

1. Postulaty mechaniki kwantowej; formalizm i interpretacja mechaniki kwantowej.
2. Układy modelowe jedno- i wielowymiarowe: cząstka w pudle potencjału, bariery potencjału, oscylator harmoniczny, rotator sztywny; atom wodoropodobny.
3. Atomy wieloelektronowe: układ okresowy pierwiastków, wypadkowe liczby kwantowe i termy atomowe (słabe sprzężenie).
4. Podstawy przybliżonych metody obliczeniowych chemii kwantowej: metoda wariacyjna; przybliżenie Borna-Oppenheimera, przybliżenie jednoelektronowe, metoda Hartree-Focka, metoda LCAO MO i jej analityczne sformułowanie, źródła błędów metody HF, metody ab initio oraz metody półempiryczne.
5. Podstawy teorii funkcjonałów gęstości: gęstość elektronowa a funkcja falowa; twierdzenia Hohenberga-Kohna, metoda Kohna-Shama, funkcjonały korelacyjno-wymienne.
6. Metody post-HF (pojęcie konfiguracji, reguły Slatera-Condon, rachunek zaburzeń MP, metoda CI, metoda MC SCF, twierdzenie Brillouina, warianty metod CI i MP, pojęcie spójności rozmiarowej).
7. Dokładność metod-obliczeniowych chemii kwantowej.
8. Podstawy kwantowo-chemicznego modelowania molekularnego: hiperpowierzchnia energii potencjalnej i punkty stacjonarne, optymalizacja geometrii układów molekularnych, opis struktury elektronowej, orbitale molekularne a orbitale zlokalizowane, analiza populacyjna i indeksy krotności wiązań, analiza wibracyjna, optymalizacja geometrii stanu przejściowego, modelowanie reaktywności chemicznej – kinetyka i termodynamika reakcji; indeksy reaktywności – molekularny potencjał elektrostatyczny, teoria orbitali granicznych i funkcje Fukuięgo.
9. Elementy termodynamiki statystycznej: podstawowe potencjały termodynamiczne, zasady termodynamiki fenomenologicznej, entropia jako łącznik między mikro i makroświatem, przestrzeń fazowa μ i γ , równanie Liouville'a, podstawowe zespoły statystyczne, funkcja rozdziału, gaz doskonały, statystyczny opis podstawowych stanów skupienia materii (gaz rzeczywisty, ciecz i ciało stałe), metody symulacyjne.
10. Spektroskopia: symetria cząsteczek, reguły wyboru, widma rotacyjne i oscylacyjne, drgania normalne, widma IR i Ramana, anharmoniczność, widma elektronowe, struktura oscylacyjna, stany wzbudzone elektronowo, widma absorpcyjne i emisyjne, akcja laserowa.
11. Elektryczne i magnetyczne własności cząsteczek, momenty dipolowe, polaryzowalność i indukowane momenty dipolowe, oddziaływania międzycząsteczkowe.

Sugerowana literatura:

L. Piel, „*Idee chemii kwantowej*”, PWN

W. Kołos, J. Sadlej, „*Atom i cząsteczka*”, WNT

J. de Paula, P. Atkins, „*Chemia fizyczna*”, PWN, rozdz. 7-16

R. F. Nalewajski, „*Podstawy i metody chemii kwantowej: wykłady*”, PWN

F. Jensen, „*Introduction to Computational Chemistry*”, Wiley