

Symetria i jej wykorzystanie w chemii

Prowadzący zajęcia:Prof. zw. Andrzej J. Sadlej.....
.....dr hab. Maria Barysz, Prof. UMK.....

Wykład15.	godz.	waga:	%	EGZ/ZAL	semestr:
Ćwiczenia15..	godz.	waga:	%	EGZ/ZAL	semestr:
Konwersatorium	godz.	waga:	%	EGZ/ZAL	semestr:
Seminarium	godz.	waga:	%	EGZ/ZAL	semestr:
Zajęcia terenowe	godz.	waga:	%	EGZ/ZAL	semestr:
Laboratorium	godz.	waga:	%	EGZ/ZAL	semestr:
Kierownik laboratorium	...dr hab. Maria Barysz, Prof. UMK.....					

Waga przedmiotu2...ECTS

Skrócony opis:

Wykład w przystępny sposób, oparty na przykładach, pokazuje znaczenie symetrii molekuł w rozwiązywaniu teoretycznych problemów w chemii. Pokazuje znaczenie symetrii i teorii grup w zrozumieniu teorii wiązania i budowy cząsteczek. W czasie wykładu i ćwiczeń słuchacz zapoznaje się z licznymi przykładami i problemami ilustrującymi sposób zastosowania omawianej teorii do różnorodnych zagadnień chemicznych a w szczególności spektroskopii molekularnej.

Opis przedmiotu:

Określenie i twierdzenia teorii grup. Grupy, podgrupy, klasy

- Symetria cząsteczek i grupy punktowe symetrii. Elementy i operacje symetrii. Tabele mnożenia grupowego. Reprezentacja macierzowa i jej własności. Charaktery reprezentacji.
- Nieredukowalne i redukowalne reprezentacje. Małe i wielkie twierdzenie o ortogonalności i konsekwencje. Tabele charakterów. Rozkład reprezentacji przywiedlnych na nieprzywiedlne.
- Reprezentacje i tabele grup cyklicznych.
- Teoria grup a mechanika kwantowa. Symetrycznie adoptowana baza. Wyznaczanie niezerowych elementów macierzowych. Faktoryzacja równań wiekowych.
- Podwyższanie i obniżanie symetrii molekuł i ich konsekwencje. Diagramy korelacyjne reprezentacji nieprzywiedlnych grup $D_{4h}-C_{4v}$, $C_{4v}-C_{2v}$ itd. Molekuły liniowe. Grupy o rzędzie nieskończonym. Iloczyny proste reprezentacji. Tabele charakterów iloczynu prostego grup $D_{6h}=D_6 \times C_i$ oraz $O_h = O \times C_i$. Symetria i degeneracja.
- Teoria pola ligandów, klasyczna i kwantowa. Swobodne atomy i jony metali przejściowych. Rozszczepienie poziomów pod wpływem pola ligandów. Kompleksy okta- i tetraedryczne. Ocena wielkości rozszczepienia orbitali d. Diagramy energetyczne orbitali molekularnych. Termy i rozszczepienia termów.
- Spektroskopia oscylacyjna. Widma IR i Ramana. Reprezentacje przywiedlne drgań normalnych i ich rozkład na reprezentacje nieprzywiedlne. Symetria drgań normalnych, momenty przejść i reguły wyboru. Polaryzowalności i momenty dipolowe. Diagramy korelacyjne drgań normalnych dla molekuł CH_4-CH_2D i $CH_4-CH_2D_2$ i dla molekuł liniowych, symetria $D_{2h} - D^\infty_h$.
- Spektroskopia elektronowa. Symetria funkcji falowych. Reguły wyboru.

Literatura:

- F. Albert Cotto "Teoria grup. Zastosowania w chemii", PWN 1973
- Robert L. Carter "Molecular symmetry and Group theory", John Wiley & Sons, Inc. New York, 1998
- P.W. Atkins, R. S. Friedman "Molecular Quantum Mechanics", Oxford University Press Inc., New York 1997
- Marek T. Pawlikowski, Wstęp do teoretycznej spektroskopii molekularnej. Teoria Grup. Wydawnictwo Uniwersytetu Jagiellońskiego 2007.

Uwagi: