

CHEMIA KWANTOWA NA TORUŃSKIEJ FIZYCE

JACEK KARWOWSKI

Instytut Fizyki, Uniwersytet Mikołaja Koprnika

70-lecie Fizyki na UMK w Toruniu - 3 marca 2016

POCZĄTEK CHEMII KWANTOWEJ

1927 - praca Waltera Heitlera i Fritza Londona w Zeitschrift für Physik:

Wechselwirkung neutraler Atome
und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik

Von W. Heitler und F. London in Zürich.

Mit 2 Abbildungen. (Eingegangen am 30. Juni 1927.)



W. Heitler i F. London w 1928

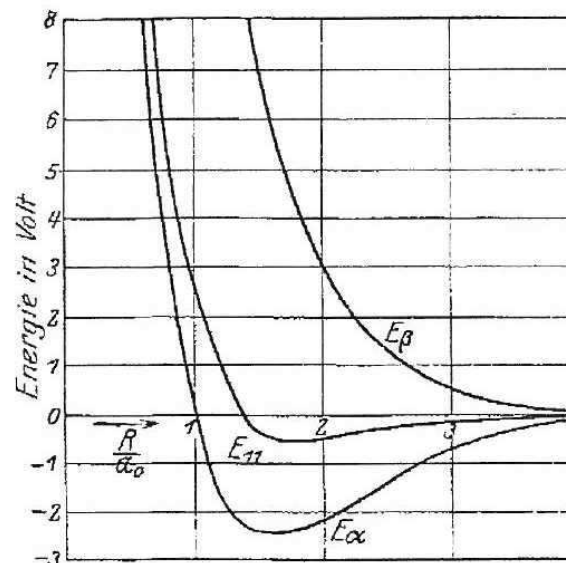


Fig. 1. Potential zweier neutraler H-Atome.
(E_α = homöopolare Anziehung,
 E_β = elastische Reflexion.)

POCZĄTKI CHEMII KWANTOWEJ W POLSCE



Włodzimierz Kołos (1928 – 1996).

Doktorat 1953: Wydział Fizyki Uniwersytetu
Warszawskiego; promotor **Leopold Infeld**.

1957 - wjazd do zespołu Roberta S. Mullikena
(Nagroda Nobla 1966) na University of Chicago.

Temat badań: *Kwantowo-mechaniczne obliczenia
własności cząsteczki wodoru.*

Jest promotorem prac doktorskich szeregu wybitnych chemików kwantowych, m.in. **Lutosława Wolniewicza** i **Wiesława Woźnickiego**, twórców toruńskiej chemii kwantowej, oraz **Bogumiła Jeziorskiego**, **Lucjana Piel** i innych (zespół warszawski).

W 1965 tworzy Katedrę Chemii Teoretycznej na Wydziale Chemii UW, później przekształconą w Pracownię Chemii Kwantowej, która stała się najsilniejszym ośrodkiem chemii kwantowej w Polsce.

POCZĄTKI CHEMII KWANTOWEJ W TORUNIU

Na Toruńskiej fizyce chemię kwantową tworzyli

Lutosław Wolniewicz i Wiesław Woźnicki

Obydwaj studiowali fizykę teoretyczną na Uniwersytecie Warszawskim w zespole profesora Leopolda Infelda.

U obydwu promotorem był Włodzimierz Kołos
(w przypadku Woźnickiego formalnym promotorem był Leopold Infeld,
bo Kołos nie miał jeszcze habilitacji).

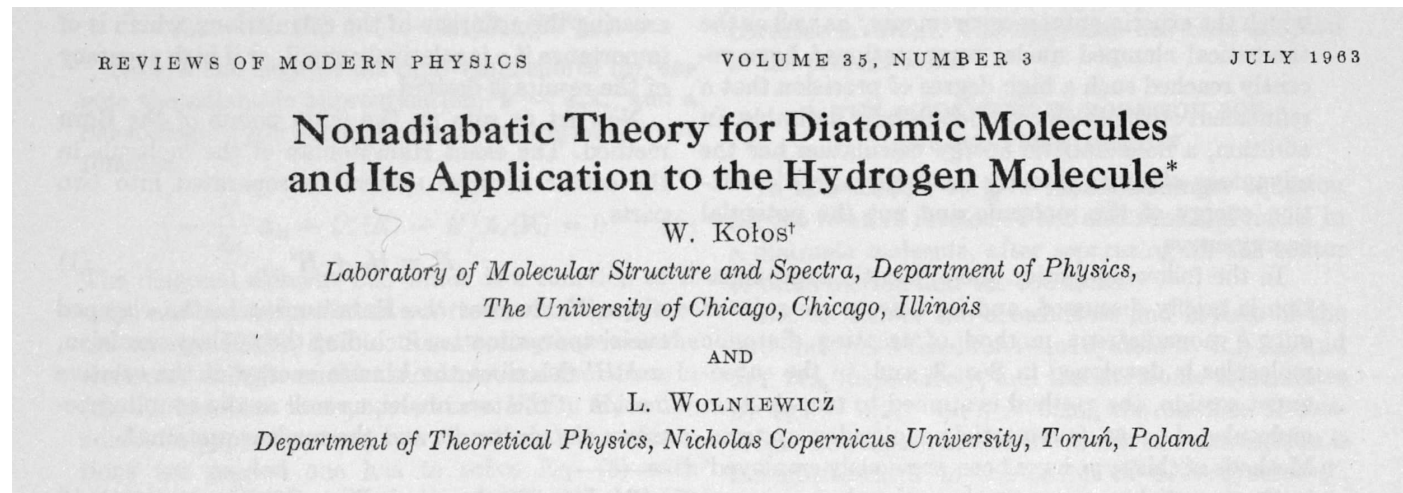


Lutosław Wolniewicz – Studia fizyczne:
1951 – 1953 na UMK, 1954 – 1955 na UW.
Magisterium 1955:
Wewnętrzna rotacja merkaptanu metylu;
Doktorat 1961,
Nieadiabatyczna teoria cząsteczek dwuatomowych i jej zastosowanie do cząsteczki wodoru.
Promotor - Włodzimierz Kołos.

Rezultaty: Dokładne rozwiązanie numeryczne równania Schrödingera dla cząsteczki wodoru traktowanej jako układ czterech ciał oraz dużo innych istotnie nowych wyników. Znaczna ich część nie w pełni doceniona.

CZĄSTECZKA WODORU

1963-64 i 1967-68 – Wydział Fizyki Uniwersyteu Chicogo, zespół R. S. Mullikena i C. C. J. Roothaana, wyjazdy wspólne z W. Kołosem.



Podstawą prowadzonych tam prac była skonstruowana przez Wolniewicza w doktoracie nieadiabatyczna teoria cząsteczek dwuatomowych. Jej zastosowanie do obliczeń energii stanu podstawowego cząsteczki wodoru zapoczątkowało serię prac, których wyniki dokładnością przewyższały pomiary spektroskopowe.

TEORIA DOKŁADNIEJSZA OD DOŚWIADCZENIA

Uwzględnienie wszystkich możliwych poprawek i rezygnacja z przybliżenia Borna-Oppenheimera \Rightarrow teoretyczna energia wariacyjna niższa od energii doświadczalnej.

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS VOLUME 41, NUMBER 12 15 DECEMBER 1964

Accurate Computation of Vibronic Energies and of Some Expectation Values for H_2 , D_2 , and T_2 †

W. KOŁOS* AND L. WOLNIEWICZ‡

Laboratory of Molecular Structure and Spectra, Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois

(Received 26 June 1964)

The complete four-particle nonrelativistic Hamiltonian and 147-term wavefunctions have been used to compute the energies and the expectation values of several other operators for vibronic ground states and for the first vibrationally excited states of H_2 , D_2 , and T_2 . For H_2 and D_2 the computed dissociation energies, with relativistic corrections, are by 0.6 and 1.3 cm^{-1} , respectively, larger than the experimental values.

Okazało się, że pomiary wykonane przez Gerharda Herzberga (Nobel 1971) miały błąd większy od oczekiwanego.

PODSUMOWANIE

- Po raz pierwszy otrzymano dla cząsteczki energię teoretyczną dokładniejszą od spektroskopowej
- Po raz pierwszy wykonano obliczenia dla cząsteczki innej niż H_2^+ bez przybliżenia Borna-Oppenheimera.
- Po raz pierwszy uwzględniono w obliczeniach molekularnych wszystkie poprawki relatywistyczne.

ŻYCIORYS NAUKOWY

- Tematyka badań: Teoretyczny opis struktury cząsteczek wodoru.
- Współpraca naukowa: Politechnika w Zurychu, Uniwersytety w Toronto, Guelph, Bielefeld.
- 20 prac ma więcej niż 100 cytowań. Najczęściej cytowana praca (o krzywych energii potencjalnej stanów wzbudzonych molekuly wodoru z roku 1965, wspólna z W. Kołosem) ma 1327 cytowań.
- Indeks Hirscha – 41

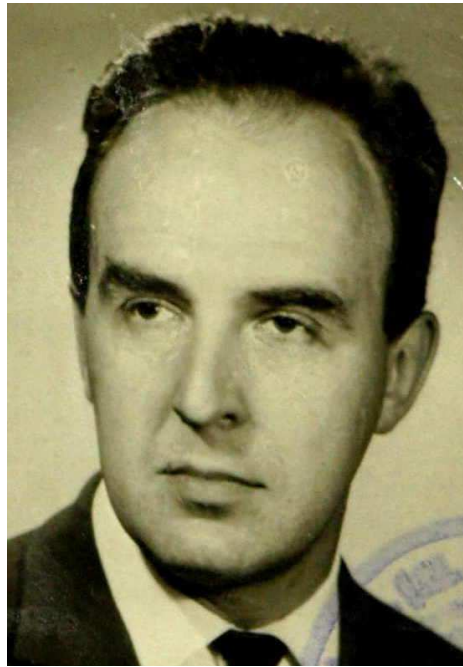
Wypromowani doktorzy:

Profesorowie: Andrzej Raczyński i Grażyna Staszewska;

Doktorzy habilitowani: Felicja Mrugała i Tadeusz Orlikowski.

Po odejściu Jerzego Rayskiego, Aleksander Jabłoński postanowił sprowadzić do Torunia innego teoretyka. O pomoc zwrócił się do Leopolda Infelda.

<p>INSTYTUT FIZYKI UNIwersYTETU WARSZAWSKIEGO FIZYKA TEORETYCZNA Warszawa, ul. Hoża 69 Centrala - Tel. 871-74 Dyrektor - Tel. 822-44</p> <p>Warszawa, dn. <u>31. maja</u> 195<u>7</u> r.</p> <p>L. dz.</p> <p>Prof. Dr. A. Jabłoński Katedra Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu M. Kopernika <u>T o r u Ń</u> ul. Grudziądzka 5</p> <p>Drogi Panie Kolego,</p> <p>Barszo chętnie pomógłbym w kłopotach Waszego Uniwersytetu, ale sprawa nie jest tak prosta jak się wydaje. Na przyszły rok akademicki wysyłamy 5 docentów zagranicę a 2 już jest zagranicą, tak że nie wiem jak sobie poradzimy sami. Mam jednakże trzech studentów, którzy są w trakcie otrzymania kandydatury - są to: Karczewski, specjalność elektrodynamika - robi pracę kandydacką u prof. Rubinowicza, S. Bażański, specjalność - teoria względności i elektrodynamika oraz Woźnicki - specjalność chemia kwantowa. Są to młodzi ludzie naogół zdolni. Z pośród docentów mamy tylko, w przyszłym roku akademickim, Werlego i Günthera.</p> <p>W związku z autonomią Uniwersytetu przesunięcia zależą tylko od osób, którym się je proponuje. Informacje, które podałem, są jedynym sposobem w jaki mogę Wam pomóc.</p> <p>Bardzo mi przykro, że jesteście w takim kłopotcie, ale muszę na swoje usprawiedliwienie dodać, że myśmy żadnego pracownika naukowego innemu Uniwersytetowi nie zabrali.</p> <p><i>L. Infeld</i> (Leopold Infeld)</p>	<p>INSTYTUT FIZYKI UNIwersYTETU WARSZAWSKIEGO FIZYKA TEORETYCZNA Warszawa, ul. Hoża 69 Centrala - Tel. 871-74 Dyrektor - Tel. 822-44</p> <p>Warszawa, dn. <u>15 stycznia</u> 195<u>8</u> r.</p> <p>L. dz.</p> <p>Drogi Panie Profesorze,</p> <p>W odpowiedzi na list Pana w sprawie obsady wakującej na UMK Katedry Fizyki Teoretycznej komunikuję, że pomówię z Güntherem, ale wątpię czy zgodzi się na objęcie tej Katedry. Proponuję Woźnickiego, który już zdał egzamin kandydacki. Jest on uczniem Kołosa - zdolnym, dobrym fizykiem teoretykiem.</p> <p>Łączę serdeczne pozdrowienia</p> <p><i>L. Infeld</i> (Leopold Infeld)</p>
	<p>K.n. Wacław Woźnicki to młody, bardzo zdolny chemik kwantowy. Pracował pod kierownictwem doc. W. Kołosa. Mogę go bardzo gorąco polecić na stanowisko zastępcy profesora Fizyki Teoretycznej.</p> <p><i>L. Infeld</i> Leopold Infeld</p> <p>Dziekamat Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii w Toruniu Otrzymał dn. <u>23. IV. 58</u> Nr. <u>411-40-12/58 r.</u> Załączn.</p> <p><i>Vidi</i> Dziekamat</p> <p>CM Wp: 26 211 195</p>



Wiesław Woźnicki (1933–1995)

Studia fizyczne: 1949-1952 UŁ, 1952-1954 UW

Magisterium 1954: *Model swobodnego elektronu w teorii cząsteczek organicznych;*

Doktorat 1958: *Konfiguracja elektronowa i symetria cząsteczki acetylenu.*

Promotor - Leopold Infeld

Opiekun naukowy - Włodzimierz Kołos.

Po doktoracie zostaje adiunktem w Katedrze Fizyki Teoretycznej UMK.

1961 – roczny wyjazd do Quantum Chemistry Group w Uppsali.

Po powrocie przystępuje do tworzenia nieformalnej Grupy Chemii

Kwantowej. Pierwszym jego współpracownikiem jest **Karol Jankowski**.

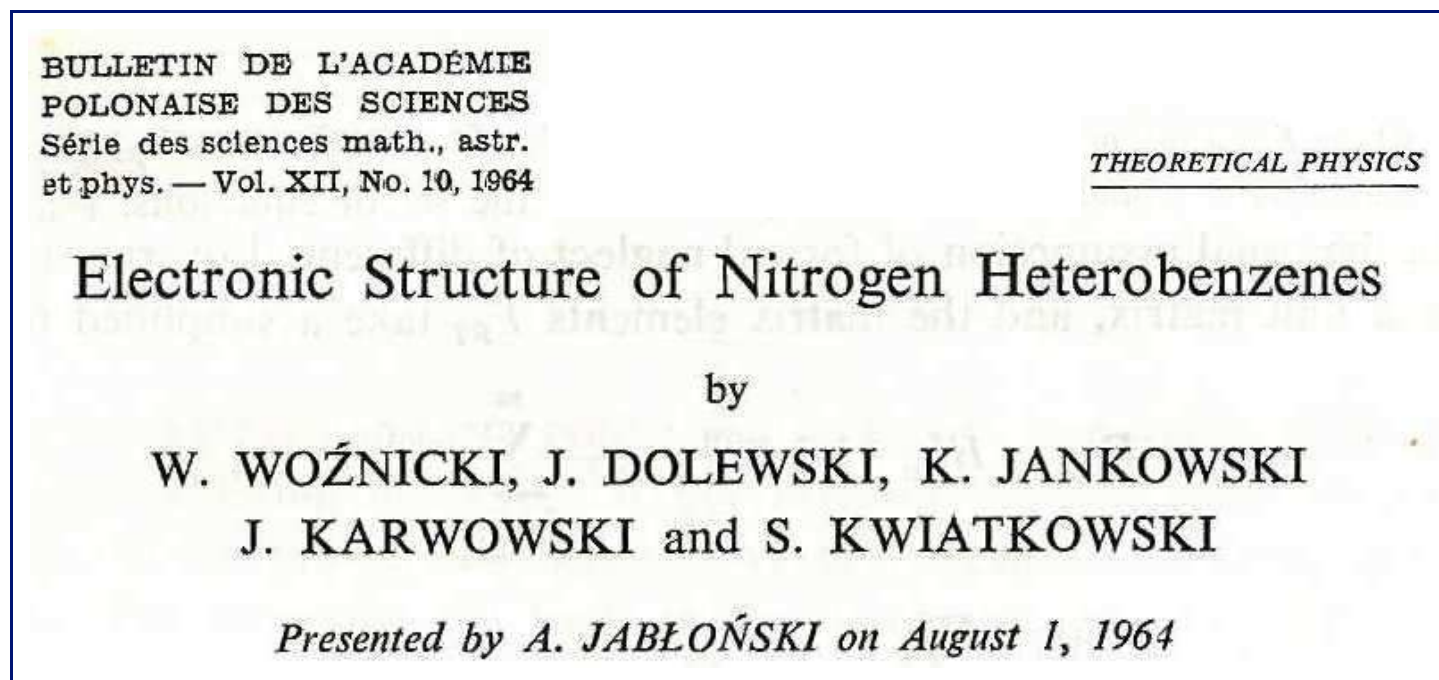
Później dołączają **Józef Stanisław Kwiatkowski**, **Jacek Karwowski**,

Jerzy Dolewski, a po roku **Jan Wasilewski**. Cotygodniowe seminaria

integrują Grupę i ułatwiają szybkie zdobywanie wiedzy.

WCZESNE PRACE GRUPY CHEMII KWANTOWEJ

Najwcześniejsze zainteresowania członków Grupy Chemii Kwantowej dotyczą struktury elektronowej organicznych cząsteczek π -elektronowych. Pierwsza publikacja:



Przez kolejnych kilka lat prace Grupy są nadal publikowane w mało znanych czasopismach i nawet istotnie nowe wyniki pozostają niezauważone.

CHARAKTERYSTYKA DOROBKU W. WOŹNICKIEGO

- Tematyka badań: *Metody półempiryczne chemii kwantowej oraz Metoda superpozycji skorelowanych konfiguracji.*
- Zdobywanie środków na działalność naukową Zespołu poprzez uczestniczenie w rozwiązywaniu zadań w ramach finansowanych centralnie projektów badawczych.
- Najczęściej cytowana praca (o dokładnych funkcjach falowych atomu litu z 1983; wspólna z J. Pipinem) ma 41 cytowań.
- Indeks Hirscha – 12

Aleksander Jabłoński: (...) *Największy nacisk położyłbym na jego osiągnięcia w dziedzinie kształcenia młodej kadry naukowej. Jeszcze przed uzyskaniem stopnia docenta opiekował się on pracami 2 doktorantów. Jedyne ze względów formalnych nie mógł być ich promotorem. { Józef Stanisław Kwiatkowski i Karol Jankowski, wypromowani przez A. Jabłońskiego, po 15 latach zostali profesorami. }*

Wiesław Woźnicki wypromował 12 doktorów:

Jacek Karwowski 1968	Daniela Papierowska 1980
Bronisław Żurawski 1969	Aleksandra Preiskorn 1980
Janina Muszyńska 1970	Danuta Jeziorek 1986
Jan Wasilewski 1971	Barbara Jaskólska 1989
Jan Budziński 1971	Mirosław Bylicki 1990
Janusz Pipin 1978	

Był: Kierownikiem Zakładu Fizyki Chemicznej
Kierownikiem Zakładu Mechaniki Kwantowej Atomów i Cząsteczek
Dziekanem Wydziału Matematyki, Fizyki i Chemii
Rektorem UMK

I ZJAZD CHEMII TEORETYCZNEJ KALATÓWKI 1965



A—Alojzy **Gołębiewski**, B—Kacper **Zalewski**, C—**Wiesław Woźnicki**,
 D—**Jacek Karwowski**, F— Włodzimierz **Kołos**, G—**Andrzej Witkowski**,
 H—**Jan Wasilewski**, I—**Krzysztof Pecul**, J—**Jozef Stanisław Kwiatkowski**,
 K—**Kazimierz Gumiński**, L—**Józef Hurwic**, M—**Bronisław Żurawski**,
 N—**Andrzej Sadlej**, O—**Jerzy Konarski**, P—**Lutosław Wolniewicz**,
 R—**Karol Jankowski**, S—**Henryk Chojnacki**.

[uczestnicy z Torunia stanowią 20%]



Karol Jankowski (1937)

Studia na UMK

fizyka 1957-61; matematyka 1958-62

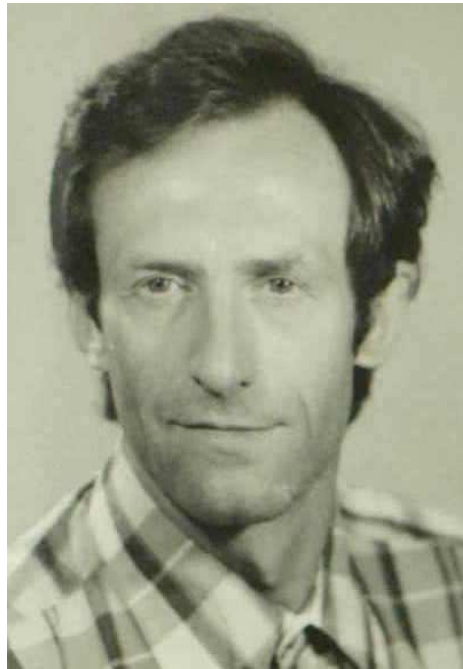
Doktorat 1966: *Efekty korelacyjne i relatywistyczne w ciężkich atomach*

Tematyka badań: rozwijanie metod opisu korelacji elektronowej w atomach i cząsteczkach

- Współpraca naukowa z najlepszymi ośrodkami chemii kwantowej: Madison, Waterloo, Karlsruhe, Göteborg, Vancouver.
- 4 prace mają ponad 100 cytowań. Najczęściej cytowana praca (o metodzie sprzężonych klasterów dla stanów kwazi-zdegenerowanych z roku 1980, wspólna z Josefem Paldusem) ma 267 cytowań.
- Indeks Hirscha – 27

Wypromowani doktorzy:

- Profesorowie:
Ireneusz Grabowski, Leszek Meissner, Marek Polasik,
Andrzej Rutkowski, Lidia Smentek;
- Doktor habilitowany: Piotr Malinowski;
- Karol Kowalski, Krzysztof Nowakowski, Krzysztof Rubiniec,
Danuta Rutkowska, Romuald Słupski, Aleksander Sokolowski,



Józef Stanisław Kwiatkowski (1936-2000)

Studia: fizyka 1955-1960;

Doktorat 1966: *Spektroskopia teoretyczna drobin organicznych*

Tematyka badań: Struktura elektronowa cząstek organicznych, biofizyka kwantowa.

- Współpraca naukowa:
Université Pierre et Marie Curie (Paryż), Quantum Theory Project (Floryda), Uniwersytet w Jackson (Missouri)
- 5 prac ma powyżej 100 cytowań. Najczęściej cytowana praca (o widmach cytozyny z roku 1988) ma 227 cytowań.
- Indeks Hirscha – 26



Jacek Karwowski (1940)

Studia: fizyka 1957-1962;

Doktorat 1968: *Przyporządkowanie symetrii stanom elektronowym benzenu*

Tematyka badań: Teoria układów wieloelektronowych, modele ściśle rozwiązywalne, statystyczna teoria widm.

- Współpraca naukowa: Uniwersytety w Edmonton, Bielefeld, Gironie, Valladolid, Montevideo, Nagoya, Hsinchu, Instytut Maxa Plancka w Monachium, Hiszpańska Akademia Nauk, IACS w Kalkucie
- Najczęściej cytowana praca: *Handbook of atomic data*, 1976, wspólna z Serafinem Fragą i K.M.S. Saxeną ma 934 cytowania.
- Indeks Hirscha – 24

Wypromowani doktorzy:

- Profesorowie:
Włodzisław Duch, Włodzimierz Jaskólski,
Mariusz Kłobukowski, Wiesław Nowak,
- Doktorzy habilitowani:
Dorota Bielińska-Waż, Jacek Kobus, Grzegorz Pestka,
Monika Stanke, Jacek Styszyński,
- Małgorzata Bancewicz, Mikołaj Szulkin



Jan Wasilewski (1942)

Studia: fizyka 1959-1964;

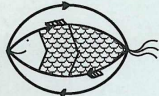
Doktorat 1971: *Struktura elektronowa jonowych i rodnikowych układów skoniugowanych*

Tematyka badań: Stany otwartopowłokowe dużych cząsteczek organicznych; struktura elektronowa rodników i jonów.

- Współpraca naukowa: Uniwersytet w Bochum
- 2 prace mają ponad 100 cytowań. Najczęściej cytowana praca (na temat metody sprzężonych klasterów z roku 1988, wspólna z K. Jankowskim i L. Meissnerem) ma 156 cytowań.
- Indeks Hirscha – 13
- Wypromowany doktor: Małgorzata Wierzbowska

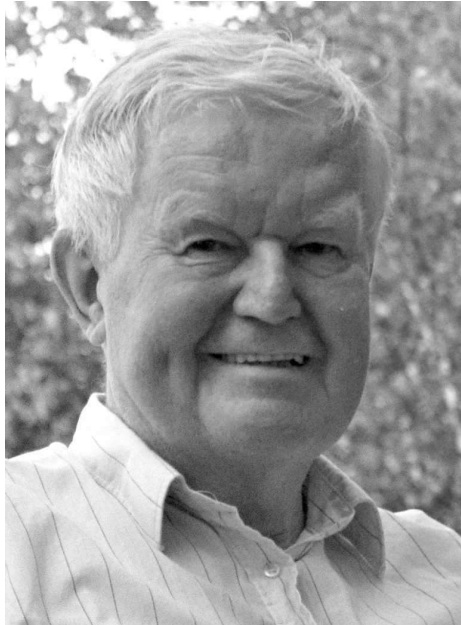
SZKOŁY CHEMII KWANTOWEJ W BACHOTKU

I - czerwiec 1976, II - wrzesień 1978, III - wrzesień 1982,
IV - Maj 1985, V - czerwiec 1987, VI - czerwiec 1989.

<p>FIFTH SCHOOL OF ADVANCED METHODS OF QUANTUM CHEMISTRY</p>  <p>BACHOTEK '87</p> <p>May 31 - June 5</p>	<p>Monday, June 1</p> <p>9:00 - 9:15 Opening of the School</p> <p>9:15 - 10:00 J. Paldus (Waterloo) <i>Lie Group Theoretical Aspects of the Many-Electron Correlation Problem (Part I)</i></p> <p>10:00 - 13:00 R. Ahlrichs (Karlsruhe) <i>Large Scale Calculations of Molecular Electronic Structure</i></p> <p>15:00 - 17:00 B. A. Hess, Jr. (Nashville) <i>Interaction of Theory with Experiment</i></p> <p>17:00 - 18:00 J. Sauer (Berlin) <i>Electron Correlation Contributions to Potential Surfaces of Intermolecular Complexes</i></p> <p>20:00 Informal Social Gathering</p>	<p>R. Ahlrichs, Karlsruhe</p> <p>J. Cizek, Waterloo</p> <p>C. Ewig, Nashville</p> <p>N. C. Handy, Cambridge</p> <p>W. Kutzelnigg, Bochum</p> <p>L. N. Labzowsky, Leningrad</p> <p>I. Lindgren, Göteborg</p> <p>J.-P. Malrieu, Toulouse</p>
	<p>Tuesday, June 2</p> <p>9:00 - 10:00 J. Paldus (Waterloo) <i>Lie Group Theoretical Aspects of the Many-Electron Correlation Problem (Part II)</i></p> <p>10:00 - 13:00 Z. Rudzikas (Vilnius) <i>Modern Aspects of the Theory of Many-Electron Atoms and Ions.</i></p> <p>15:00 - 17:00 R. Carbo (Gerona) <i>Artificial Intelligence Methods and Quantum Chemistry</i></p> <p>17:00 - 18:00 Poster Session</p>	<p>D. Mukherjee, Calcutta</p> <p>C. Nicolaidis, Athens</p> <p>R. Zahradnik, Prague</p> <p>L. Zúlicke, Berlin</p> <p>Hosted by: Institute of Physics Nicholas Copernicus University ul. Grudziądzka 5/7 87-100 Toruń</p>
<p>Organizing Committee:</p> <p>Karol Jankowski, Chairman Jacek Karwowski Piotr Malinowski Lidia Smentek-Mielczarek Jan Wasilewski Wiesław Woźnicki</p>		



A—Joachim **Sauer**, B—Nicholas **Handy**, C—Bogumił **Jeziorski**,
D—Jean-Paul **Malrieu**, E—Ingvar **Lindgren**
F—Grzegorz **Chałasiński**, G—Lucjan **Piela**,
H—Jacek **Styszyński**, J—Angela **Merkel**, K—Ewa **Broclawik**,
L—Karol **Kowalski**, M—Mirek **Bylicki**, N—Karol **Jankowski**,



Brian Garner Wybourne (1935-2003)

Profesor Uniwersytetów Canterbury w Christchurch, Nowa Zelandia, (do 1991) i Mikołaja Kopernika w Toruniu (od 1991)

Tematyka badań: Teoria atomów d- i f-elektronowych, zastosowania teorii grup w fizyce, matematyczne metody fizyki, teoretyczna spektroskopia atomowa.

- Współpraca naukowa: Uniwersytety John Hopkins, Argonne, Southampton, Christchurch, Windsor, Wilno, Petersburg,
- 9 prac ma więcej niż 100 cytowań, a najczęściej cytowana monografia o własnościach spektroskopowych atomów ziem rzadkich z roku 1965 była cytowana 2074 razy.
- Indeks Hirscha – 27

CYTOWANIA

L. Wolniewicz	~ 7300
B. Wybourne	

K. Jankowski	~ 2500
J. Karwowski	
J.S. Kwiatkowski	

J. Wasilewski	~ 700
W. Woźnicki	

Portrety sędziwych uczonych mylą - wtedy gdy dokonywali swoich odkryć, byli młodymi ludźmi.

Jeżeli młody naukowiec nie buntuje się przeciwko swojemu mistrzowi, to znaczy, że nie dorósł do tego, by stać się samodzielnym badaczem.

Maciej Władysław Grabski (1934-2016) *'O nauce w Polsce - zamyślenie'*
{Maciej Żylicz, Pauza Akademicka No. 328 (18 lutego 2016)}