

### **Modelowanie, wybór i budowa modelu procesu.**

Modelowanie służy do poznania danego procesu, po przez zastąpienie go uproszczonym układem, który odzwierciedla jedynie wybrane cechy procesu. Analizę informacji przeprowadza się dwustopniowo:

- 1) model porównuje się z rzeczywistym zjawiskiem i uważa się, że jest on dobry jeżeli otrzymane różnice są niewielkie
- 2) sprawdzamy czy model spełnia nasze oczekiwania.

Proces modelowania sprowadza się do wyznaczenia zależności matematycznej między wielkościami wyjściowymi i wejściowymi:

$$y = f(x, z, u)$$

y - wielkości wyjściowe badanego systemu

x, z, u - wielkości wejściowe

Procesy proste, np. hydrauliczne lub cieplne z jednofazowym strumieniem, można modelować fizycznie. Procesy skomplikowane można modelować jedynie matematycznie. Modelowanie matematyczne jest znacznie tańsze od fizycznego, niezależnie od tego czy porównuje się czas czy koszty realizacji badań.

### **Modelowanie matematyczne.**

Wykorzystuje elektroniczną technikę obliczeniową. Metoda ta jest stosowana do badania własności procesów mających opis matematyczny. Składa się z trzech etapów:

- uzyskanie formalnego opisu badanego procesu: wyznaczenie modelu matematycznego
- ustalenie algorytmu wyznaczenia wartości liczbowych szukanych parametrów
- sprawdzenie zgodności modelu z procesem

Podczas wyznaczania modelu matematycznego rzeczywiste zjawisko jest upraszczane i przedstawiane w postaci schematycznej. W modelu powinny być uwzględnione jedynie najważniejsze elementy wpływające na proces. Opis matematyczny modelu przedstawia się w postaci układu równań algebraicznych lub różniczkowych. Model o parametrach złożonych to model opisujący procesy, w których zmienne zmieniają się zarówno w czasie i w przestrzeni lub jeśli zmiany zachodzą tylko w przestrzeni ale więcej niż jednowymiarowej. Model o parametrach skupionych: podstawowe zmienne procesu nie zmieniają się w przestrzeni. Model statyczny: opisuje proces w stanie ustalonym (nie uwzględnia zmian wielkości w czasie). Model dynamiczny: opisuje proces w stanie nieustalonym. Procesy niedeterministyczne można praktycznie modelować tylko matematycznie.

### **Maszyny matematyczne.**

Przy ich pomocy analizuje się modele matematyczne. Maszyny matematyczne mogą realizować trzy funkcje: obliczenia, modelowanie procesu, sterowanie procesem. Mamy dwa rodzaje maszyn matematycznych: o działaniu ciągłym (analogowe) i o działaniu dyskretnym (cyfrowe). Maszyny analogowe wykorzystują analogię opisu matematycznego różnych zjawisk. Różne procesy są opisane jednakowymi równaniami matematycznymi. Np. dyfuzję można wyrazić przy pomocy równań opisujących przepływ prądu, wyniki z maszyny analogowej (zasilanej prądem) będą takie same jak z reaktora rzeczywistego.

### **Modelowanie fizyczne.**

Badanie danego zjawiska na nim samym po przez odtwarzanie go w różnych skalach i badanie wpływu cech fizycznych oraz rozmiarów aparatu. Doświadczenie jest prowadzone bezpośrednio na badanym procesie fizycznym. Modelowanie fizyczne sprowadza się do zachowania stałości kryteriów podobieństwa określających model i obiekt. Proces odtwarza się w kilku etapach przechodząc stopniowo do co raz większej skali zmieniając odpowiednio wymiary liniowe. Metoda ta nadaje się jedynie do prostych systemów. Modelowanie matematyczne jest znacznie tańsze od fizycznego, niezależnie od tego czy porównuje się czas czy koszty realizacji badań. Zasada podobieństwa nadaje się do procesów deterministycznych, dających się opisać prawami mechaniki klasycznej i przebiegających w układach jednofazowych z ustalonymi granicami.

### **Energia w reakcjach.**

(dlaczego wodór tworzy układy dwuatomowe a nie trzy atomowe)

Dwa atomy tworzą cząsteczkę dlatego, że ich zbliżeniu towarzyszy obniżenie energii całkowitej układu. Pewne układy atomów mogą powstać a inne nie ponieważ pewnym ich układom towarzyszy obniżenie energii a innym podwyższenie energii. Cząsteczka powstaje gdy jej energia całkowita jest mniejsza od sumy

energii oddzielnych atomów wchodzących w jej skład. Energię cząsteczki możemy uważać za sumę energii elektronów (kinetyczną, oddziaływania wzajemnego, potencjalną w polu jąder), wzajemnych energii potencjalnych w polu jąder, oscylacyjnej, rotacyjnej, translacyjnej. Trzy ostatnie energie, stanowią zwykle bardzo mały ułamek energii całkowitej. W przybliżeniu energię całkowitą można przyjąć jako energię elektronową + energia kulombowskiego odpychania się jąder. E odpychania się jąder można włączyć do energii elektronowej i mówić o E całkowitej cząsteczki jako o E energii elektronowej gdy jądra są nieruchome.

### Mechanika kwantowa.

W mechanice kwantowej wielkości dynamiczne reprezentowane są przez operatory, np. składowe pędu cząstki  $p_x = -i \cdot \hbar \cdot \text{pochodna cząstkowa po } x$ . Całkowita energia jest zastąpiona przez operator Hamiltona. Wszystkie wartości liczbowe jakie można uzyskać dokonując pomiaru wielkości fizycznych, dane są przez wartości własne odpowiedniego operatora O. Wartości te to takie liczby rzeczywiste  $o_n$ , że dla każdej z nich istnieje ciągła, jednoznaczna i ograniczona funkcja  $f_n(w)$ , współrzędnej w spełniająca równanie  $O f_n(w) = o_n \cdot f_n(w)$

Funkcje  $f_n(w)$  nazywamy funkcjami własnymi operatora O i można ich używać do określenia stanu kwantowego układu. W szczególności funkcje operatora Hamiltona noszą nazwę funkcji falowych układu  $\Psi_n(w,t)$  funkcje falowe spełniają równanie Schroedingera, które jest równaniem ruchu cząstki w mechanice kwantowej.

### Nabla, Dywergencja, Laplasjan.

Nabla.

$$\vec{\nabla} = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Dywergencja.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \left( \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \right)$$

Laplasjan,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \nabla^2 = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

### Hamiltonian.

Operator Hamiltona to operator całkowitej energii układu, jest on sumą operatorów energii kinetycznej wszystkich cząstek i operatorów energii potencjalnej oddziaływania pomiędzy wszystkimi cząstkami.

### Postać równania falowego.

1- równanie musi być zgodne z postulatami de Broglie'a i Einsteina ( $\lambda=h/p$  i  $E=hv$ )

2- równie musi być zgodne z równaniem:  $E=p^2/(2m) + V(x,t)$  (energia całkowita = energia kinetyczna + energia potencjalna), (p - pęd cząstki, m - masa cząstki).

3- równanie musi być liniowe względem  $\Psi(x,t)$ , oznacza to, że jeżeli dwie różne funkcje  $\Psi$  są rozwiązaniami równani falowego to rozwiązaniem jest również kombinacja liniowa poprzednich dwóch rozwiązań (suma pierwszych potęg otrzymanych funkcji  $\Psi$  pomnożonych przez dowolne stałe).

3- energia potencjalna w ogólności zależy od x i t, choć jest możliwy przypadek cząstki swobodnej, wtedy V jest stała, więc pęd jest stały i energia całkowita jest stała, mamy więc cząstkę o stałych wartościach długości fali i częstotliwości, równanie falowe musi mieć więc rozwiązanie w postaci fali sinusoidalnej o stałej długości fali i częstotliwości.

### Równanie Schroedingera.

Równanie Schroedingera opisuje poruszanie się cząstek w przestrzeni traktowanych jako fale. Rozwiązaniem tego równania jest funkcja opisująca rozchodzenie się fali - funkcja falowa. Funkcja falowa jest funkcją zespoloną, zawiera ona liczbę urojoną  $i = \sqrt{-1}$ . Musi tak być ponieważ funkcje, które nie są zespolone są rozwiązaniami równań nie spełniających poprzednich 4 postulatów. Czynniki urojone i wyraża związek pomiędzy pierwszą pochodną czasową i drugą pochodną przestrzenną co z kolei wynika ze związku między pierwszą potęgą energii i drugą potęgą pędu. W mechanice kwantowej funkcja opisująca rozchodzenie się fali (poruszanie się materii) jest więc zespolona, składa się z części urojonej i rzeczywistej. W mechanice klasycznej funkcje opisujące fale nie są zespolone (np. funkcja opisująca drganie struny lub rozchodzenie się dźwięku), zawierają jedynie część rzeczywistą, nie zawierają stałej  $i$  i ponieważ opisują one związek pomiędzy drugą pochodną czasową i drugą pochodną przestrzenną:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

$u$  - prędkość rozchodzenia się fali

[pochodna = szybkość zmian czegoś (wielkość przyrostów czegoś) wraz ze zmianą czegoś innego, np. szybkość zmian drogi w czasie czyli ilość przebytej drogi w czasie to pochodna drogi po czasie  $v = ds/dt$ ].

Chcąc otrzymać równanie Schroedingera z klasycznego równania na energię należy:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$$

$$p^2 \leftrightarrow -\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2$$

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$i^2 = -1$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \mathfrak{H}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathfrak{H} \Psi$$

### Przybliżenie Borna-Oppenheimera.

(Separacja ruchów jąder i elektronów)

Jądra atomów są wielokrotnie cięższe od elektronów, w wyniku tego poruszają się z dużo mniejszymi prędkościami. W pierwszym przybliżeniu można więc zaniedbać ruchy jąder. Jądra traktujemy jako nieruchome, w hamiltonianie zaniedbujemy operator energii kinetycznej jąder  $T(R)$ . Pozostałe operatory definiują tzw. hamiltonian elektronowy. Przybliżenie zakłada, że ruch jąder jest scharakteryzowany energią potencjalną elektronów zależną od ustalonych położeń jąder. Rozwiązaniem w tym przybliżeniu jest elektronowa funkcja falowa dla ustalonych położeń jąder. Np. dla cząsteczki dwuatomowej energia elektronowa jest funkcją odległości między jądrami. Energia ta jest energią potencjalną dla ruchu jąder. Przybliżenie to zawodzi gdy energie dwóch stanów elektronowych są bardzo bliskie lub identyczne.

### Przybliżenie orbitalne.

Przybliżenie B-O daje rozwiązania jedynie dla małych molekuł. Dla cząstek większych należy wprowadzić

dalsze przybliżenia. Przybliżeniem takim jest wprowadzenie w układzie wieloelektronowym pojęcia funkcji jednoelektronowej. Wartość tej funkcji zależy od współrzędnych przestrzennych i zmiennych spinowych pojedynczego elektronu. Funkcja ta jest zwana spinorbitem. Każdemu elektronowi w układzie wieloelektronowym przypisujemy funkcję falową zwaną spinorbitem. Jeżeli w układzie pominiemy oddziaływania magnetyczne to spinorbital będzie iloczynem funkcji położenia elektronu w przestrzeni i jednej z dwóch możliwych funkcji spinowych. Całkowitą funkcję wieloelektronową przedstawiamy jako wyznacznik Slatera, który jest zbudowany ze spinorbitali przypisanych poszczególnym elektronom. Idea funkcji wieloelektronowej zbudowanej ze spinorbitali polega na tym, że śledzimy ruch jednego elektronu w polu pozostałych elektronów. Jego ruch opisujemy spinorbitem czyli funkcją zależną wyłącznie od współrzędnych tego elektronu. Z każdym elektronem robimy to samo.

### **Metoda Hartree-Focka.**

Układy molekularne możemy podzielić na dwa rodzaje: stany zamkniętopowłokowe i otwartopowłokowe. Układ w wieloelektronowym stanie zamkniętopowłokowym ma parzystą liczbę elektronów, przy czym każdy orbital jest obsadzony dwoma elektronami o różnych funkcjach spinowych, czyli każdemu orbitalowi przypisujemy dwa spinorbitale. Funkcja falowa zapisana jako wyznacznik Slatera będzie skonstruowana z  $2n$  spinorbitali lub  $n$  orbitali z różnymi funkcjami spinowymi. Stan układu  $2n$  elektronowego o wypadkowym spinie zero można zapisać jako pojedynczy wyznacznik Slatera zbudowany z orbitali. Warunkiem jest aby wyznacznik ten nie zmieniał postaci w zależności od wybranego w przestrzeni układu współrzędnych.

### **Zakaz Pauliego, funkcja falowa a spinorbitale.**

Zgodnie z zakazem Pauliego każdy spinorbital może opisywać tylko jeden elektron. Możemy wyróżnić część przestrzenną-funkcję  $\psi$  -spinorbitalu przyjmując, że ogólnie może ona być różna dla różnych funkcji spinowych. Jednak w stanie zamkniętopowłokowym ( $S=0$ ) można przyjąć, że część przestrzenna spinorbitali jest identyczna dla obu funkcji spinowych. Prowadzi to do przybliżenia, że w zamkniętopowłokowym stanie wieloelektronowym każdy orbital jest obsadzony dwoma elektronami o różnych funkcjach spinowych, czyli każdemu orbitalowi  $\psi$ -i przypisujemy dwa spinorbitale  $\psi$ -i.

### **Całkowita energia stanu zamkniętopowłokowego w przybliżeniu orbitalnym.**

W metodzie Hartree Focka występujące w wyznaczniku Slatera spinorbitale należy zoptymalizować. Metodą wariacyjną należy znaleźć taką ich postać aby energia elektronowa miała minimalną wartość. Należy znaleźć ekstremum funkcji spinorbitalu. Aby tego dokonać dzielimy hamiltonian elektronowy molekuly na dwie części. Na część jednoelektronową i dwuelektronową. Wprowadzamy hamiltonian, który jest sumą hamiltonianów jednoelektronowych odpowiadających energii kinetycznej i energii potencjalnej elektronów w polu nieruchomych jąder o pewnych ładunkach. Jednoelektronowe elementy tego hamiltonianu opisują energię kinetyczną i potencjalną jednego elektronu opisywanego przez pewien spinorbital w polu nieruchomych jąder. Drugi wprowadzony do równania operator opisuje energię potencjalną oddziaływań między pozostałymi elektronami. Po scałkowaniu po wszystkich współrzędnych elektronów otrzymujemy równanie zawierające całkę kulombowską (odpychania kulombowskiego). Całki te opisują energie oddziaływania danego elektronu (o prawdopodobieństwie występowania w danej części przestrzeni równemu kwadratowi modułu amplitudy (funkcji falowej)) z innym elektronem i tzw. całkę wymiany. Całki wymiany obniżają energię oddziaływania pomiędzy znajdującymi się na różnych orbitalach  $\psi$ -i i  $\psi$ -j elektronami o jednakowych funkcjach spinowych, ponieważ wchodzi do wyrażenia na energię ze znakiem ujemnym. Jest to częściowe uwzględnienie korelacji pomiędzy elektronami o jednakowych funkcjach spinowych.

Mając wyrażenie na energię molekuly możemy wyznaczyć optymalne orbitale  $\psi$ . Posługując się metodą wariacyjną szukamy takich orbitali  $\psi$ -i ( $i=1,2,\dots,n$ ) dla których jakakolwiek zmiana postaci ( $\psi$ -i + przyrost  $\psi$ -i) nie prowadzi do mniejszej energii. Wtedy energia obliczona przy pomocy orbitali  $\psi$ -i będzie miała wartość minimalną. Energia wariacyjna będzie mieć ekstremum w zbiorze funkcji  $\psi$ -i gdy dla dowolnych przyrostów  $\psi$ -i znika pierwsza wariacja (dana funkcja ma ekstremum gdy w danym punkcie znika jej pierwsza pochodna). W wyniku otrzymujemy zbiór jednoelektronowych orbitali  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ . Zbudowany z nich wyznacznik Slatera daje najlepsze przybliżenie prawdziwej ogólnej funkcji falowej  $\psi$ .

Równanie z którego otrzymaliśmy wyżej wymienione jednoelektronowe orbitale  $\psi_1, \psi_2, \dots$  definiuje postać jednoelektronowego hamiltonianu efektywnego tzw. hamiltonianu Hartree-Focka, który jest identyczny dla wszystkich elektronów. Hamiltonian ten składa się z dwóch członów: operatora jednoelektronowego (odpowiada energii elektronu poruszającemu się w polu nieruchomych jąder) i członu opisującego energię potencjalną oddziaływania  $i$ -tego elektronu z innymi elektronami.

Całkowita energia w metodzie Hartree-Focka nie jest równa sumie energii orbitalnych. Jest to spowodowane tym, że suma energii orbitalnych zawiera każde oddziaływanie elektron-elektron dwukrotnie. Wartość ta jest korygowana do rzeczywistej przez całkę wymiany.

W ten sposób wieloelektronowe równanie Shrodingera zostało sprowadzone do jednoelektronowego równania H-F. Jednak ścisłe rozwiązanie tego równania stanowi również problem, ponieważ szukane orbitale  $\psi_i$  zależą od hamiltonianu Hartree-Focka. Dlatego do rozwiązania równania H-F stosujemy metodę iteracyjną. Postępowanie iteracyjne uzgadnia postać operatora z postacią rozwiązania. Ta metoda rozwiązywania nosi nazwę metody pola samouzgodnionego.

### **Baza funkcyjna, metoda Hartree-Focka-Roothaana dla stanu zamkniętopowłokowego.**

Metoda ta pozwala na przybliżone rozwiązanie równań H-F. Polega ona na rozwinięciu szukanych orbitali  $\psi_i$  w szereg znanych funkcji  $\phi_i$ , które tworzą tzw. bazę. Gdy znajdziemy bazę to rozwiązanie równania H-F sprowadza się do znalezienia współczynników tego rozwinięcia. Otrzymane funkcje  $\psi_i$  mają konkretną postać analityczną a samo przybliżenie możemy nazwać przybliżeniem analitycznym. Zakładamy, że znamy praktycznie skończony układ funkcji  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$  stanu bazy. Teraz każdy orbital molekularny możemy przedstawić w postaci kombinacji liniowej funkcji bazy. Pozwala to zamienić różniczkowe równanie H-F na równania algebraiczne. Należałoby przyjąć nieskończoną bazę tworzącą tzw. układ zupełny. W rzeczywistości korzystamy jednak z baz skończonych. Wybór takiej funkcji bazy podyktowany jest względami praktycznymi. Funkcje bazy należy tak dobrać aby można było w prosty sposób obliczyć ich całki. Jednocześnie ważne jest aby wymiar bazy (liczba funkcji bazy w rozwinięciu) był niewielki.

Jeżeli molekula powstaje z atomów to można przyjąć, że orbitale molekularne (orbitale opisujące stan elektronów) powstają z orbitali opisujących elektrony w izolowanych atomach czyli z orbitali atomowych. Zgodnie z tym sensownie jest wybrać bazę w postaci skończonej liczby orbitali atomowych tworzących daną molekułę. Gdy tak zrobimy to liniowa kombinacja funkcji bazy (każdy orbital molekularny funkcji  $\psi_i$ ) jest po prostu liniową kombinacją orbitali atomowych. Metoda, w której przyjmuje się takie założenie nosi nazwę metody liniowych kombinacji orbitali atomowych.

W nieempirycznych obliczeniach dla molekuł najczęściej przyjmujemy jedną z dwóch funkcji stanu bazy. Baza atomowych orbitali typu Slatera STO lub baza atomowych orbitali typu Gaussa GTO.

### **Całki molekularne.**

Jeżeli zdefiniowaliśmy jakąś bazę rozwinięcia to należy obliczyć występujące w równaniu całki molekularne.

Całka molekularna w wyrażeniu podcałkowym zawiera operator jedno lub dwu elektronowy oraz orbitale atomowe. Jeżeli występujący operator jest operatorem jednoelektronowym to całka nazywa się jednoelektronową.

### **Różnica między mechaniką kwantową a klasyczną.**

Mechanika kwantowa dopuszcza możliwość przejścia cząstki przez barierę potencjału. Przejście to jest możliwe dzięki występowaniu pewnego prawdopodobieństwa znalezienia molekuly w pewnym stanie energetycznym lub w pewnym miejscu w przestrzeni. Prawdopodobieństwo to może być bardzo małe ale jednak istnieje. Przejście przez barierę potencjału nie zależy od wysokości bariery lecz od jej szerokości.

### **Modelowanie termodynamiczne.**

Na energię całkowitą cząstki składają się różne energie: rotacyjna, oscylacyjna, energie oddziaływań jądra-elektrony. Model Huckla, oddziaływania Huckla. W wyniku modelowania cząstki otrzymujemy

poszczególne energie a więc mamy całkowitą energię cząstki. Znając energię całkowitą oraz udział w niej poszczególnych energii składowych możemy obliczyć różne wielkości termodynamiczne. Np. pojemność cieplna to ilość energii jaką trzeba dostarczyć pewnej ilości substancji aby podnieść jej temperaturę o określoną wartość. Temperatura jest miarą energii kinetycznej cząstek (mają w nią wkład energie kinetyczne elementów cząstki). Pojemność cieplna jest więc powiązana z energią kinetyczną, której wartość możemy oszacować modelując daną molekułę.

### Model kosmo.

Rozkład gęstości elektronowej molekuly można przedstawić jako powierzchnię. Powierzchnię tą dzielimy na fragmenty, tak aby ich ilość nie była większa od gęstości elektronowej. Utworzone fragmenty traktujemy jako centra oddziaływania cząstki z otoczeniem, przy czym występujące siły są siłami van der Waalsa, a otoczenie znajduje się w odległości promienia Debay'a od cząstki. W modelu tym uwzględniamy właściwości otoczenia (przenikalność elektryczną), parametry do tego modelu pochodzą z eksperymentów (parametryzacja hamiltonianu), z tego można policzyć energię hydratacji, entalpię. Liczymy energię związku w jakimś stanie np. w gazie. Potem modelujemy tą samą cząsteczkę w innym stanie np. w cieczy (cząsteczka zostaje ustabilizowana w cieczy). Różnica policzonych energii jest energią procesu przejścia badanej cząsteczki ze stanu gazowego do cieczy.

### Wielkości termodynamiczne.

Bilans cieplny reaktora (wielkości termodynamiczne opisujące elementy składowe włączone do bilansu).

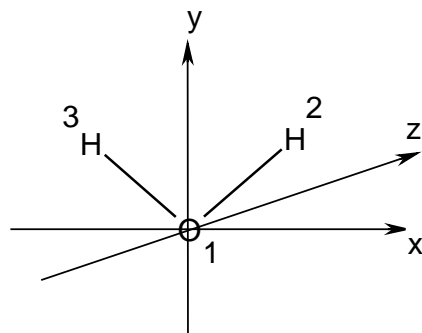
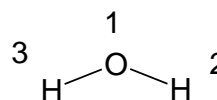
Opcja obliczeń termodynamicznych (TH) w programach do modelowania. Jak policzyć bilans cieplny danego reaktora mając jedynie reakcje (żadnych danych termodynamicznych). Musimy policzyć wielkości termodynamiczne strumienia reagentów. Robimy to modelując (licząc energię) cząstki wszystkich składników (każdy składnik oddzielnie). W ten sposób dokładnie określamy wielkości termodynamiczne reagentów, a w sumie strumienia. Gdy nie było modelowania komputerowego, stosowano empiryczne wzory na wielkości termodynamiczne. Np. pojemność cieplną można obliczyć:  $C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$ . Wzory tego typu dają mniej dokładne wartości niż nowe modelowanie. Ponad to stosujemy uproszczenia wykorzystując przybliżenia typu: jakiś podstawnik dołączony do pewnej cząstki zwiększy jej pojemność cieplną o tyle, a włączony do innej cząstki o tą samą wartość razy jakiś współczynnik (przelicznik).

### Liczeni wartości reagentów.

masa, moment dipolowy

### Wpisać współrzędne molekuly do MOPAC'a, w współrzędnych wewnętrznych lub kareziańskich.

	odleglosc od at. glownego	kat	kat dwuscienny
1. O	0	0	0
2. H	0,957A	0	0
3. H	0,957A	105,3'	0



	x	y	z
1. O	0	0	0
2. H	1	1	0
3. H	-1	1	0

