

## Tematy testów (zgodnie z numeracją w tabelach)

- **T01** - wxMaxima (nie ma poprawy).
- **T02** - Postulaty mechaniki kwantowej. Cząstka w pudle cz. 1: warunki brzegowe, funkcja falowa, energia.
- **T03** - Cząstka w pudle cz. 2: materiał uwzględniony w cz. 1 oraz wykresy funkcji falowych i ich kwadratów.
- **T04** - kwantowy oscylator harmoniczny: energia, dozwolone wartości liczby kwantowej, wykresy funkcji falowych i ich kwadratów.
- **T05** - kwantowy rotator sztywny cz. 1: energia, degeneracja poziomów energetycznych, dozwolone wartości liczb kwantowych, działanie operatorów  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$  na funkcje własne rotatora sztywnego.
- **T06** - kwantowy rotator sztywny cz. 2: materiał uwzględniony w cz. 1 oraz widmo rotatora sztywnego. Atom wodoru i jon wodoropodobny cz. 1: energia, dozwolone wartości liczb kwantowych, działanie operatorów  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$  na funkcje własne atomu wodoru / jonu wodoropodobnego.
- **T07** - atom wodoru i jon wodoropodobny cz. 2: materiał uwzględniony w cz. 1 oraz wykresy funkcji falowych i gęstości prawdopodobieństwa, radialna gęstość prawdopodobieństwa, przekroje konturów orbitali typu s, p i d.
- **T08** - Bazy funkcji Gaussa. Zasada wariacyjna. Metoda SCF. Metoda Hartree-Focka cz. 1: postać funkcji falowej, twierdzenie Koopmansa. Termy atomowe cz. 1: reguły Hunda.
- **T09** - Termy atomowe cz. 2: określanie termu i poziomu podstawowego dla dowolnej konfiguracji atomu lub jonu. Metoda Hartree-Focka cz. 2: materiał uwzględniony w cz. 1 oraz metody ROHF, UHF. Molekuły dwuatomowe homojądrowe: diagramy orbitali molekularnych, konfiguracje elektronowe, termy molekularne, rząd wiązania, symetria i kontury orbitali molekularnych.
- **T10** - Molekuły dwuatomowe homo- oraz heterojądrowe: zakres jak w T09.
- **T11** - Molekuły wieloatomowe: symetria orbitali molekularnych, konfiguracje elektronowe i termy molekularne cząsteczek należących do abelowych grup symetrii.
- **T12** - Przybliżenie Borna-Oppenheimera, krzywe energii potencjalnej dla cząsteczek dwuatomowych, energia drgań zerowych, energia dysocjacji.