

Podstawy chemii kwantowej – laboratorium
Tematy kartkówek

1. Proste modele chemii kwantowej: cząstka w pudle i oscylator harmoniczny
Liczby kwantowe, funkcje falowe, energie dla cząstki w pudle
Liczby kwantowe, energie dla oscylatora harmonicznego
Wykorzystanie modelu oscylatora harmonicznego do opisu drgań cząsteczek dwuatomowych
2. Proste modele chemii kwantowej: rotator sztywny
Liczby kwantowe, funkcje własne (harmoniki sferyczne), energie dla rotatora sztywnego
Wykorzystanie modelu rotatora sztywnego do opisu rotacji cząsteczek dwuatomowych
Wpływ podstawienia izotopowego na widmo oscylacyjne i rotacyjne
3. Atomy wieloelektronowe; metoda Hartree-Focka
Energia jonizacji atomów – definicja energii jonizacji, twierdzenie Koopmansa
Termy i poziomy podstawowe atomów wieloelektronowych
4. Cząsteczki dwuatomowe
Tworzenie orbitali molekularnych z orbitali atomowych; symetrie orbitali molekularnych ($\sigma/\pi, g/u$)
Składniki energii całkowitej dla cząsteczek dwuatomowych
Kolejność energetyczna orbitali molekularnych
Rząd wiązania
5. Optymalizacja geometrii
Warunek istnienia ekstremum na hiperpowierzchni energii potencjalnej i sposób określania charakteru tego ekstremum
Energia dysocjacji cząsteczki dwuatomowej