

Spis treści

Wstęp	XVII
1. Mechanika kwantowa i jej magia	I
1.1. Historia rewolucji	3
1.2. Postulaty	14
1.3. Zasada nieoznaczoności Heisenberga	31
1.4. Kopenhaska interpretacja świata	34
1.5. Jak złamać zasadę Heisenberga — recepta Einsteina-Podolskiego-Rosena	35
1.6. Czy świat jest realny (równoczesna obecność w dwóch miejscach)	37
1.7. Nierówność Bella rozstrzygnie...	40
1.8. Intrzygujący wynik doświadczeń z fotonami	43
1.9. Teleportacja	44
2. Równanie Schrödingera	53
2.1. Symetria hamiltonianu i jej konsekwencje	55
2.1.1. Hamiltonian i zasady zachowania	55
2.1.2. Niezmienniczość względem translacji	59
2.1.3. Niezmienniczość względem rotacji	61
2.1.4. Niezmienniczość względem permutacji identycznych cząstek (fermiony/bozony)	62
2.1.5. Fundamentalne i mniej fundamentalne niezmienniczości	63
2.1.6. Niezmienniczość względem inwersji — parzystość	63
2.1.7. Niezmienniczość względem sprzężenia ładunkowego	66
2.1.8. Niezmienniczość względem operacji symetrii molekuly	67
2.1.9. Zachowanie całkowitego spinu	67
2.1.10. Indeksy stanów spektroskopowych	68
2.2. Równanie Schrödingera dla stanów stacjonarnych	68
2.3. Równanie Schrödingera zależne od czasu	74
2.4. Ewolucja stanu układu po włączeniu zaburzenia	77

2.4.1.	Model dwustanowy	78
2.4.2.	Rachunek zaburzeń poprawny do pierwszego rzędu	80
2.4.3.	Zaburzenie niezależne od czasu i złota reguła Fermiego	81
2.4.4.	Najważniejszy przypadek: zaburzenie periodyczne	82
3.	Wędrowka poza równanie Schrödingera	88
3.1.	Rzut oka na klasyczną teorię względności	91
3.1.1.	Warunek znikania sił pozornych	91
3.1.2.	Transformacja Galileusza	94
3.1.3.	Doświadczenie Michelsona–Morleya	94
3.1.4.	Transformacja Lorentza	97
3.1.5.	Nowe prawo dodawania prędkości	100
3.1.6.	Czasoprzestrzeń Minkowskiego	101
3.1.7.	Jak dojść do $E = mc^2$	104
3.2.	W stronę kwantowej mechaniki relatywistycznej	107
3.2.1.	Równanie Kleina–Gordona	107
3.3.	Równanie Diraca	109
3.3.1.	Morze elektronowe Diraca	109
3.3.2.	Równanie dla elektronu i dla pozytonu	112
3.3.3.	Spinory i bispinory	113
3.3.4.	O czym będzie dalej	115
3.3.5.	Duże i małe składowe bispinora	115
3.3.6.	Jak nie utonąć w morzu Diraca	116
3.3.7.	Od Diraca do Schrödingera — jak uzyskać hamiltonian nierelatywistyczny	118
3.3.8.	Jak pojawia się spin	118
3.3.9.	Proste pytania	121
3.4.	Atom wodoru w teorii Diraca	121
3.4.1.	Krok po kroku: obliczenie energii stanu podstawowego atomu wodoru opisanego równaniem Diraca	122
3.5.	Większe układy	128
3.6.	Poza równaniem Diraca...	128
3.6.1.	Równanie Breit'a	129
3.6.2.	Kilka słów o elektrodynamice kwantowej	131
4.	Ścisłe rozwiązania — nasze latarnie morskie	142
4.1.	Cząstka swobodna	144
4.2.	Cząstka w pudle	145
4.2.1.	Pudło z końcami	145
4.2.2.	Pudło cykliczne	150
4.2.3.	Porównanie obu pudeł: heksatrien i benzen	152
4.3.	Efekt tunelowy	154
4.3.1.	Pojedyncza bariera	154
4.3.2.	Magia dwóch barier...	159

4.4. Oscylator harmoniczny	167
4.5. Oscylator Morse'a	170
4.6. Rotator sztywny	178
4.7. Atom wodoropodobny	181
4.8. Harmoniczny atom helu (harmonium)	186
4.9. Co wspólnego mają te wszystkie problemy	187
4.10. Latarnie morskie i perły z lamusa	188
5. Dwie fundamentalne metody przybliżone	194
5.1. Metoda wariacyjna	195
5.1.1. Zasada wariacyjna	195
5.1.2. Parametry wariacyjne	199
5.1.3. Metoda Ritza	202
5.2. Metoda perturbacyjna	204
5.2.1. Rachunek zaburzeń Rayleigha–Schrödingera	204
5.2.2. Zasada wariacyjna Hylleraasa	209
5.2.3. Równanie Hylleraasa	210
5.2.4. Zbieżność rachunku zaburzeń	211
6. Rozdzielamy ruch jąder i ruch elektronów	218
6.1. Separacja ruchu środka masy	223
6.2. Przybliżenie adiabatyczne	226
6.3. Równanie dla ruchu jąder	229
6.3.1. Przybliżenie Borna–Oppenheimera	229
6.3.2. Wyprowadzenie równania dla ruchu jąder	230
6.4. Uwzględnienie rotacji w oscylacjach	231
6.5. Podstawy spektroskopii elektronowo-oscylicyjno-rotacyjnej	236
6.5.1. Struktura oscylacyjna	236
6.5.2. Struktura rotacyjna	238
6.6. Przybliżone rozdzielenie rotacji i oscylacji	241
6.7. Molekuła wieloatomowa	242
6.8. Stany niezwiązane	248
6.9. Przecięcie krzywych energii potencjalnej dla molekuly dwuatomowej	254
6.10. Przecięcie hiperpowierzchni energii potencjalnej dla molekuly wieloatomowej	257
6.10.1. Wybór specjalnego układu współrzędnych	257
6.10.2. Przecięcie stożkowe	259
6.10.3. Znaczenie przecięcia stożkowego — przejścia bezpromienne i reakcje fotochemiczne	261
6.11. Poza przybliżeniem adiabatycznym...	265
6.11.1. Efekty wibronowe	265
6.11.2. Fuzja jądrowa katalizowana mionami	267
6.11.3. „Matrioszka”, czyli molekula w molekule	268

7. Ruch jąder	275
7.1. Widmo oscylacyjno-rotacyjne — przykład obliczenia dokładnego: kompleks atom-molekuła dwuatomowa	279
7.1.1. Układ współrzędnych i hamiltonian	279
7.1.2. Nieizotropowość potencjału V	281
7.1.3. Dodawanie momentów pędu w mechanice kwantowej	282
7.1.4. Zastosowanie metody Ritza	283
7.1.5. Obliczenie widma oscylacyjno-rotacyjnego	284
7.2. Pola siłowe	286
7.3. Lokalna mechanika molekularna (MM)	291
7.3.1. Wiązania nierozrywalne	291
7.3.2. Wiązania rozrywalne	293
7.4. Globalna mechanika molekularna	294
7.4.1. Katastrofa wielu minimów	294
7.4.2. Czy chodzi o minimum globalne	295
7.5. Dynamika małych wychyleń z położenia równowagi — drgania normalne	297
7.5.1. Teoria drgań normalnych	297
7.5.2. Drgania charakterystyczne	302
7.5.3. Energia drgań zerowych	306
7.6. Dynamika molekularna (MD)	307
7.7. Dynamika kwantowo-klasyczna	312
7.8. Symulowane schładzanie	312
7.9. Dynamika Langevina	313
7.10. Dynamika Monte Carlo	314
7.11. Dynamika Cara-Parrinello	317
7.12. Automaty komórkowe	320
8. Ruch elektronów w polu średnim: atomy i molekuły	328
8.1. Metoda Hartree-Focka z lotu ptaka	333
8.1.1. Od spinorbitali do wieloelektronowej funkcji falowej	334
8.1.2. Zmienne	335
8.1.3. Funkcje wyznacznikowe Slatera	336
8.1.4. Co to jest metoda Hartree-Focka	337
8.2. Wyprowadzenie równania Focka na najlepsze spinorbitale	339
8.2.1. Notacja Diraca i Coulomba	339
8.2.2. Funkcjonał energii	339
8.2.3. Szukamy ekstremum warunkowego	340
8.2.4. Wyznacznik Slatera a transformacja unitarna	343
8.2.5. Niezmienniczość operatorów $\hat{J}$ oraz $\hat{K}$	345
8.2.6. Diagonalizacja macierzy mnożników Lagrange'a	345
8.2.7. Równanie Focka na najlepsze spinorbitale (ogólna metoda HF, czyli GHF)	346
8.2.8. Układy zamkniętopowłokowe i ograniczona metoda Hartree-Focka (RHF)	347
8.2.9. Iteracyjna technika uzyskiwania orbitali molekularnych	354

8.3.	Energia całkowita w metodzie Hartree–Focka	356
8.4.	Technika obliczeń: orbitale atomowe jako budulec funkcji falowej molekuł	358
8.4.1.	Scentrowanie orbitalu atomowego	359
8.4.2.	Orbitale slaterowskie (STO)	361
8.4.3.	Orbitale gaussowskie (GTO)	362
8.4.4.	Metoda liniowych kombinacji orbitali atomowych (LCAO MO)	365
8.4.5.	Bazy orbitali atomowych	369
8.4.6.	Metoda Hartree–Focka–Roothaana (SCF LCAO MO)	370
8.4.7.	Praktyczne problemy w metodzie SCF LCAO MO	373
8.5.	Wracamy do fundamentów...	376
8.5.1.	Kiedy metoda RHF zawodzi	376
8.5.2.	Klasy Fukutome	379
8.6.	Układ okresowy Mendelejewa	388
8.6.1.	Podobnie jak w atomie wodoru...	388
8.6.2.	Są różnice...	389
8.7.	Istota wiązania chemicznego	390
8.7.1.	Przypadek H_2^+ w obrazie MO	390
8.7.2.	Przypadek H_2 w obrazie MO i VB	395
8.7.3.	Czy wiązanie chemiczne można zobaczyć	396
8.8.	Energia wzbudzenia, potencjał jonizacji i powinowactwo elektronowe	397
8.8.1.	Przybliżone energie stanów	397
8.8.2.	Wzbudzenie singletowe czy trypletowe	399
8.8.3.	Reguła Hunda	401
8.8.4.	Potencjał jonizacji i powinowactwo elektronowe (twierdzenie Koopmansa)	401
8.9.	Lokalizacja orbitali molekularnych w metodzie RHF	405
8.9.1.	Zewnętrzne metody lokalizacji	407
8.9.2.	Wewnętrzne metody lokalizacji	408
8.9.3.	Przykłady lokalizacji	409
8.9.4.	Technika obliczeń	414
8.9.5.	Wiązania σ , π , δ	415
8.9.6.	Rozmiary par elektronowych a fundamenty chemii	417
9.	Ruch elektronów w polu średnim: układy periodyczne	426
9.1.	Sieć prosta	429
9.2.	Wektor falowy	432
9.3.	Sieć odwrotna	435
9.4.	Pierwsza strefa Brillouina (PSB)	438
9.5.	Właściwości punktów w PSB	440
9.6.	Kilka słów o funkcjach Blocha	441
9.6.1.	Fale w jednym wymiarze (1-D)	441
9.6.2.	Fale w dwóch wymiarach (2-D)	444

9.6.3.	Obwiednia	448
9.6.4.	Quasi-pęd	449
9.6.5.	Warunki dyfrakcji w kryształach	450
9.7.	Kryształ nieskończony jako granica układu cyklicznego	450
9.8.	Potrójna rola wektora falowego	455
9.9.	Struktura pasmowa	456
9.9.1.	Warunki Borna-von Kármána w 3-D	456
9.9.2.	Orbitale kryształu z funkcji Blocha (metoda LCAO CO)	457
9.9.3.	Równania metody SCF LCAO CO	460
9.9.4.	Struktura pasmowa i szerokość pasm	462
9.9.5.	Poziom Fermiego i przerwa energetyczna: izolatory, półprzewodniki i metale	464
9.10.	Chemia kwantowa ciała stałego	470
9.10.1.	Dlaczego pasma czasem idą w górę	470
9.10.2.	Dlaczego pasma czasem idą w dół	471
9.10.3.	Dlaczego pasma czasem się nie zmieniają	471
9.10.4.	Jak zrozumieć bardziej skomplikowane sytuacje	473
9.11.	Rozwiązywanie problemu Hartree-Focka dla kryształu	480
9.11.1.	Równanie wiekowe	480
9.11.2.	Całkowanie w PSB	483
9.11.3.	Elementy macierzowe operatora Focka	484
9.11.4.	Procedura iteracyjna	485
9.11.5.	Energia całkowita	486
9.12.	Problem sił dalekiego zasięgu	488
9.12.1.	Poprawki do macierzy Focka	488
9.12.2.	Poprawki do energii całkowitej	490
9.12.3.	Zastosowanie rozwinięcia multipolowego do macierzy Focka	492
9.12.4.	Zastosowanie rozwinięcia multipolowego do energii całkowitej	497
9.13.	Wracamy do członu wymiennego	499
9.14.	Swoboda wyboru komórki elementarnej	501
9.14.1.	Metoda kompensacji pola	505
9.14.2.	Symetria wyboru podukładów	507

10. Korelacja ruchów elektronów 513

10.1.	Metody wariacyjne z użyciem funkcji falowej jawnie skorelowanej	518
10.1.1.	Warunek ostrza korelacyjnego	519
10.1.2.	Funkcja Hylleraasa	521
10.1.3.	Metoda CI Hylleraasa	522
10.1.4.	Harmoniczny atom helu (harmonium)	523
10.1.5.	Funkcje Jamesa-Coolidge'a i Kołosa-Wolniewicza	524
10.1.6.	Metoda wykładniczo skorelowanych funkcji Gaussa	529
10.1.7.	Dziura coulombowska („dziura korelacyjna”)	530
10.1.8.	Dziura wymienna („dziura Fermiego”)	533

10.2.	Metody wariacyjne z wyznacznikami Slatera	538
10.2.1.	Metoda wiązań walencyjnych (VB)	538
10.2.2.	Metoda oddziaływania konfiguracji (CI)	542
10.2.3.	Bezpośrednia metoda CI	551
10.2.4.	Wieloreferencyjna metoda CI	552
10.2.5.	Wielokonfiguracyjna metoda SCF (MC SCF)	554
10.2.6.	Metoda kompletnej przestrzeni aktywnej (CAS SCF)	558
10.3.	Metody niewariacyjne z wyznacznikami Slatera	559
10.3.1.	Metoda sprzężonych klastrów (CC)	559
10.3.2.	Metoda równań ruchu (EOM-CC)	568
10.3.3.	Wielociałowy rachunek zaburzeń (MBPT)	571
10.3.4.	Wersja Møllera–Plesseta rachunku zaburzeń Rayleigha–Schrödingera	579
11.	Ruch elektronów: teoria funkcjonału gęstości	591
11.1.	Główny aktor, czyli gęstość elektronowa	593
11.2.	Dwa ważne twierdzenia Hohenberga–Kohna	602
11.2.1.	Twierdzenie o równoważności funkcji falowej i gęstości elektronowej	602
11.2.2.	Twierdzenie o istnieniu funkcjonału energii z minimum dla ρ_0	604
11.3.	Równania Kohna–Shama	607
11.3.1.	Układ Kohna–Shama nie oddziałujących elektronów	607
11.3.2.	Wyrażenie na energię całkowitą	608
11.3.3.	Wyprowadzenie równań Kohna–Shama	610
11.3.4.	Równania Kohna–Shama z polaryzacją spinową	613
11.4.	Konkret metody DFT: wzór na energię korelacyjno-wymienną	613
11.4.1.	Przybliżenie lokalnej gęstości (LDA)	614
11.4.2.	Przybliżenia nielocalne (NLDA)	614
11.4.3.	Przybliżenia DFT a czystość obliczeń <i>ab initio</i>	616
11.5.	Jakie uzasadnienie fizyczne ma potencjał i energia wymiennie-korelacyjna	616
11.5.1.	Funkcja rozkładu pary elektronów	616
11.5.2.	Stopniowe włączenie oddziaływania elektronów	618
11.5.3.	Energia wymiennie-korelacyjna a $\Pi_{\text{śred}}$	621
11.5.4.	Dziury elektronowe	621
11.5.5.	Fizyka narzuca na dziury pewne warunki graniczne	623
11.5.6.	Dziura wymienna i dziura korelacyjna	624
11.5.7.	Podstawy fizyczne poszczególnych przybliżeń	626
11.6.	Medytacje nad sukcesem DFT	627
12.	Molekuła w polu elektrycznym i magnetycznym	642
12.1.	Twierdzenie Hellmanna–Feynmana	646
12.2.	Nieruchoma molekuła w polu elektrycznym	649

12.2.1.	Pole elektryczne jako zaburzenie	650
12.2.2.	Jednorodne pole elektryczne	655
12.2.3.	Pole niejednorodne: polaryzowalności i hiperpolaryzowalności multipolowe	661
12.3.	Jak obliczyć moment dipolowy	662
12.3.1.	Przybliżenie Hartree-Focka	663
12.3.2.	Dipole atomowe i dipole wiązań	664
12.3.3.	W przybliżeniu różniczkowego zerowego nakrywania	665
12.4.	Jak obliczyć polaryzowalność dipolową	665
12.4.1.	Metoda sumy po stanach	665
12.4.2.	Metoda pola skończonego	669
12.4.3.	Co się dzieje przy dużych polach elektrycznych	674
12.5.	Molekuła w oscylującym polu elektrycznym	676
12.6.	Dipole magnetyczne elektronu i jąder	680
12.6.1.	Elektron	680
12.6.2.	Jądro	680
12.6.3.	Dipol w polu	681
12.7.	Hamiltonian układu w polu elektromagnetycznym	682
12.8.	Efektywny hamiltonian NMR	687
12.8.1.	Główne człony hamiltonianu efektywnego	688
12.8.2.	Bez elektronów...	688
12.8.3.	Dodajemy elektrony	690
12.8.4.	Uśrednienie po obrotach	691
12.9.	Teoria Ramsaya stałych ekranowania	693
12.9.1.	Konstrukcja rachunku zaburzeń	693
12.9.2.	Uśrednienie po rotacjach molekuly	695
12.9.3.	Wyrażenie na stałą ekranowania	696
12.10.	Orbitale atomowe „niezmiennicze” względem cechowania	697
12.10.1.	Orbitale Londona	697
12.10.2.	Całki są niezmiennicze	698
13.	Oddziaływania międzymolekularne	706
13.1.	Koncepcja energii oddziaływania	710
13.1.1.	Gradacja naturalności podziałów	710
13.1.2.	Najbardziej naturalny	711
13.2.	Energia wiązania	713
13.3.	Energia dysocjacji	713
13.4.	Bariera dysocjacji	714
13.5.	Metoda supermolekularna	714
13.5.1.	Dokładność powinna być taka sama...	714
13.5.2.	Błąd superpozycji bazy	717
13.5.3.	Wady i zalety metody supermolekularnej	718
13.6.	Metoda perturbacyjna w oddziaływaniu międzymolekularnym	719
13.6.1.	Odległość między molekułami	719

13.6.2.	Polaryzacyjny rachunek zaburzeń (dwie molekuly)	720
13.6.3.	Interpretacja fizyczna oddziaływań międzymolekularnych	725
13.6.4.	Energia elektrostatyczna w przedstawieniu multipolowym plus energia penetracyjna	729
13.6.5.	Energia indukcyjna w przedstawieniu multipolowym	732
13.6.6.	Energia dyspersyjna w przedstawieniu multipolowym	734
13.7.	Rachunki zaburzeń o adaptowanej symetrii	739
13.7.1.	Przybliżenie polaryzacyjne jest ...nielegalne	739
13.7.2.	Konstrukcja funkcji o adaptowanej symetrii	740
13.7.3.	W przybliżeniu polaryzacyjnym zaburzenie jest bardzo duże	741
13.7.4.	Schemat iteracyjny rachunków zaburzeń o adaptowanej symetrii	742
13.7.5.	Związek z metodą wariacyjną — metoda Heitlera–Londona	749
13.7.6.	Gdy nie mamy idealnych funkcji $\psi_{A,0}$ oraz $\psi_{B,0}$	749
13.8.	Problemy ze zbieżnością	750
13.8.1.	Aproksymanty Padé mogą poprawić zbieżność	751
13.8.2.	Przyczyna sukcesu aproksymant Padé	756
13.9.	Nieaddytywność oddziaływań międzymolekularnych	756
13.9.1.	Rozwinięcie wielociałowe energii oddziaływania	758
13.9.2.	Addytywność energii elektrostatycznej	761
13.9.3.	Nieaddytywność oddziaływań wymiennych	762
13.9.4.	Nieaddytywność oddziaływań indukcyjnych	766
13.9.5.	Addytywność energii dyspersyjnej w drugim rzędzie	772
13.9.6.	Nieaddytywność oddziaływań dyspersyjnych w trzecim rzędzie	773
13.10.	Oddziaływanie atomów gazów szlachetnych	774
13.11.	Promienie i powierzchnia van der Waalsa	775
13.11.1.	Twardość powierzchni	776
13.11.2.	Chemia kwantowa ograniczonych przestrzeni — nanonaczynia	777
13.12.	Chemia supramolekularna i syntony	778
13.12.1.	Związane czy nie związane	779
13.12.2.	Wyróżniona rola oddziaływań elektrostatycznych i odpychania walencyjnego	779
13.12.3.	Wiązania wodorowe	780
13.12.4.	Oddziaływania koordynacyjne	781
13.12.5.	Rozpoznanie molekularne — syntony	783
13.12.6.	Oddziaływania hydrofobowe	783
13.12.7.	Syntony typu „klucz i zamek” oraz „ręka i rękawiczka”	786
14.	Ruch elektronów i jąder: reakcje chemiczne	798
14.1.	Hiperpowierzchnia energii potencjalnej	802
14.1.1.	Punkty krytyczne	804
14.1.2.	Wyróżniona współrzędna reakcji	806

14.1.3.	Trajektoria największego spadku	806
14.1.4.	Nasz cel	807
14.1.5.	Opis dynamiki na hiperpowierzchni reakcji (podejście pionierów)	807
14.2.	Dokładne rozwiązania	812
14.2.1.	Specjalny układ współrzędnych	813
14.2.2.	Rozwiązanie równania Schrödingera	816
14.2.3.	Faza Berry'ego	817
14.3.	Wewnętrzna współrzędna reakcji, czyli statyka	819
14.4.	Metoda hamiltonianu drogi reakcji	822
14.4.1.	Przybliżenie oscylacyjne adiabatyczne	824
14.4.2.	Model oscylacyjny diabetyczny	830
14.4.3.	Przykład zastosowania teorii hamiltonianu drogi reakcji	832
14.5.	Akceptorowo-donorowa teoria reakcji chemicznych	840
14.5.1.	Molekularny potencjał elektrostatyczny	840
14.5.2.	Skąd bariera	845
14.5.3.	Formalizmy MO, AD i VB	846
14.5.4.	Etapy reakcji	850
14.5.5.	Udziały struktur na różnych etapach reakcji	854
14.5.6.	Rola symetrii	868
14.5.7.	Bariera to koszt otwierania powłok elektronowych	872
14.6.	Bariera reakcji przeniesienia elektronu	874
14.6.1.	Potencjał diabetyczny i adiabetyczny	874
14.6.2.	Teoria Marcusa	876
15.	Informatyczna misja chemii	896
15.1.	Układy złożone	900
15.2.	Układy złożone samoorganizujące się	901
15.3.	Oddziaływania kooperatywne	902
15.4.	Analiza podatnościowa	903
15.5.	Chemia kombinatoryczna — biblioteki molekularne	903
15.6.	Nieliniowość	905
15.7.	Atraktory	906
15.8.	Cykle graniczne	907
15.9.	Bifurkacje i chaos	909
15.10.	Katastrofy	911
15.11.	Zjawiska kolektywne	911
15.11.1.	Symetria skali (renormalizacja)	912
15.11.2.	Fraktale	914
15.12.	Sprzężenia zwrotne w chemii — nieliniowa dynamika reakcji chemicznych	916
15.12.1.	Brukselator bez dyfuzji	916
15.12.2.	Brukselator z dyfuzją — struktury dyssypatywne	921
15.12.3.	Hipercykle	923

15.13. Chemia przetwarzania informacji	925
15.13.1. Miara ilości informacji	925
15.13.2. Misja chemii	927
15.13.3. Komputery molekularne oparte na oddziaływaniu syntonów	928
DODATKI	939
A. Przypomnienie: macierze i wyznaczniki	941
1. Macierze	941
2. Wyznaczniki	945
B. Kilka słów o przestrzeniach, wektorach i funkcjach	948
1. Przestrzeń wektorowa	948
2. Przestrzeń euklidesowa	949
3. Przestrzeń unitarna	951
4. Przestrzeń Hilberta	951
5. Operatory	953
6. Zagadnienie własne operatora	954
7. Komutacja i zagadnienie własne operatorów	955
C. Teoria grup w chemii	956
1. Grupa	956
2. Reprezentacja grupy	967
3. Teoria grup a mechanika kwantowa	980
4. Całki ważne w spektroskopii	986
D. Model dwóch stanów	1007
E. Funkcja delta Diraca	1011
1. Aproksymacje funkcji $\delta(x)$	1012
2. Właściwości funkcji $\delta(x)$	1013
3. Zastosowania funkcji $\delta(x)$	1014
F. Translacja i pęd oraz rotacja i moment pędu	1016
G. Potencjał wektorowy i skalarny	1019
H. Optymalna funkcja dla atomu wodoropodobnego	1027
I. Układy współrzędnych: laboratoryjny i związany z molekułą	1029
J. Przypomnienie: ortogonalizacja wektorów	1035
1. Ortogonalizacja Schmidta	1035
2. Ortogonalizacja symetryczna Löwdina	1036

K. Diagonalizacja macierzy	1040
L. Równanie wiekowe	1043
M. Reguły Slatera–Condon	1045
N. Metoda nieoznaczonych mnożników Lagrange’a	1057
O. Metoda funkcji kary	1062
P. Całki z orbitalami gaussowskimi 1s	1065
Q. Funkcja singletowa i trypletowa dla przypadku dwuelektronowego	1068
R. Molekuła H_2^+ w najprostszej bazie AO	1070
S. Macierz gęstości i analizy populacyjne	1077
T. Moment dipolowy wolnej pary	1084
U. Druga kwantyzacja	1087
V. Rozwinięcie multipolowe	1093
W. Deformacja Pauliego	1107
X. Udział struktur donorowo-akceptorowych w konfiguracji MO	1116
Skorowidz nazwisk	1120
Skorowidz rzeczowy	1131