
PSI* nr 2

6.II.2005

Drodzy chemicy kwantowi,

Przypominam, że PSI* jest pismem elektronicznym Sekcji Chemii Kwantowej Polskiego Towarzystwa Chemicznego. PTChem jeszcze o tym piśmie nie wie, ale ważne jest tylko jedno: mamy forum, mamy łączność. Zachęcam do przesyłania mi informacji, co się zdarzyło w naszym środowisku, co ma się zdarzyć, że czegoś poszukujemy, że chcemy coś wyjaśnić, itp.

Lucjan Pielą

piela@chem.uw.edu.pl

PACJENT PROF.DR HAB. ANDRZEJ J. SADLEJ

Prof.Andrzej Sadlej przebywał w szpitalu w Warszawie (operacja oka). Operacja przebiegła pomyślnie, z czego wszyscy bardzo się cieszymy. Warszawscy chemicy kwantowi bardzo dbali o pacjenta szpitala im.Orłowskiego, tłumnie go odwiedzali, dostarczono do szpitala wielkie ilości jabłek Champion. Niestety, drugie z ulubionych jabłek „koksą” znikło już z rynku wskutek wcześniejszej aktywności Profesora na krajowym rynku owoców i warzyw. Prof.Sadlej jest niedoścignym wzorem pacjenta naszej Służby Zdrowia. W kilka godzin po operacji zatelefonował do mnie i opowiadał dowcipy jak gdyby nic się nie wydarzyło! Dużo zdrowia, drogi Andrzeju!

TORUN BĘDZIE WDZIECZNY

Prof.Karol Jankowski poszukuje książki „Density Functional Theory” wyd.Gross i Dreizler. Proszę skontaktować się bezpośrednio z nim: karoljan@phys.uni.torun.pl

KSIĄZKA PRZETŁUMACZONA

Moja książka „Idee chemii kwantowej” jest już przetłumaczona na angielski. Była to ogromna praca, ale miałem też pomoc, po jednym rozdziale przetłumaczyli: prof. Stanisław Kucharski, dr Wojciech Grochala i prof. Jerzy Ciarkowski. Ogromne dzięki!

Wprowadziłem zmiany w porównaniu z wersją polską. Teraz cały czas poświęcam szlifowaniu tekstu (merytorycznym i językowym).

PODRECZNIK CZY CO?

Chciałbym Was spytać o zdanie, czy w Waszym ośrodku traktuje się „Idee chemii kwantowej” jako podręcznik czy jako coś innego. Dotychczasowe wrywkowe dane mówią o podzielonych zdaniach na ten temat. Autor jest ciekawy...

DO KATA

Proszę podać ściśle wartość kąta między spinami dwóch elektronów w stanie singletowym i spinami dwóch elektronów w stanie trypletowym.

HYBRYDYZACJA sp² DLA ...METANU

Do wydania angielskiej książki, chcę pokazać na przykładzie CH₄, że hybrydyzacje sp³, sp², sp dają w metodzie Hartree-Focka jedno i to samo. W tym celu muszę mieć możliwość

konstruowania funkcji bazy jako liniowych kombinacji orbitali atomowych s i p. Czy ktos zna program, który potrafi to zrobic?

CALL FOR PAPERS

Drodzy, przesyłajcie mi krotkie wiadomosci do publikacji w Psi*. Może ktos, chce cos pozyczyc, poradzić się. Najbardziej cieszyłbym się, gdyby zaczęły się dyskusje o chemii, ale nie za bardzo specjalistyczne.