprietăți
(Basic) "Latente"
("plus")

→ Rezumat (max 1 pag)
(cu Bibliografie)

III → Master → PhD → PostDoc

Funcționalizare
"Nano-Inteligentă"
("Premium/Gold")

Observabilitatea Molecule X
as a Property

Despre Observabilitate (Cuantică)
Universul
ierarhic
integrat
Feed Back
At
Mol
Bio Mol
Organism
Bio-sisteme
Populații
Indivizi
Entropiei
"Death"
Declinul!
Loop
(0,0)
Evoluție Entropie/Time


Universal Dual
OBSERVABILITATE
Unde & Corpusculi
Planck
Energie
de Broglie
integrator: space-time continuum
Phase
not observable!


OBSERVABILITATE
Non-Touch()
φ = ħ(Et − px) = ωt − kx
Classical Version
Quantum
E = √(m₀²c⁴ + c²p²)
Varianta (x, t) → ∃ Dφ
∃ Mișcare → ∃ Viteze
dφ = 0 = d(ωt − kx) = ωdt − kdx
dx/dt = ω/k


(și Proprietăți)
Ecuații Cuantice Fundamentale
time
Planck
de Broglie
space
wave
Reality
(eigen-function)
(coupling/colapse)
Cu ce probabilitate?
SRMI
(SRMI)
(eigen-system
"in sine"


(și Proprietăți)
Ecuații Cuantice Fundamentale
"eternă"
+ Autocuplarea!
Heisenberg!


ħ = h / 2π
(şi Proprietăţi)
Ecuaţii Cuantice Fundamentale
p = ħk
⇒ k = p / ħ
ψ(x) = e^{i/ħ kx} → ∫ e^{i/ħ px} dp → ∫ ψ(p) e^{i/ħ px} dp
kx = 2π/λ x
ψ(p) = ∫ A(x) e^{i/ħ p·x} dx → ∫ ψ(x) e^{-i/ħ p·x} dx
ψ "eternă"
+ Autocuplarea!
"Undă"
→ "transformă ciclic în sa însăşi"
1 = 1/(2πħ) ∬ dx dp
ΔX·ΔP = 2πħ = h
Heisenberg
1 ⇒ ΔX ΔP ≥ h (2πħ)
ψ(x) = 1/(2πħ) ∬ ψ(x) dx dp
transformări
1/ħ (p x)

$x \cdot y = a \quad \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$

Ecuații (și Proprietăți) Cuantice Fundamentale

Ecuația Heisenberg

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = 2\pi\hbar}$$ (eg. ipotetica)

(ec. de stabilizare cuantică (eigen) nedeterminarea la observabilitate

⇒ caract. de nedeterminare (în sensul incompletitudinii cunoașterii din exteriorul sistemului/sistemelor)

$\Delta x \, \Delta p = \hbar \qquad \geq \hbar$

→ Cazul Atomului (Bohr)

$2\pi r_n \cdot \frac{p_n}{n} = 2\pi\hbar$

$\Rightarrow r_n \, p_n = n\hbar$

ec. cuantif. e⁻ în Atom (poziții circulare)

A: $n = 1$ | $r_1 p_1 = A_1$ (Atomul stabil cuantic)

eigen-stabilizare cuantică

$\Delta x_n = 2\pi r_n$

$\Delta p = p_n$

Forma energiei totale (cuantificată) (de cuantificare) ←

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze_0^2}{r} = E(r,p)$$

Stabil. energetică $\frac{\partial E}{\partial r(p)} = 0$ $\qquad e_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$

Nedeterminarea e⁻ în Atom (non-stabil) Atomului


Ecuatii Cuantice Fundamentale
(si Proprietati)
t = 0
x = 0
eq. Schrödinger

Quantum Dialogs
(Dialoghi Quantici)

	A_1	B_1	A_2	B_2	A_3	B_3	A_4	B_4
Q_1	Cosa è un quanto	...	Cosa è luminoso?	...		Dualità onda-corpuscolo		Complementarità onda-corpuscolo
Q_2								
Q_3								
Q_4								
Q_5								
Q_6								
...								

Proprietăți Cuantice ale Materiei
Se dă
1) SPINUL
2) SUPERPOZABILITATE
3) CONTINUITATE
4) OBSERVABILITATE
b măsurabilitatea
5) NORMARE
a unică
b probabilă
6) ENERGIA OPTIMĂ
Care este spinul electronic?
teoria Dirac
"part-antipart"
teoria cuantică
diagrama Feynman

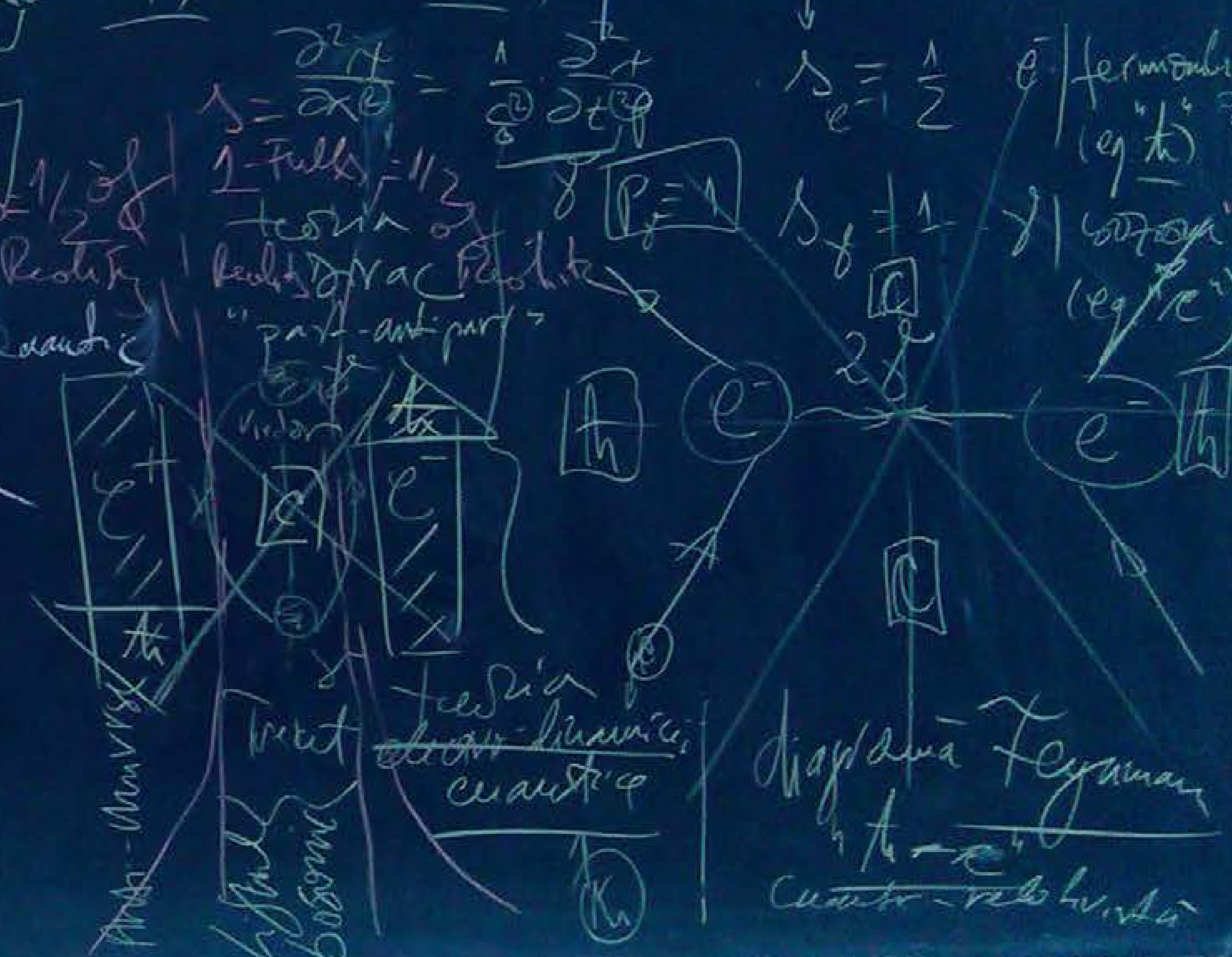
Proprietăți Cuantice ale Materiei

Se dă ec Schrödinger: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_{(t,x)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_{(t,x)} + V(x)\psi_{(t,x)}$

Care este spinul electronic?

1) SPINUL
2) SUPERPOZABILITATE
3) CONTINUITATE
4) OBSERVABILITATE
   - (a) "eigen - înghețată cuantic"
   - (b) măsurabilitatea
5) NORMARE
   - (a) unică
   - (b) probabilă
6) ENERGIA OPTIMĂ (eigen - minimă - observată)

$s_e = \frac{1}{2}$



Proprietăți Cuantice ale Materiei

1) SPINUL
2) SUPERPOZABILITATE
3) CONTINUITATE → "ψ"
4) OBSERVABILITATE → a) "eigen"-"ansamble" cuantice; b) măsurabilitatea
5) NORMARE → a) Unică; b) Probabilă
6) ENERGIA OPTIMĂ (eigen – minimă – observată)

→ "UNDA" (de informație)

$\lim_{x \to \pm\infty} \psi(x,t) = 0$

$\lim_{t \to -\infty} \psi(x,t) = ?$ ("Big Bang")

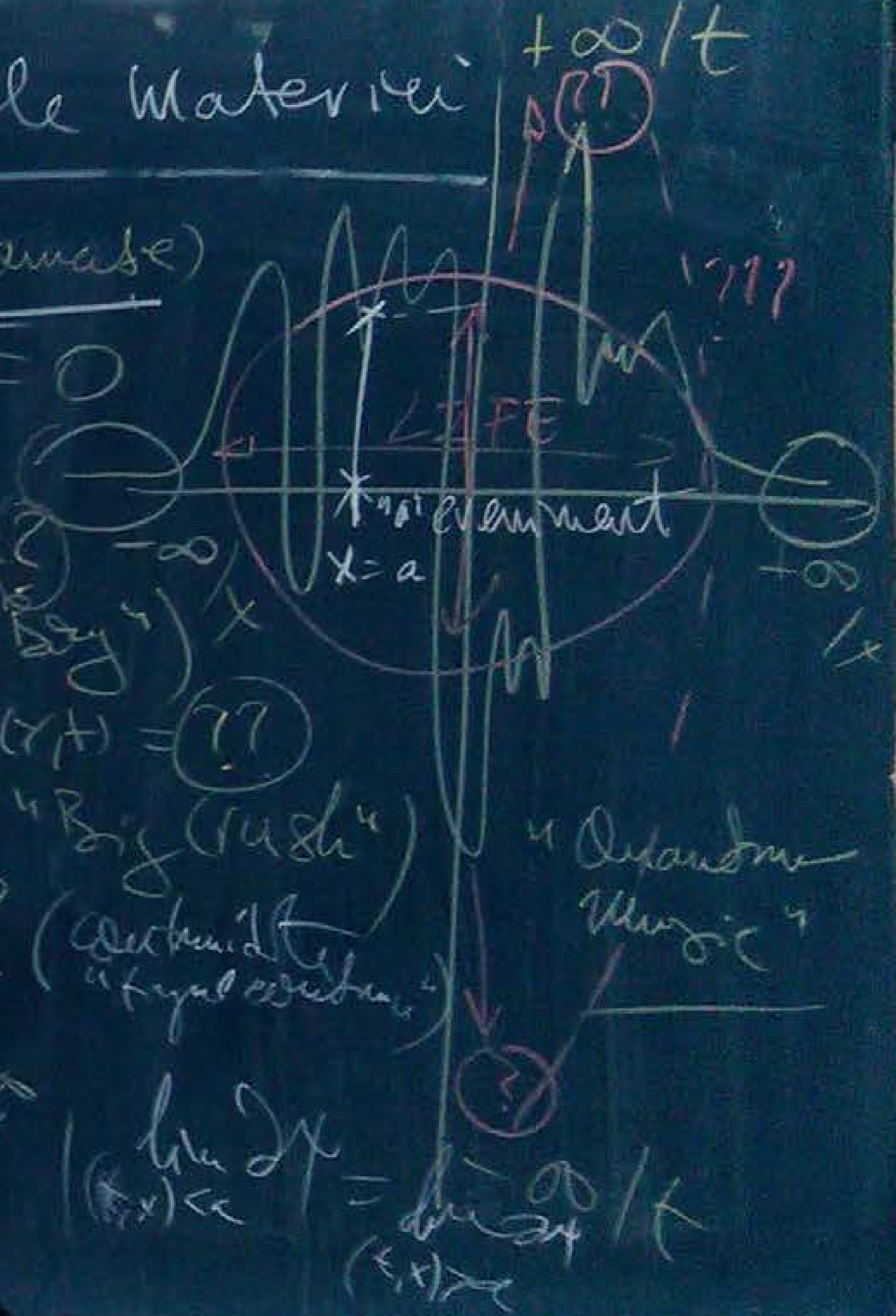
$\lim_{t \to +\infty} \psi(x,t) = ??$ ("Big Crush")

??? ?? (continuitate "fizică eveniment")

$\lim_{t \to -\infty} = \lim_{t \to +\infty}$

$\lim_{(t,x)<a} \psi = \lim_{(t,x)>a} \psi$

$\lim_{(t,x)<a} \partial\psi = \lim_{(t,x)>a} \partial\psi$




Proprietăți Cuantice ale Materiei
1) SPINUL
2) SUPERPOZABILITATE
3) CONTINUITATE
4) OBSERVABILITATE
b) măsurabilitate
5) NORMARE
a) unică
b) probabilă
6) ENERGIA OPTIMĂ
(eigen – minimă – observată)
Operator
Energia
măsurate
probabilitate

Proprietăți Cuantice ale Materiei
1) SPINUL
2) SUPERPOZABILITATE
3) CONTINUITATE
4) OBSERVABILITATE
a) (necunoscut / UNKNOWN)
b) măsurabilitate (?E)
5) NORMARE
a) unică
b) probabilă
6) ENERGIA OPTIMĂ

Proprietăți Cuantice ale Materiei $P_{(\psi)} \xrightarrow{\Gamma \to \infty} 1$

1) SPINUL
2) SUPERPOZABILITATE
3) CONTINUITATE
4) OBSERVABILITATE
   - a) "eigen" – "însușiri" cuantic (necunoscut / UNKNOWN[illegible])
   - b) măsurabilitate (?E)
5) NORMARE
   - a) unicitate
   - b) probabilă
6) ENERGIA OPTIMĂ (eigen – minima – observabilă)

$$\int_\Gamma \psi^* \hat{H} \psi \, d\Gamma = \int_\Gamma \psi^* E \psi \, d\Gamma = E \int_\Gamma \psi^* \psi \, d\Gamma \xrightarrow[\text{observabil}]{\Gamma \to \infty} (E)$$

(valoare, complexă)

$$E = \begin{cases} \Gamma / \Gamma \to \infty : \; E = \dfrac{\int_\Gamma \psi^* \hat{H} \psi \, d\Gamma}{\int_\Gamma \psi^* \psi \, d\Gamma} \\ \Gamma \to \infty : \; E = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H} \psi \, d\Gamma \end{cases}$$

optimizare energie

prin (conține minimul energiei observabile)

$$\delta E = 0$$

OBSERVABIL / NATURAL[illegible]

Proprietăți cuantice ale materiei

Price!

1. SPINUL
2. SUPERPOZABILITATE → viz double slits ↓ multiple slits | exp.(!) $\hat{H}$ (E)
   - $\psi_1 : \hat{H}\psi_1 = E\psi_1$ (info 1)
   - $\psi_2 : \hat{H}\psi_2 = E\psi_2$ (info 2)
   - (keys of criptation)
3. CONTINUITATE
4. OBSERVABILITATE
   - (a) "eigen" – "invizibili & cuantic" (measurement / UNKNOWING)
   - (b) măsurabilitatea (?E)
5. NORMARE
   - (a) unică
   - (b) probabil.
6. ENERGIA OPTIMĂ (eigen – minima – observable)

$\forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}$

$\forall \psi_{12} = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ (criptare informații) $\quad | \quad \hat{H}\psi_{12} = E\psi_{12}$

$$\hat{H}\psi_{12} = \hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{H}\psi_1 + c_2\hat{H}\psi_2 = c_1E\psi_1 + c_2E\psi_2$$

$$= E(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = E\psi_{12}$$

? E, Ψ | $\hat{H}\Psi = E\Psi$

Vibrația Cuantică Moleculară. Cazul Molec. Biatomice (AB)

1) Stabilirea Hamiltonianului sistemului în cauză

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m_e \omega_e^2 x^2$$

T ... $V_{armonic}$

2) Stabilirea Formei Parametrice a Ψ a sist. în cauză

(1) Continuitate, Derivabilă, Asimptotice $\Psi \to 0$, $x \to \infty$

$$\Psi(c_1, c_2) = c_1 e^{-c_2 x^2} = \Psi^*(c_1, c_2); \; c_1, c_2 \in \mathbb{C}$$

3) Aplicarea Cond. de Normare a Ψ pe tot spațiul de existență a sist.

$\int \Psi^* \Psi \, dr = 1$ $\Rightarrow$ O Relație între parametrii Ψ

$$1 = \int_0^\infty \Psi^* \Psi \, dx = c_1^2 \int_0^\infty e^{-2c_2 x^2} dx = c_1^2 \sqrt{\frac{\pi}{2c_2}}$$

$$\Rightarrow c_1 = \left(\frac{2c_2}{\pi}\right)^{1/4}$$

4) Calculul expresiei parametrice a eigen-energiei

(1 =) $E = \dfrac{\int \Psi^* \hat{H} \Psi \, dr}{\int \Psi^* \Psi \, dr}$

$$E = \int_0^\infty \Psi^* \hat{H}_\omega \Psi \, dx = c_2 \frac{\hbar^2}{2 \cdot 2m} + \frac{1}{c_2} \frac{m\omega^2}{8}$$

5) Cond. de optimizarea măsurabilității energ. minime a sist. parametric

$$\frac{\partial E}{\partial (\text{parametrii})} = 0$$

$\Rightarrow$ Set complet de parametri optimi pt. Măsurabilitatea Sistemului $\Rightarrow$

$$\frac{\partial}{\partial c_2} E = 0 = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{1}{c_2^2} \frac{m\omega^2}{8} \Rightarrow c_2 = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

$$E_{(\omega)} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Măsurabila(!) $\neq f(m_e)$! Universalitatea Vibrației cuantice

$E = \frac{\hbar\omega}{2}$

$E = mc^2$

$E = \hbar\omega = h\nu$

$p = \frac{h}{\lambda}$; $p = \hbar k$

$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar$

$\lambda = \frac{1}{2}$

$\hbar\omega = E\lambda$

$\hbar = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} + V(x)$

Quantum Poetry

Versuri

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10

Criptarea mesajului

În marea eteric pulsatorie
Lumina Aleargă electronul
Orbitele nu au somn
Vibrează dual
La incertitudinea lumii
Față - Verso
Vazute și Nevazute
Energia Vieții de Jos!


Natura Cuantica a Legăturii Chimice
⟨ψ|ψ⟩ = 0
(autoadjunct)
⟨0|0⟩ = 1
⟨0|1⟩ = 0

Cazul Molec. Natura Cuantica a Legăturii Chimice

Biatomica

A, B

$\hat{H}_{AB}$, φ_A, φ_B $\xrightarrow{A\otimes B}$ $\boxed{\Psi_{AB}^{M} = c_1 \varphi_A + c_2 \varphi_B}$, $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$

edilibre a interacţiei !?

$$E_{AB} = \frac{\int \Psi_{AB} H \Psi_{AB}\, d\Gamma}{A_{AB}} = \frac{\int (\varphi_A c_1 + \varphi_B c_2) H (\varphi_A c_1 + \varphi_B c_2)\, d\Gamma}{c_1^2 + 2c_1c_2 S_{AB} + c_2^2}$$

$$\begin{cases} \Psi = ? \quad (c_1, c_2 = ?) \\ E_{AB} = ? \end{cases}$$

$$A_{AB} = \int \Psi_A \Psi_B\, d\Gamma = c_1^2 + 2c_1c_2 S_{AB} + c_2^2$$

$$1 = \int \Psi_{AB}^{*} \Psi_{AB}\, d\Gamma = \int (c_1\varphi_A + c_2\varphi_B)^{*} (c_1\varphi_A + c_2\varphi_B)\, d\Gamma$$

$$1 = c_1^2 \int \varphi_A^{*} \varphi_A\, d\Gamma + c_1c_2 \int \varphi_A^{*} \varphi_B\, d\Gamma + c_2^2 \int \varphi_B \varphi_B^{*}\, d\Gamma + c_2c_1 \int \varphi_A \varphi_B$$

$$1 = c_1^2 \int_\Gamma \varphi_A^2\, d\Gamma + 2c_1c_2 \int_\Gamma \varphi_A \varphi_B\, d\Gamma + c_2^2 \int_\Gamma \varphi_B^2\, d\Gamma$$

(first integral = 1; middle integral = S_{AB}!; last integral = 1)

Curs Molec. — Natura Cuantica a Legăturii Chimice

A, B — Biatomice

$\hat{H}_{AB}$; φ_A ; φ_B $\xrightarrow{A \otimes B}$ $\Psi = ?$ ($c_1, c_2 = ?$)

$E_{AB} = ?$

$$E_{AB} = \frac{\int \Psi_{AB} \hat{H} \Psi_{AB}\, d\tau}{A_{AB}} = \frac{\int (\varphi_A c_1 + c_2 \varphi_B) \hat{H} (\varphi_A c_1 + \varphi_B c_2)\, d\tau}{c_1^2 + 2 c_1 c_2 S_{AB} + c_2^2}$$

$$\Psi_{AB}^{M} = c_1 \varphi_A + c_2 \varphi_B$$

$c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ sînt coeficienți

$$= c_1^2 \int_A \varphi_A \hat{H} \varphi_A\, d\tau + c_2^2 \int_B \varphi_B \hat{H} \varphi_B\, d\tau + c_1 c_2 \int_{AB} \varphi_A \hat{H} \varphi_B\, d\tau + c_1 c_2 \int_{AB} \varphi_B \hat{H} \varphi_A\, d\tau$$

$$A_{AB} = \int \Psi_A \Psi_B\, d\tau = c_1^2 + 2 c_1 c_2 S_{AB} + c_2^2$$

"A, B" = "A_1, A_2" = "H^{me}, H^{ne}" ($H-H$, $N-N$, $O-O$)

$K_{AB} = K_{BA} = K$ (int. de schimb - electronul) H

$$E_{AB} = \frac{c_1^2 \varepsilon_H + c_2^2 \varepsilon_H + 2 c_1 c_2 K}{c_1^2 + c_2^2 + 2 c_1 c_2 S}$$

integrale de structură

$$\int \varphi_A \hat{H} \varphi_{AB} = K_{AB}$$

$$\neq \int \varphi_{AB} \hat{H} \varphi_A$$

K_{ISA}

K_{AB}

$\int \varphi_A \hat{H} \varphi_B\, d\tau$

$\int \varphi_{ISA} \hat{H} \varphi_A\, d\tau$

I_{SA}

Cursul Molec. Natura Cuantica a Legăturii Chimice

Biatomica

A, B

$\hat{H}_{AB}$, φ_A, φ_B

A⊗B → $\Psi_{AB}^{M} = c_1 \varphi_A + c_2 \varphi_B$

$\Psi = ?$ ($c_1, c_2 = ?$)

$E_{AB} = ?$

$\Psi^{I} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_A - \varphi_B)$

$E^{I} = \zeta - K$ | $c_1 = -c_2$

$E^{II} = \zeta + K$ | $c_1 = c_2$

$\Psi^{II}_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_A + \varphi_B)$

$$\begin{vmatrix} \zeta - E & K \\ K & \zeta - E \end{vmatrix} = 0 \quad (\zeta - E)^2 = K^2$$

$\zeta - E = \pm K$

$E = \zeta \mp K$

echilibru a interacțiA

$$\frac{\partial E_{AB}}{\partial c_1} = 0$$

$$\frac{\partial E_{AB}}{\partial c_2} = 0$$

⟺ Cond. de echil. exist. $\varphi_A < \hat{H} \varphi_B$

$$\begin{vmatrix} \zeta_A - E & K - ES \\ K - ES & \zeta_B - E \end{vmatrix} = 0$$

A–A: $\zeta_A \cong \zeta_B = \zeta$, $S \cong 0$

$\int \varphi_A \varphi_A$

$c_1(\zeta_A - E) + c_2(K - ES) = 0$

$c_1(K - ES) + c_2(\zeta_B - E) = 0$

$c_1(\zeta - E) + c_2 K = 0 \Rightarrow c_1 = -c_2 \frac{K}{\zeta - E}$

$c_1 K + c_2(\zeta - E) = 0$

$A_{AB} = \int \Psi_A \Psi_B \, d\Gamma = c_1^2 + 2 c_1 c_2 S_{AB} + c_2^2$

$1 = c_1^2 + c_2^2 \Rightarrow c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$E_{AB} \cong \frac{c_1^2 \zeta_A + c_2^2 \zeta_B + 2 c_1 c_2 K}{c_1^2 + c_2^2 + 2 c_1 c_2 S}$$

→ $c_1^2 \zeta_A + c_2^2 \zeta_B + 2 c_1 c_2 K = E(c_1^2 + c_2^2 + 2 c_1 c_2 S)$

Natura Quantica a Legatura Chimica

IV P. Generale di Esclusione (Pauli)

$\Psi^M_{generale}$ = Anti-Simmetrica (Spaziale) ⊗ (Spin)

$\Psi^M_{AB} = c_1 \varphi_A + c_2 \varphi_B$

Calcolato a riposo

$\frac{\partial E_{MO}}{\partial c_1} = 0$

$\frac{\partial E_{MO}}{\partial c_2} = 0$

$E = \delta$

Calcolo la derivata

$c_1 < \frac{H - \beta}{S}$

$E = \frac{\delta + K}{1 + S}$

$\Psi^I = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_A - \varphi_B)$

$c_1 = -c_2$

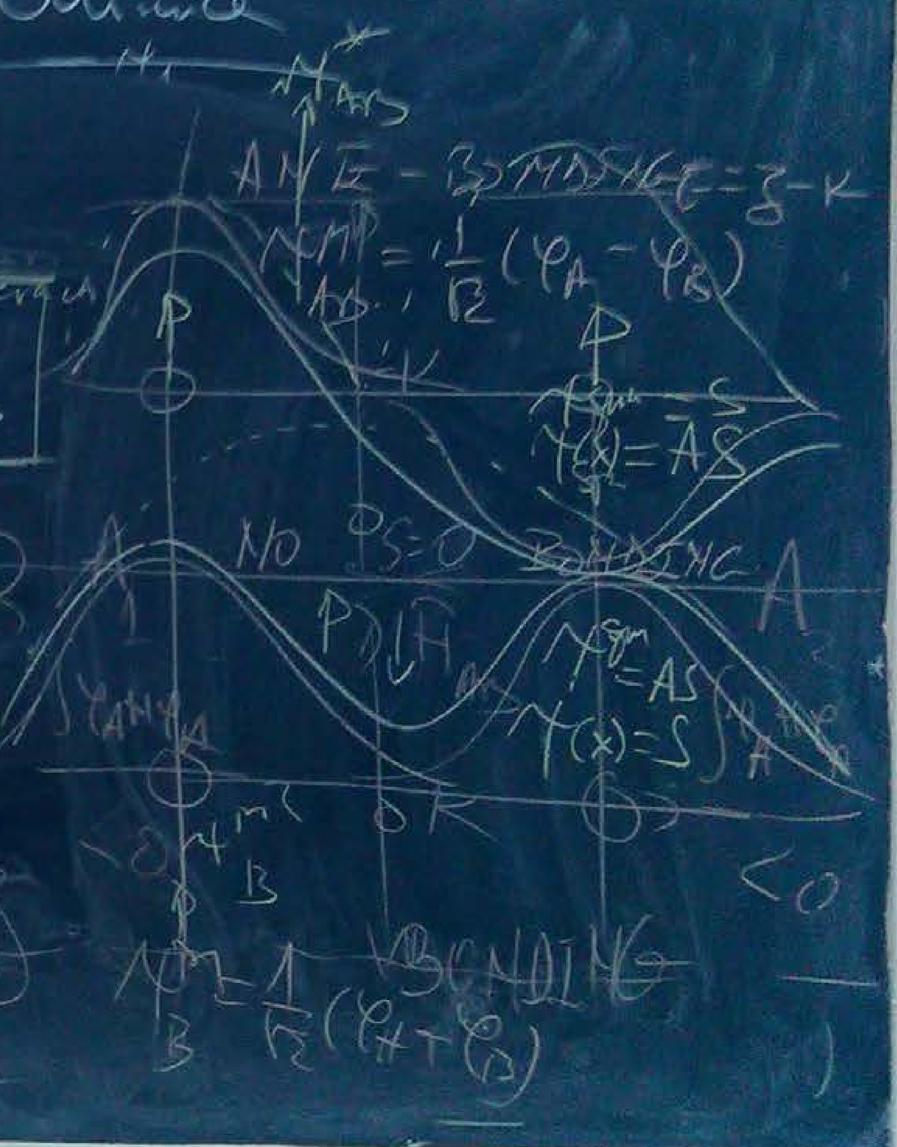
$E^I = \delta - K$

$\Psi^{II} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_A + \varphi_B)$

$c_1 = c_2$

$E^{II} = \frac{\delta + K}{1 + S}$

$\delta, K < 0$



Legătura covalentă

- Principiile lui Hund (pr. Pauli) | 2 pagini (Hund Rules)
- Introducere OM leg. și antilegătură și ierarhia lor — MO Bonding & Antibonding & their hierarchy — σ, σ^* (ss) (pp) (sp), π, π^* (pp) | 4 diagrame — Diatomic Bonding
- Diagrama OM prin configurația OA 1s, 2s, 2p | 1 diagr.
- Aplicații la molec. (parțial diagrame OM/1s 2s 2p) — H_2, F_2, N_2, HF | 4 diagr. (3 sau, 1 aplicație)

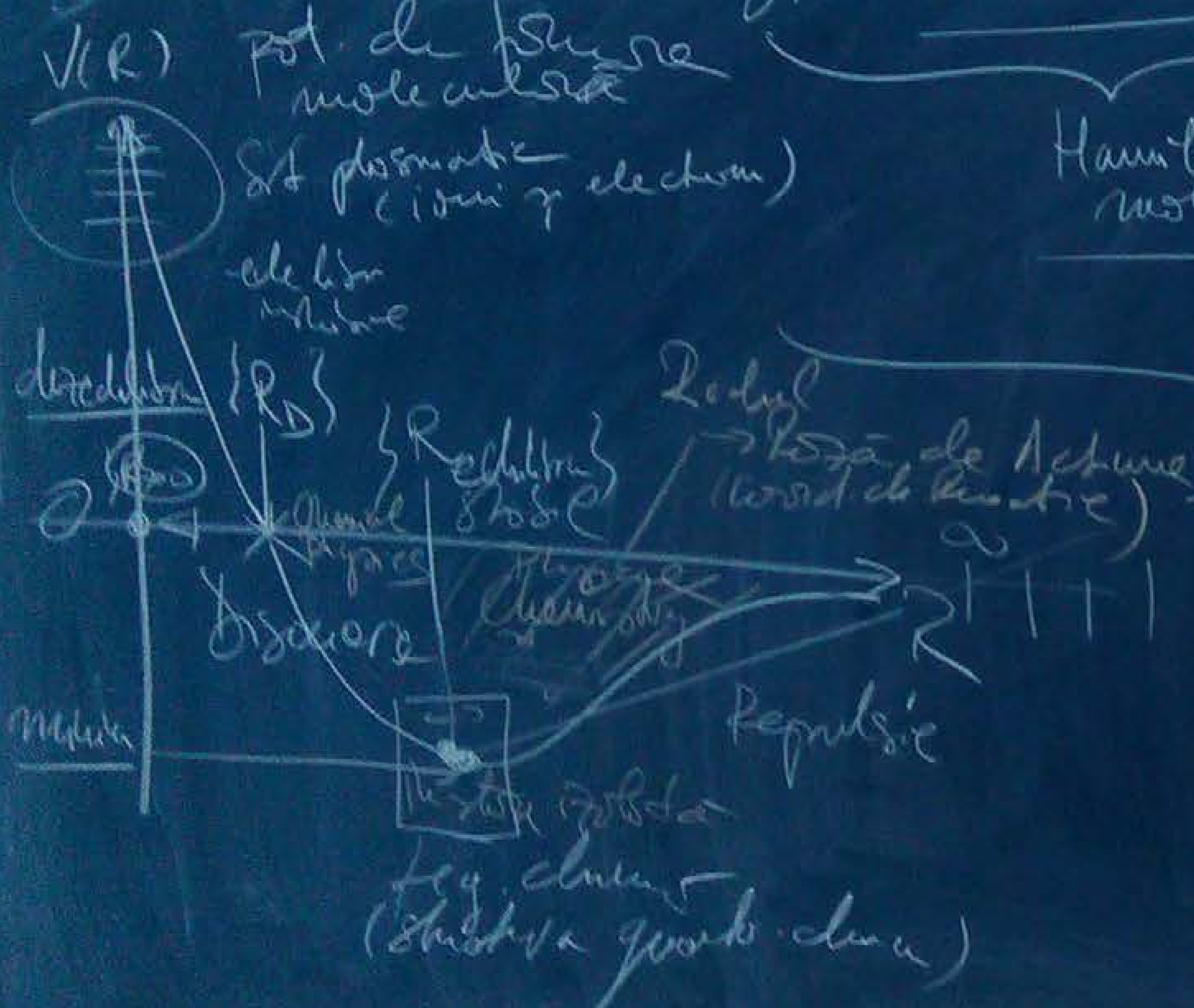
MO Diagrams of bonding molecules

MO Covalent bonding

Structura Cuantică a Moleculelor (Biatomice)

Hamiltonianul moleculei — electroni și nuclee

Aproximația Adiabatică



tipuri de mișcare / energii intra-moleculare (structurale) | molec. ca ansamblu (pot.-interacție componente)

Structura Cuantică a Moleculelor (Biatomice)

$\Delta p \, \Delta x \simeq \hbar$, $\Delta x \sim a \Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar}{a}$

Tipurile de Energii din Moleculă

Comportamentul electronilor (!)

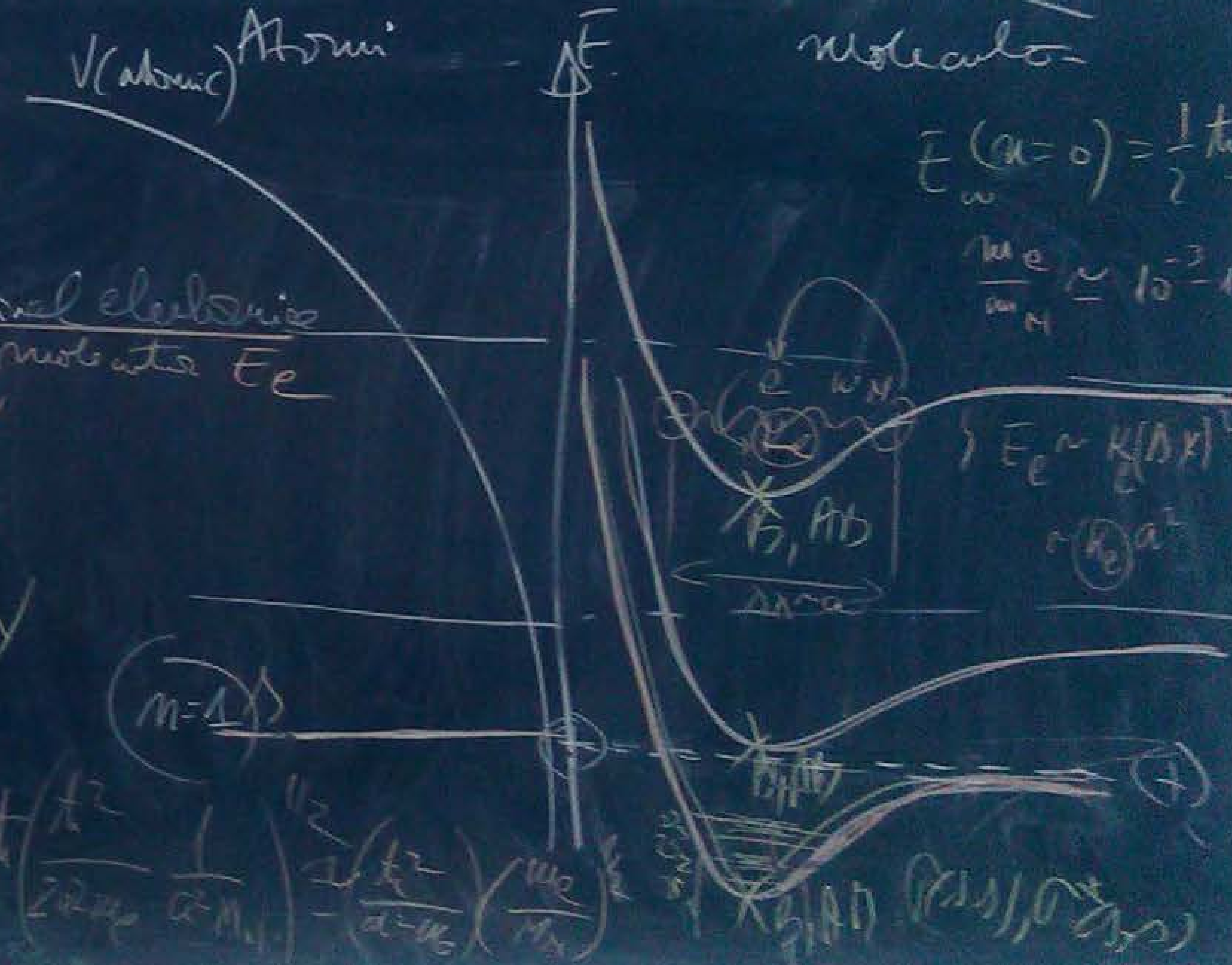
$\{RS\} \simeq a \simeq 1\,\text{Å}$ $(10^{-10}\,m)$ $\sim \Delta x$

- Energia electronică | nivel electronic molecula E_e
- Energie de vibrație E_v
- Energie de rotație E_r

$$E_e \sim T_e \sim \frac{(\Delta p)^2}{2 m_e} \sim \frac{\hbar^2}{2 a^2 m_e} \simeq eV$$

$$E_v \simeq \hbar \omega_{Nucl} \simeq \hbar \sqrt{\frac{k_e}{M_N}} = \hbar \left(\frac{E_e}{a^2 M_N} \right)^{1/2} = \hbar \left(\frac{\hbar^2}{2 a^2 m_e} \frac{1}{a^2 M_N} \right)^{1/2} = \frac{\hbar^2}{a^2 m_e} \left(\frac{m_e}{M_N} \right)^{1/2}$$

$$\simeq E_e \sqrt{\frac{m_e}{M_N}} \sim \frac{1}{100} E_e$$



$E_v(n=0) = \frac{1}{2} \hbar \omega$

$\frac{m_e}{m_M} \simeq 10^{-3} - 10^{-4}$

$E_e \sim k_e (\Delta x)^2 \sim k_e a^2$

Struttura Quantistica a Molecule (Biatomiche)

$\Delta p \frac{\Delta x}{a} \simeq \hbar \Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar}{a}$

Ripasso delle Energie dei Molecule

$E_r \simeq \frac{(\text{mom. angolare})^2}{\text{mom. di Inerzia}} \sim \frac{(p\,r)^2}{M_M \cdot a^2} \simeq \frac{(\Delta p\ a)^2}{M_M a^2}$

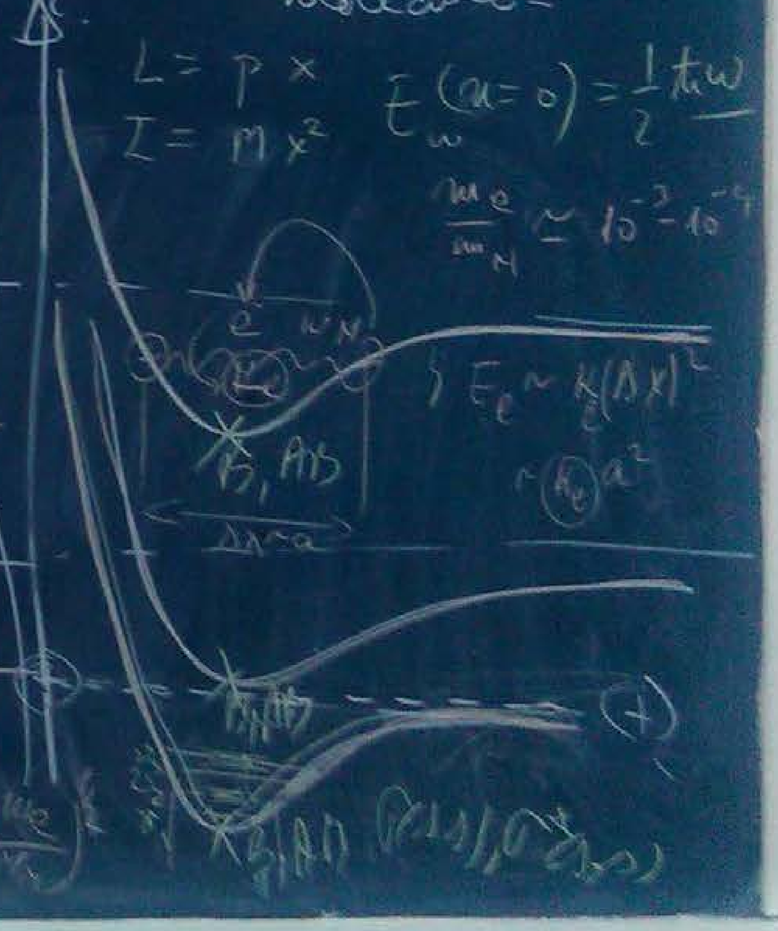
$\sim \frac{\hbar^2}{M_M a^2} \sim \left(\frac{\hbar^2}{a^2 m_e}\right) \frac{m_e}{M_M} \sim E_e \cdot \left(\frac{m_e}{m_M}\right) \simeq \frac{1}{10\,000} E_e$

$\boxed{E_e > E_v > E_r \quad | \quad 1 : 10^{-2} : 10^{-4}}$

$E_e \sim T_e \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m_e} \sim \frac{\hbar^2}{2a^2 m_e} \simeq eV$

$E_v \simeq \hbar\omega_{Mol} \simeq \hbar\sqrt{\frac{K_e}{m_M}} = \hbar\left(\frac{E_e}{a^2 m_M}\right)^{1/2} = \hbar\left(\frac{\hbar^2}{2a^2 m_e}\frac{1}{a^2 M_M}\right)^{1/2} = \frac{\hbar^2}{a^2 m_e}\left(\frac{m_e}{M_M}\right)^{1/2}$

$= E_e \sqrt{\frac{m_e}{M_M}} \simeq \frac{1}{100} E_e$



Structura Cuantică a Moleculelor (Biatomice)

Studii Spectroscopice

Hamiltonianul Molec. și Aprox. Adiabatică (Born-Oppenheimer)

$\{r\} \to$ coord. e^-

$\{R\} \to$ coord. N^+

$$\hat{H}_{Molec}\,\Psi(r,R) = E\,\Psi(r,R)$$

$$\Psi_{Molec}(r,R) = \sum_{n} \Phi_n(R)\,\varphi_n(r,R)$$

N^+ $e^- | \{r\}, \{R\}$

$\varphi_n(r,R),\ E_e$

$\Phi_n(R),\ E_{Molec}$

$$\{\hat{T}_e + \hat{V}_{eN}(r,R)\}\,\varphi_n^e(r,R) = E_e\,\varphi_n^e(r,R)$$

$$\{\hat{T}_N + \hat{E}_e\}\,\Phi_n(R) = E\,\Phi_n(R)$$

Energie Moleculară

$$H_n = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\sum_{i=1}^{n_e}\nabla_i^2\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2M_N}\sum_{\alpha=1}^{n_N}\nabla_\alpha^2\right) + V(r,R)$$

termen cinetic al molec.

(N,N), $(e\text{-}N)$, V_{e-N}

e^- N^+

$$V(r,R) = \sum_{1=i<j}^{n_e}\frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i,\alpha}^{n_e,n_N}\frac{Z_\alpha e}{R_{i\alpha}} + \sum_{1=\alpha<\beta}^{n_N}\frac{Z_\alpha Z_\beta}{R_{\alpha\beta}}$$

Interacț. $(e^- - e^-)$ repulsive ale molec.

Studii Spectroscopice

Structura Cuantică a Moleculelor (Biatomice)

Hamiltonianul Molec. în Aprox. Adiabatică (Born-Oppenheimer)

$\{r\} \rightarrow$ coord. e^-

$\{R\} \rightarrow$ coord. N^+

$$\hat{H}_{Molec} \Psi(r,R) = E \, \Psi(r,R)$$

$$\Psi_{Molec}(r,R) = \sum_{n_e} \Phi_n(R) \, \varphi_n(r,R)$$

(total)

$N^+ \quad e^- \mid r, \{R\}$

Energie Moleculară

$$H_M = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^{n_e} \nabla_i^2 + \left[-\frac{\hbar^2}{2M_N} \sum_{\alpha=1}^{n_N} \nabla_\alpha^2 \right] + V(r,R)$$

T_e, T_N

Energie de formare Gibbs, termen cinetic al e^-

termen cinetic al molec.

$e^- \quad N^+$

$$V(r,R) = \sum_{1=i<j}^{n_e} \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i,\alpha}^{n_e, n_N} \frac{Z_\alpha e}{R_{i\alpha}} + \sum_{1=\alpha<\beta}^{n_N} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R_{\alpha\beta}}$$

Propriet. $(e^- - e^-)$ termodinamice ale molec.

$\varphi_n(r,R)$, E_e

$\Phi_n(R)$, E_{Molec}

$$\left[\hat{T}_e + \hat{V}_{eN}(r,R)\right] \varphi_n^e(r,R) = E_e \, \varphi_n^e(r,R)$$

$$\left[\hat{T}_N + \hat{E}_e\right] \Phi_n(R) = E \, \Phi_n(R)$$

$(e\text{-}N)$ V_{e-N}

Introducere la Grupurile de Simetrie Moleculară

Abordarea Cuantică

Operatorul Operator de simetrie $\hat{R}$: $\hat{R}\hat{H} = \hat{H}\hat{R}$ (! op. de simetrie la nivel de operatori)

pt. un sist. dat $\hat{H}$ — fcţii proprii, valori proprii

$\exists \; \hat{H}\psi = (E)\psi$

$$\hat{H}(\hat{R}\psi) = \hat{H}\hat{R}\psi = \hat{R}\hat{H}\psi$$

$$= \hat{R}(\hat{H}\psi) = \hat{R}(E\psi)$$

scalar

$$= E(\hat{R}\psi) \Rightarrow (\hat{R}\psi)$$ vector (fcţie) propriu (!!)

? val. proprii ale op. $\hat{R}$?

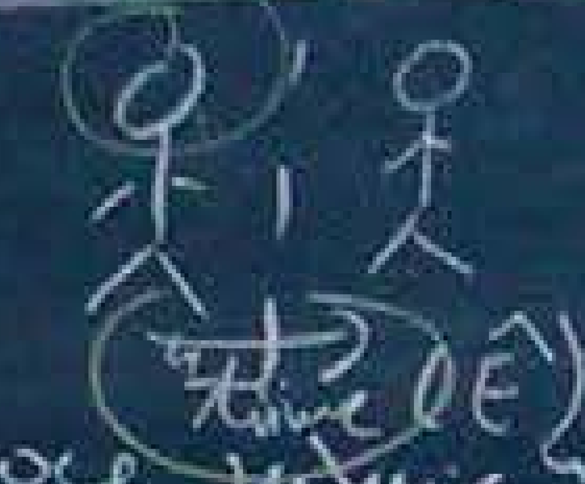
$\hat{R}\psi = (?)\psi$

$$\exists \; 1 = \int (\hat{R}\psi)^* (\hat{R}\psi)\, d\Gamma = \int (\psi^*)(\psi)\, d\Gamma \Rightarrow \boxed{\hat{R}\psi = (\pm)\psi}$$ ecuaţie de val. proprii

$\Rightarrow \boxed{(?)_{\text{op. simetrie}} = \pm 1}$ (caracter de simetrie) Cond. de normare (!)

= Op. de simetrie este cuantificată

Introducere la Grupurile de Simetrie Moleculară



Elemente de simetrie VS. Operații de simetrie

- Axe ----> "0": identitate ($\hat{E}$) ("nu face nimic" simetrie față de el; mișcat-nemișcat; un fel de simetrie a identității temporal)
- Punctul → inversie ($\hat{i}$)
- dreapta → Rotații
  - proprii (doar rotații) $C_n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$
  - improprii (Rotație + Inversie)
- planul → Reflexii ($\hat{\sigma}$)

Se desfășoară față de el. de simetrie

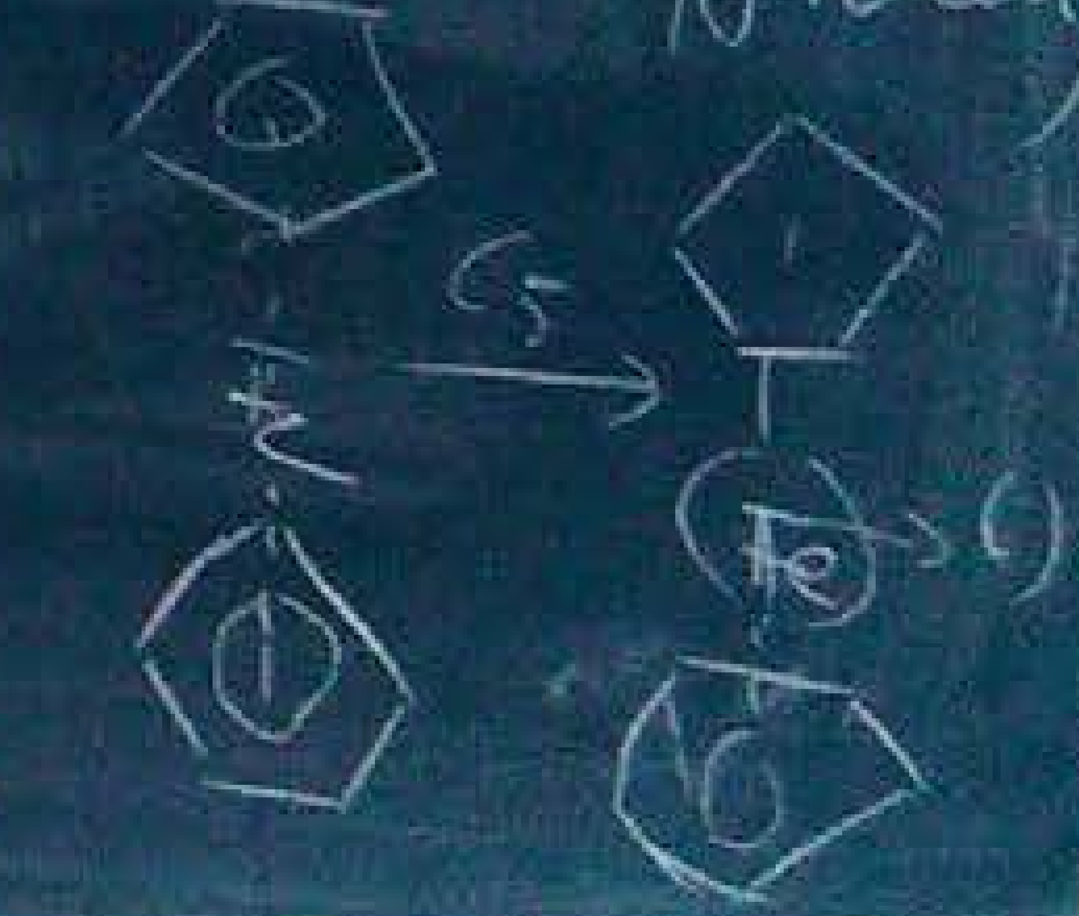
$$\hat{S}_{n=2k} = \hat{C}_{n=2k} \otimes \hat{i}$$

(par)

$\left(\frac{2\pi}{2}\right)$ 180°, $\left(\frac{2\pi}{4}\right)$ 90°, $\left(\frac{2\pi}{6}\right)$ 60°

$\hat{E} \equiv \hat{C}_1$: 0°, 360° $\left(\frac{2\pi}{1}\right)$; 120° $\left(\frac{2\pi}{3}\right)$; $\left(\frac{2\pi}{5}\right)$

C_5 (ferocen)



Denumirea grupurilor de simetrie (Seminar!)

I) Cu un singur element de simetrie: C_1 ($\hat{E}$, ...), C_n ($\hat{E}$, C_n), C_s ($\hat{E}$, σ), C_i ($\hat{E}$, i), $S_{n=2k}$

II) Cu mai multe elem. simetrie: C_{nv}, C_{nh}, (D_n), D_{nv}, D_{nh}

III) Grupuri speciale: ($C_{\infty v}$, $D_{\infty v}$), T_d (T, T_h), O_h (O), I_h (I)

Introducere la Grupurile de Simetrie Moleculare

Atribuirea gr. simetrie (pt. molecule/molecular

Pos 1) Struct. Molec. are ca și graf un grup special (T, O, I)?

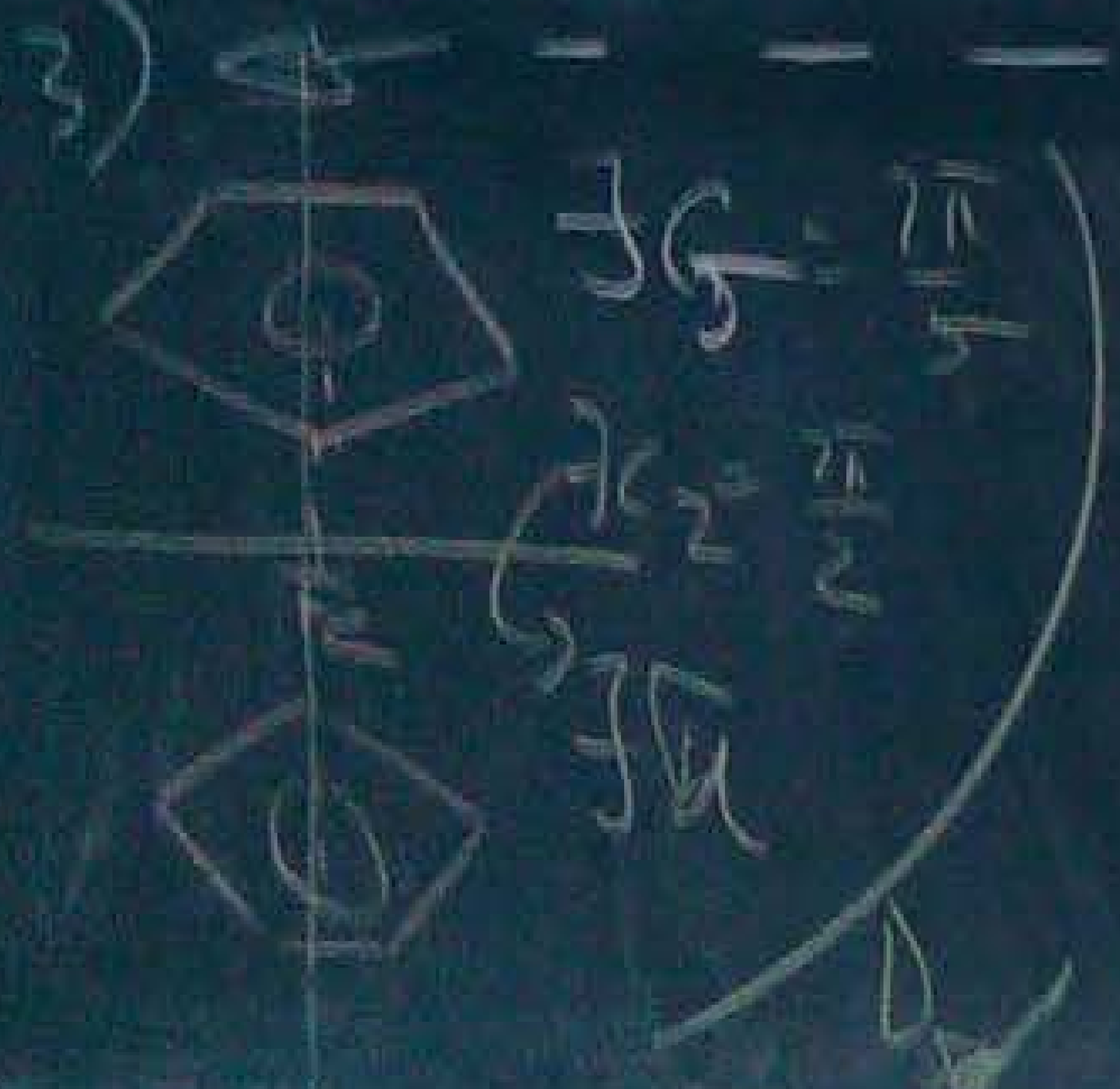
Reprezent. matematică/geometrică a unei molecule
în puncte - atomice
și distanțe - de legătură

Dacă Da → Teoria Câmpului Cristalin și de Liganzi (Chim. Anorganică și Chim. Metalo-Organică)

Pos 2) ∃ axe de Rot. proprii (∃C_n?)

- Nu → ... ∃σ, da! ⇒ C_s
  - ∃i, da! ⇒ C_i
  - ∄ ⇒ $C_1(E)$
  - ∃S_{2n} ⇒ S_n
- Da → ∃C_n
  - ∃(n)$C_2 \perp C_n$
    - ∃σ_h → D_{nh}
    - ∃σ_d → D_{nd}
    - ∄σ → D_n
  - ∄(n)$C_2 \perp C_n$
    - ∃σ_h ($\perp C_n$) → C_{nh}
    - ∃σ_v ($\parallel C_n$) → C_{nv}
    - ∄σ → C_n

Pos 3)



∃C_4, σ_v ⇒ C_{4v}

Introducere la Grupurile de Simetrie Moleculare

Matricile Op de Simetrie

$(\hat{E}, \hat{i}, \hat{\sigma}, C_n)$ → Op de spațiu 3D

$\hat{E}$ → operație / operatori → matrice

$$E^{3\times3}_{3D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

- multi-dimensională
- înmulțire
- simetrie → înmulțire $AB = (?)\, BA$; interioară

$$\hat{i} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

operează → asupra unui pct. aflat din spațiul moleculei

$$\sigma_{xz} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{yz} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

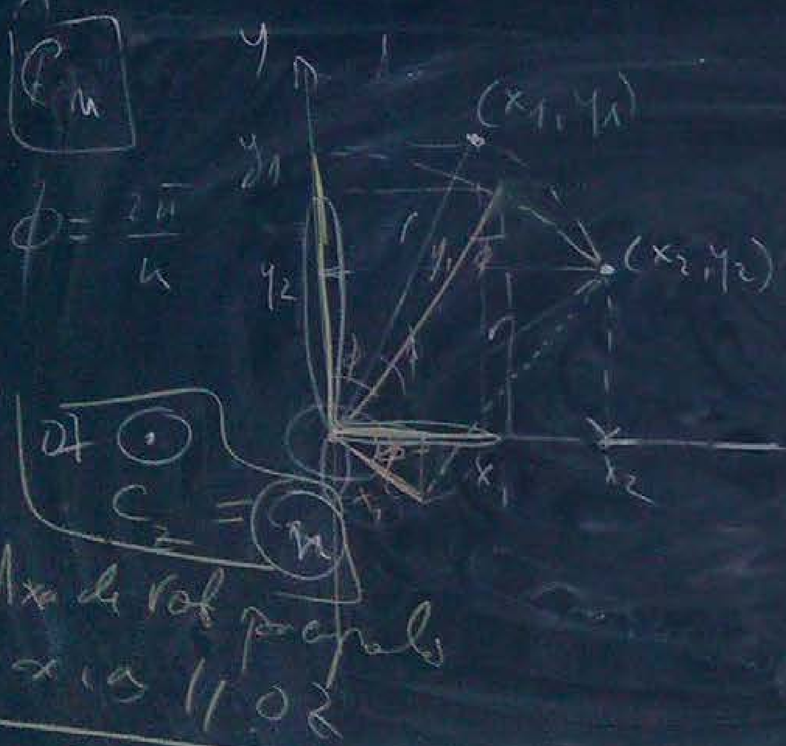
σ_{yz}, σ_{xz}, σ_{xy}, $(x, -y, z)$, (x, y, z)

Introducere la Grupurile de Simetrie Moleculară

Matricile Op de Simetrie $(\hat{E}, \hat{i}, \hat{\sigma}, [C_n], (S_n))$

$[C_n]$

$\phi = \frac{2\pi}{n}$



$$\begin{cases} x_2 = x_1 \cos\phi + y_1 \sin\phi \\ y_2 = -x_1 \sin\phi + y_1 \cos\phi \end{cases}$$

$S_n = C_n \otimes \sigma_h$

$= \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

$(C_n) = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_1 \end{pmatrix}$


Introducere la Grupurile de Simetrie Moleculară
Matricea de Caractere
val. proprii ale lui R
op. de simetrie
E
C2
σxz
σyz
Matrici Reductibile

Descrierea Grupurilor de Simetrie Moleculară

(seminar)

• Definiții, caracterizări, și exemplificări (cu ilustrarea elem. și op. de simetrie) cu sist. moleculare

- Definiții → elem. de simetrie
- caracterizări → op. de simetrie
- (cu ilustrarea elem. și op. de simetrie) → identificarea elem. & op. sim.

Grupurile de simetrie:

→ E, i, C_n ($n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$), σ, $S_{n=2k}$

→ T, O, I (gr. speciale)

→ C_{nv}, C_{nh}, D_n, D_{nh}, D_{nd}

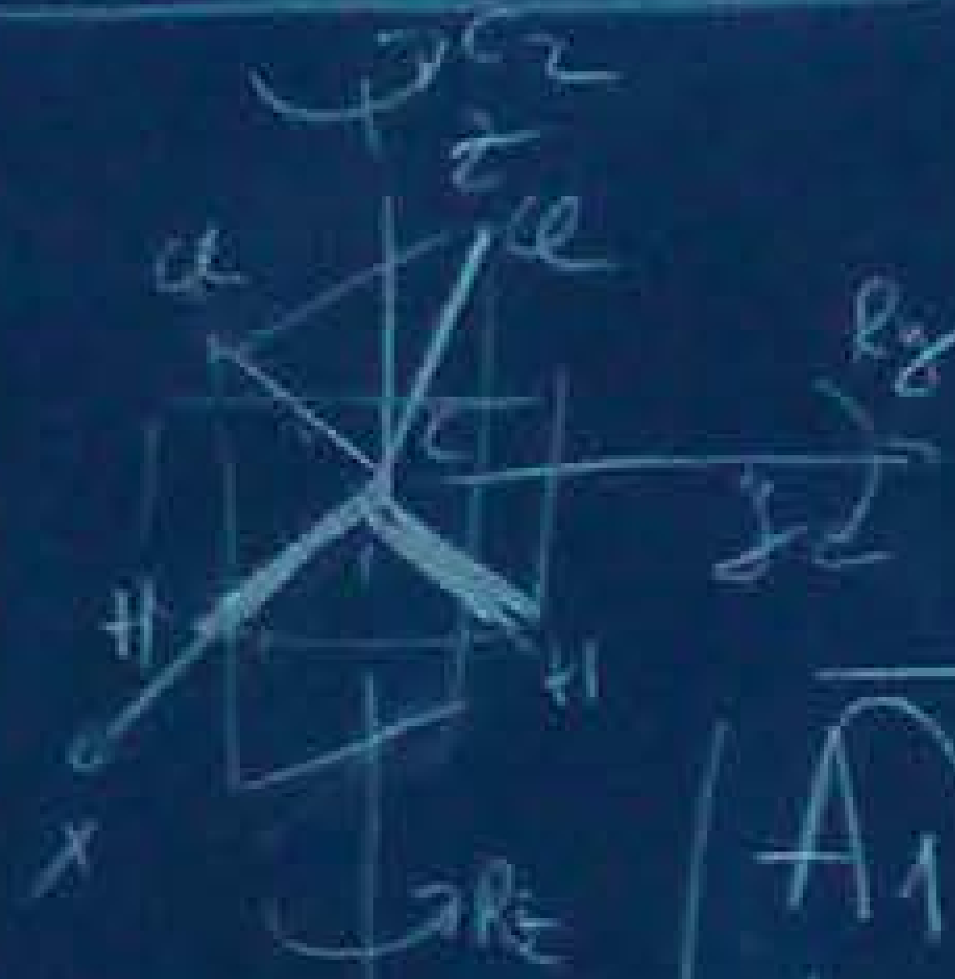
Structura și Proprietățile moleculelor cu Tabela de Caractere

$$(C_{2v}) = \left\{ \frac{E}{3\times3}, \frac{C_2}{3\times3}, \frac{\sigma_{xz}}{3\times3}, \frac{\sigma_{yz}}{3\times3} \right\}$$

Matrice "Traducătoare" = matrice de caractere

	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	
Γ_x	1	-1	1	-1	} "B"
Γ_y	1	-1	-1	1	
Γ_z	1	1	1	1	} "A"
Γ_{R_z}	1	1	-1	-1	

→ Tabela de Caractere →



	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	"μ" Repr. "Dipolare" și de Rotație	"p" Repr. Binare "Polarizare"
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz

+ "mișcări de grade de libertate"

Translație
Rotație

[illegible] IR

Regulile Reprezentării Mulliken

1D: A_1, A_2 | $\chi(C_2) = +1$

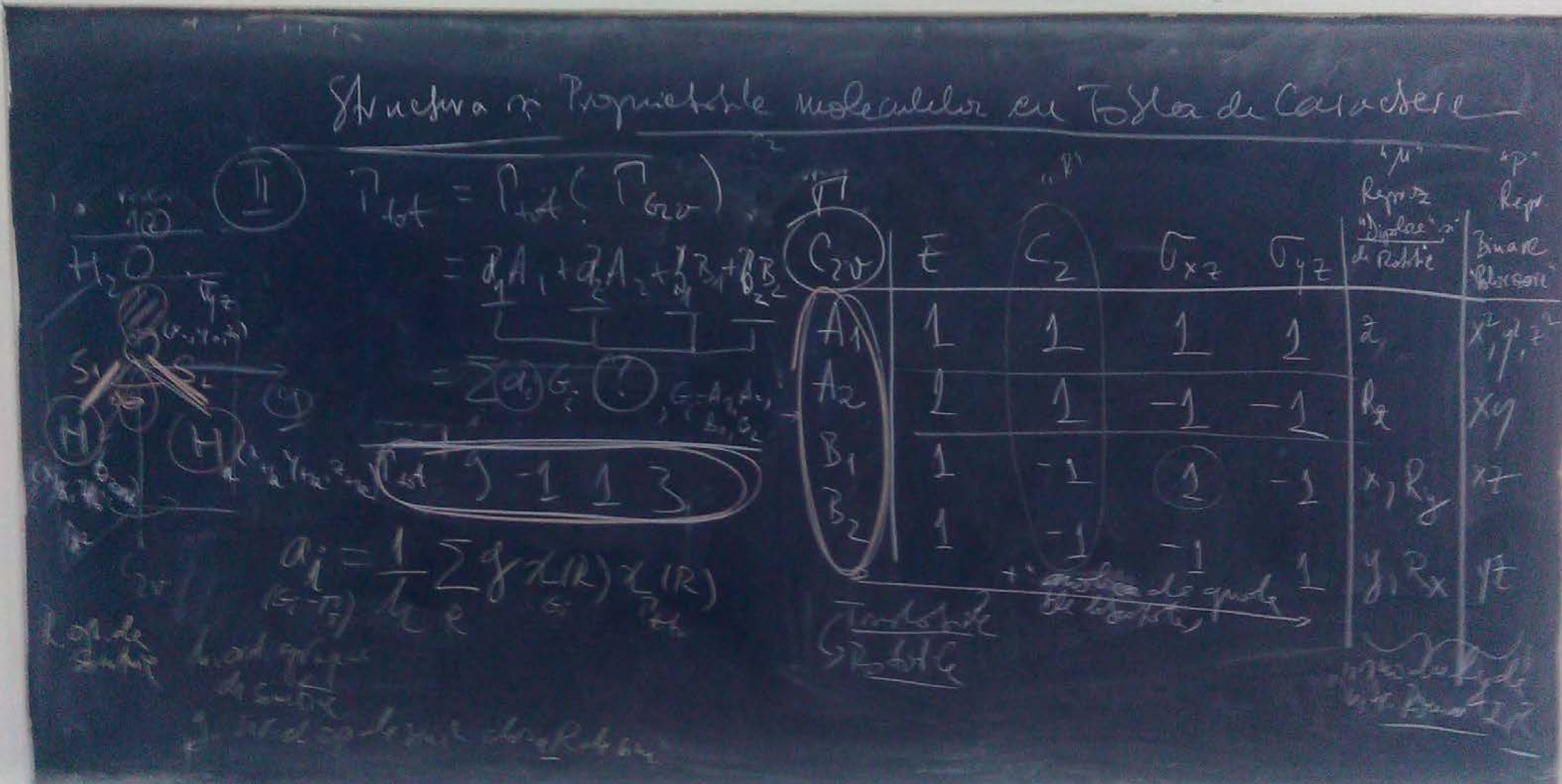
1D: B_1, B_2 | $\chi(C_2) = -1$

2D: E

3D: T


Modurile de Vibrație ale unei Molecule
H_2O
coordonate carteziene (x, y, z)
Se extrag modurile de vibrație
Translații
Rotații
"μ"
"p"
C_{2v} | E | C_2 | σ_{xz} | σ_{yz}
A_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | z | x^2, y^2, z^2
A_2 | 1 | 1 | −1 | −1 | R_z | xy
B_1 | 1 | −1 | 1 | −1 | x, R_y | xz
B_2 | 1 | −1 | −1 | 1 | y, R_x | yz


Structura și Proprietățile moleculelor cu Tabla de Caractere
I ? $\Gamma^{H_2O}_{(x,y,z)}$ (total) = ?
H_2O
	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
Γ_{xyz}	3	-1	1	1
Γ atomi nemutați	3	1	1	3
Γ_{tot}	9	-1	1	3
$= \Gamma_{xyz} \times \Gamma_{atom}$
C_{2v}
$\chi(E) = 3$
$\chi(C_2) = -1$
C_{2v}	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}		
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz
Translație
Rotație
"Repr." "Dipolare" și de Rotație
"Repr." Binare "Polarizare"

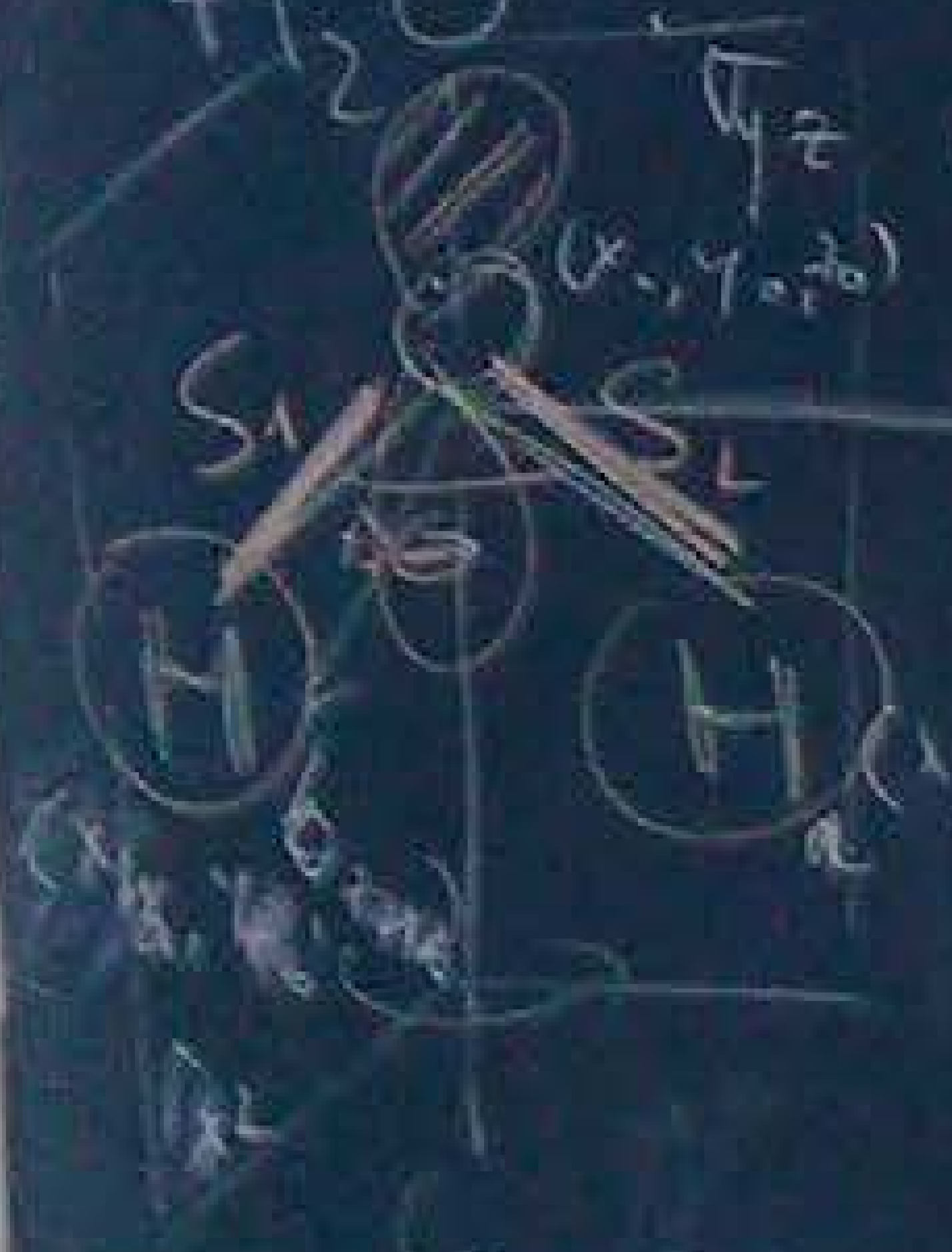

Structura şi Proprietăţile moleculelor cu Tabla de Caractere
H_2O
$\Gamma_{tot} = \Gamma_{totA}(\Gamma_{C_{2v}})$
$= a_1A_1 + a_2A_2 + b_1B_1 + b_2B_2$
Γ_{tot} 9 -1 1 3
$a_i = \frac{1}{h} \sum_R g \chi_{G_i}(R) \chi_{\Gamma_{tot}}(R)$
C_{2v} E C_2 σ_{xz} σ_{yz}
A_1 1 1 1 1 z x^2, y^2, z^2
A_2 1 1 -1 -1 R_z xy
B_1 1 -1 1 -1 x, R_y xz
B_2 1 -1 -1 1 y, R_x yz
Repr. Binare

Structura și Proprietățile moleculelor cu Tabela de Caractere

$\Gamma_{vib} = 2A_1 + B_2$

A_1: IR, Raman; B_2: IR + Raman

H_2O



$$a_{A_1} = \frac{1}{4}\Big[\underbrace{1\cdot 1\cdot 9}_{E} + \underbrace{1\cdot 1\cdot(-1)}_{C_2} + \underbrace{1\cdot 1\cdot 1}_{\sigma_{xz}} + \underbrace{1\cdot 1\cdot 3}_{\sigma_{yz}}\Big]$$

$$a_{A_1} = 3A_1, \quad a_{A_2} = \dots = 1A_2$$

$$a_{B_1} = \frac{1}{4}(9 + 1 + 1 - 3) = 2B_1$$

$$a_{B_2} = 3B_2$$

	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
Γ_{tot}	9	-1	1	3

$$a_i = \frac{1}{h}\sum_R g\,\chi_{G_i}(R)\,\chi_{\Gamma_{tot}}(R)$$

C_{2v}	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	Repr. „Dipolare” și de Rotație	Repr. Binare „Polarizare”
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz

Translații, Rotații

Γ grade de lib. $\Rightarrow$

$$\Gamma_{tot} = 3A_1 + A_2 + 2B_1 + 3B_2$$

$$- A_1 - A_2 - 2B_1 - 2B_2$$

3 grade de libertate

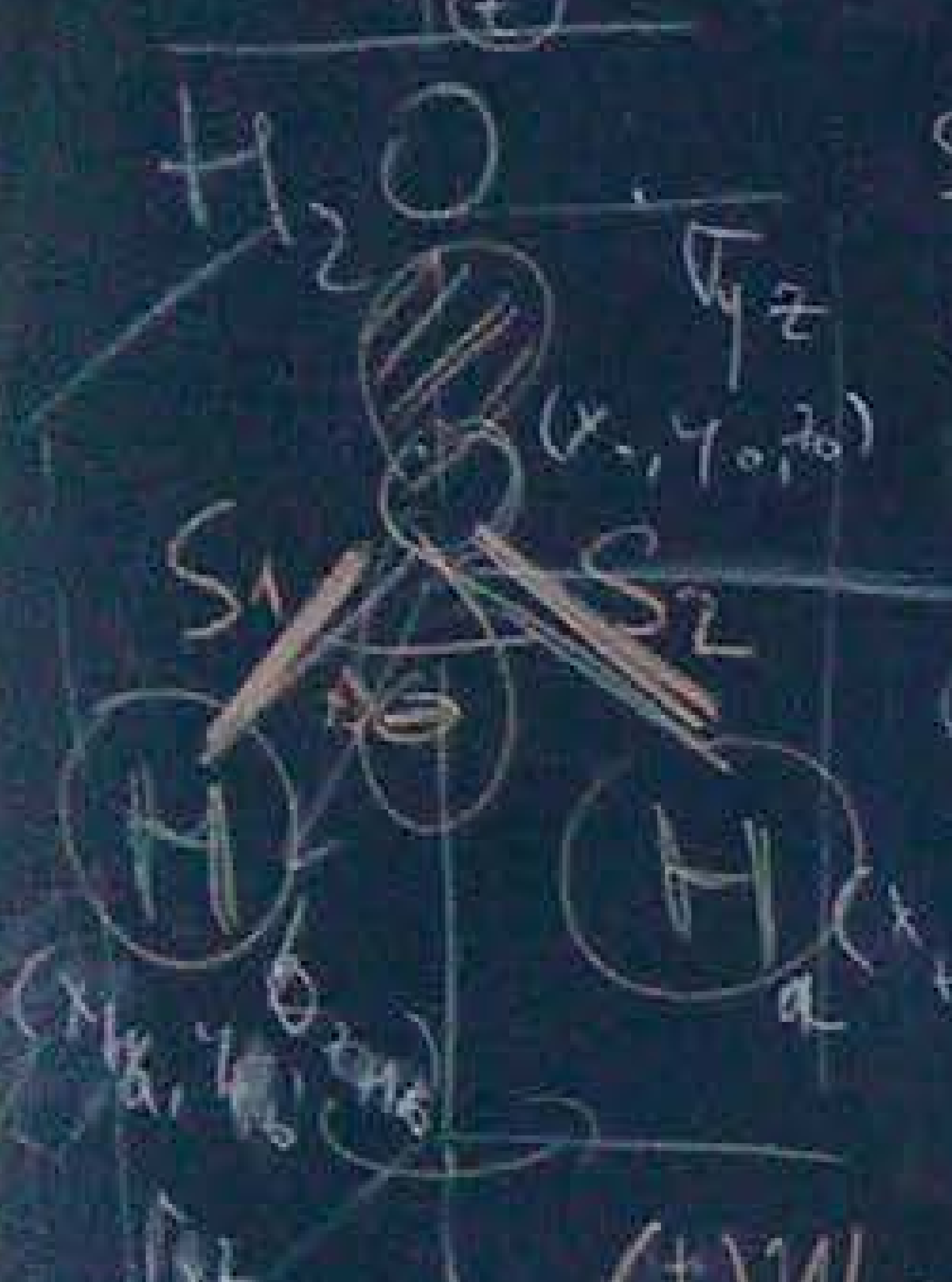
Nr. grade lib. = 3N (N: 3N − 6 (mol. neliniare))

Structura și Proprietățile moleculelor cu Tabla de Caractere

$\Gamma_{vib} = 2A_1 + B_2$

IR, Raman — (IR + Raman)

H_2O



— Repr. în leg. chimice (S_1, S_2) și unghi diedral ($D\Theta$)

$S_1 \cdot S_1 = 1$

$S_2 \cdot S_2 = 1$

$S_1 \cdot S_2 = 0$?

$N^2(S_1+S_2)^2 = 1$

$N^2(1+1+0) = 1$?

$N = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$\Gamma_{vib} = 2A_1 + B_2$

Cum vibrează S_1 față de S_2

cum vibr. $D\Theta$?

? descrierea modurilor de vibr. Moleculară (în ansamblul ei) pe modurile A_1, A'_1, B_2 !

(!) Metoda a proiecției [illegible] pe care de funcție

$P_{A_1}(D\Theta) = \frac{1}{4}(1D\Theta + 1D\Theta + 1D\Theta + 1D\Theta) = D\Theta$

C_{2v}	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	"μ" Repr. „Dipolare" și de Rotație	"P" Repr. Binare „Polarizare"
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	−1	−1	R_z	xy
B_1	1	−1	1	−1	x, R_y	xz
B_2	1	−1	−1	1	y, R_x	yz

Translații, Rotații

+ „moduri de grupuri de simetrie"

"N"

„modurile de vibr. Raman și IR"

⇒ Proiecții ⇒

$P_{A_1}(S_1) = \frac{1}{4}\left(1 \cdot \hat{E}(S_1) + 1\,\hat{C}_2(S_1) + 1\,\hat{\sigma}_{xz}(S_1) + 1\,\hat{\sigma}_{yz}(S_1)\right) = \frac{1}{4}(S_1 + S_2 + S_2 + S_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(S_1 + S_2)$ → Vîscolor

$P_{B_2}(S_1) = \frac{1}{4}(1S_1 - S_2 - S_2 + S_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(S_1 - S_2)$

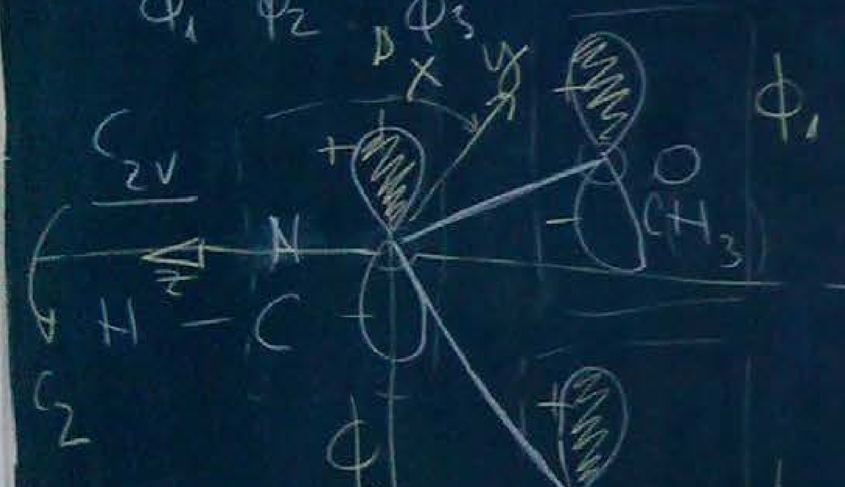
Modurile de Vibrație
Symmetrical stretching
bending mode
C_{2v}
E
C_2
σ_{xz}
σ_{yz}
A_1
A_2
B_1
B_2
1 1 1 1
1 1 -1 -1
1 -1 1 -1
1 -1 -1 1
z
R_z
x, R_y
y, R_x
x^2, y^2, z^2
xy
xz
yz
Binare

Structura și Proprietățile moleculelor cu Tabla de Caractere
Γvib = 2A1 + B2
IR, Raman
IR+Raman
NO2, C3H5, ClF3 (T-shape)
Diagrama MO
φ1
φ2
φ3
C2v
D3h
C2v E C2 σxz σyz
A1 1 1 1 1 z x², y², z²
A2 1 1 −1 −1 Rz xy
B1 1 −1 1 −1 x, Ry xz
B2 1 −1 −1 1 y, Rx yz
Reprez. "Dipolare" și de Rotație
Repr. Binare "Bilineare"

Metoda "SALC" a lui Hückel

Symmetry Adapted Linear Combination

Baza: orbitalele $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$



C_{2v}	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}	
Γ_ϕ	3×1	1·(-1)	1·(1)	3·(-1)	
	3	-1	1	-3	

Quantum superposition

Reducere

Compute irreducible

SALC (ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3)

Orbitale moleculare globale

$\Gamma_\phi = \Gamma_\phi(A_2, 2B_1)$

C_{2v}	E	C_2	σ_{xz}	σ_{yz}
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

? Rep. ireductibile pentru Γ_ϕ?

$a_{A_1} = \frac{1}{4}\left(1\cdot 3 + 1(-1)1 + 1(1)1 + 1(-3)1\right) = 0\,A_1$

$a_{A_2} = \frac{1}{4}(4) = 1\,A_2$ | $a_{B_1} = \frac{1}{4}(8) = 2B_1$ | $a_{B_2} = \frac{1}{4}(0) = 0B_2$

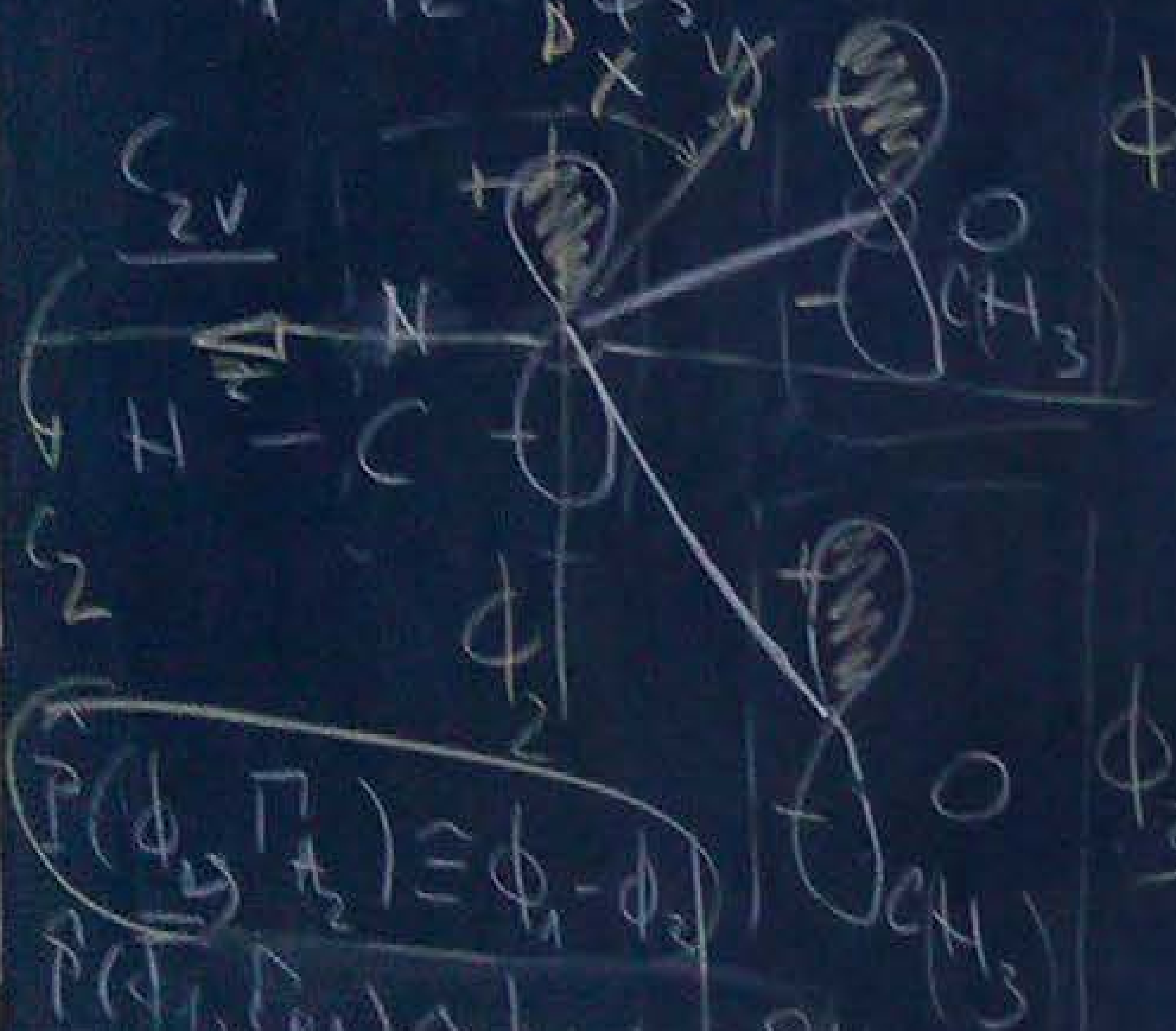
Metoda "SALC" și Hückel
Symmetry Adapted Linear Combination
Quantum superposition
Reducere pe componente ireductibile
SALC

Metoda "SALC" și Hückel

Symmetry Adapted Linear Combination

Baza orbitalilor

$\{ \phi_1, \phi_2, \phi_3 \}$



SALC

$\hat{P}(\phi_{1,3}, \Gamma_{A_2}) \equiv \phi_1 - \phi_3$

$\hat{P}(\phi_{1,3}, \Gamma_{B_1}) \sim \phi_1 + \phi_3$

$\hat{P}(\phi_2, \Gamma_{B_1}) = \phi_2$

? Energiile și MO Propriu ?

$$\hat{H}\Psi_{MO} = \varepsilon_{MO}\Psi_{MO}$$

"Orbital Molecular Hückel"

$$(\hat{H} - \varepsilon_{MO})\Psi_{MO} = 0$$

calcule (Grupul de Simetrie)

$$\int \Psi_{MO}^{*}(\hat{H} - \varepsilon_{MO})\Psi_{MO}\, d\tau = 0$$

$$\int \sum_i c_{ik}\phi_i (\hat{H} - \varepsilon_{MO}) \sum_j c_{jk}\phi_j\, d\tau = 0$$

Quantum Superposition

$$\Psi_{MO-k} = \sum_{i=1}^{n=OA} c_{ik}\phi_i^{OA}$$

$$?k? = c_{1k}\phi_1^{OA} + c_{2k}\phi_2^{OA} + c_{3k}\phi_3^{OA}$$

$k = \text{Card}\{SALC\}$

$$\int \phi_i \hat{H} \phi_i\, d\tau = \alpha_i$$

$$\int \phi_i \hat{H} \phi_j\, d\tau = \beta_{ij}$$

$$\int \phi_i \phi_j\, d\tau = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} = \delta_{ij}$$

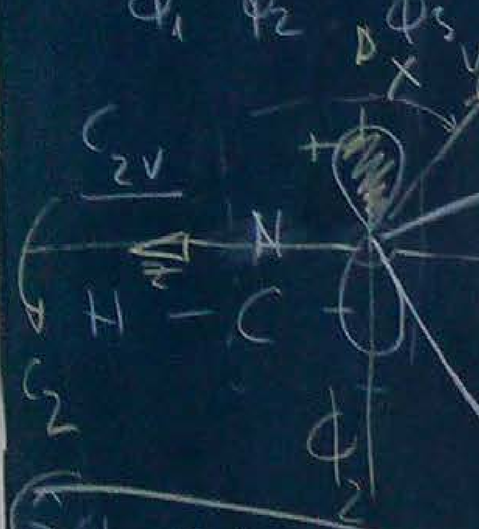
Metoda "SALC" pt Hückel

Baza: orbitalele $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$

Aproximatia Hückel (conjugation) ← Graf → Graful/Scheletul mol. de carbon cu α pe vârfuri

Hückel 1): toți α_i sunt egali $\Rightarrow \boxed{-\beta \mid \alpha}$

Hückel 2): toți $\beta_{i-j} = \begin{cases} \beta \neq 0 \\ 0 \end{cases}$ i — j



$\hat{P}(\phi_1, \Gamma_{A_2}) \cong \phi_1 - \phi_3$

$\hat{P}(\phi_1, \Gamma_{B_1}) \cong \phi_1 + \phi_3$

$\hat{P}(\phi_2, \Gamma_{A_2}) = \phi_2$

SALC

	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3
ϕ_1	$\alpha - E_{\pi_0}$	β	0
ϕ_2	β	$\alpha - E_{\pi_0}$	β
ϕ_3	0	β	$\alpha - E_{\pi_0}$

"Orbital Molecular Global"

$\begin{pmatrix} C_{1K} \\ C_{2K} \\ C_{3K} \end{pmatrix}$

$\int \sum_i C_{iK} \phi_i \left(\hat{H} - E_{\pi_0}\right) \sum_j C_{jK} \phi_j \, d\tau = 0$

$\pi_{ono} = f(\phi_1, \phi_2, \phi_3)$

$= 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - \varepsilon & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$

$\int \phi_i \hat{H} \phi_i \, d\tau = \alpha_i$

$\int \phi_i \hat{H} \phi_j \, d\tau = \beta_{ij}$

$\int \phi_i \phi_j \, d\tau = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases} = \delta_{ij}$

Metoda "SALC" pt Hückel

Aproximația Hückel (conjugație) ← Graf ⇒ Graful / Scheletul atomilor de carbon cu α, β

$$X = \frac{\alpha - E}{\beta} \Rightarrow \begin{vmatrix} X & 1 & 0 \\ 1 & X & 1 \\ 0 & 1 & X \end{vmatrix} = 0$$

$\Leftrightarrow X^3 - 2X = 0$

$\Rightarrow X = \{0, +\sqrt{2}, -\sqrt{2}\}$

$\Rightarrow E_{\pi_0} = \{\alpha, \alpha+\sqrt{2}\beta, \alpha-\sqrt{2}\beta\}$

$\Psi_{SALC} = f(\phi_1, \phi_2, \phi_3)$

$\begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha-E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha-E \end{vmatrix} = 0$

$\beta = <0$

$E_{\pi_0} = J \pm K$

$\Psi_k = C_{1k}\phi_{1k} + C_{2k}\phi_{2k} + C_{3k}\phi_{3k}$, $k = 1,2,3$

$\begin{bmatrix} X & 1 & 0 \\ 1 & X & 1 \\ 0 & 1 & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} C_1 X + C_2 = 0 \\ C_1 + C_2 X + C_3 = 0 \\ C_2 + C_3 X = 0 \end{cases}$

$\int \Psi_k \Psi_k d\tau = 1 \Rightarrow C_1^2 + C_2^2 + C_3^2 = 1$

E

$\alpha - 2\beta$

β_1

α

α_2

$\alpha + \sqrt{2}\beta$

β_2

$\alpha - \sqrt{2}\beta$

$\Psi_{\pi_{03}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_3$

$\Psi_{\pi_{02}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_3$

SALC

$\Psi_{\pi_{01}} = \frac{1}{2}\phi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3$

Δ nod

ϕ_1

ϕ_2

ϕ_3

α

β

ϕ_2

ϕ_1

ϕ_3

α


Hotel Copenhaga
Omul este măsura tuturor lucrurilor!
(~ Protagoras)
Are dreptul moral un om de știință să purceadă în aplicarea descoperirii sale
Puterea științei
Moral
Science
Niels Bohr
(Atomic Theory
Nuclear Theory
Werner
Heisenberg
(Nuclear Theory
Nuclear Gener
Patriot
Motionalist
(Social) or human
Quantum
Theory?
Margrethe
(Mediator, Conștiința Vieții)
CINE E VINOVAT?
vacuum
Ex nihilo
Vacuum
Nihil