semestr zimowy, rok akademicki 2019/2020

Chemia teoretyczna – laboratorium
Tematy kartkówek

1. Proste modele chemii kwantowej: cząstka w pudle, 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, atom wodoru i jony wodoropodobne
   Liczby kwantowe, funkcje falowe, energie dla rotatora sztywnego
   Liczby kwantowe, funkcje falowe, energie, degeneracja energii dla atomu wodoru i jonów wodoropodobnych
   Wykorzystanie modelu rotatora sztywnego do opisu rotacji cząsteczek dwuatomowych
   Wpływ podstawienia izotopowego na widmo oscylacyjne i rotacyjne

3. Atomy wieloelektronowe; metoda Hartree-Focka
   Spin elektronu, antysymetria funkcji falowej dla układu wielu elektronów (fermionów), wyznacznik Slatera
   Interpretacja metody Hartree-Focka, sposób rozwiązywania równań metody Hartree-Focka
   Energia jonizacji atomów – definicja energii jonizacji, twierdzenie Koopmansa
   Całkowity spin i multipletowość układów wieloelektronowych

4. Atomy wieloelektronowe; metoda Hartree-Focka
   Energia jonizacji atomów – definicja energii jonizacji, twierdzenie Koopmansa
   Kontury orbitali atomowych
   Termy i poziomy podstawowe atomów wieloelektronowych, degeneracja

5. Cząsteczki dwuatomowe
   Tworzenie orbitali molekularnych z orbitali atomowych; symetrie orbitali molekularnych (σ/π, g/u)
   Składniki energii całkowitej dla cząsteczek dwuatomowych
   Kolejność energetyczna orbitali molekularnych
   Termy cząsteczek dwuatomowych, degeneracja

6. Cząsteczki dwuatomowe
   Kolejność energetyczna orbitali molekularnych
   Warunki tworzenia efektywnych kombinacji (wiążących/antywiążących) orbitali atomowych
   Rząd wiązania
   Energia dysocjacji cząsteczek dwuatomowych

7. Cząsteczki wieloatomowe
   Elementy symetrii cząsteczek wieloatomowych; rozpoznawanie symboli symetrii orbitali molekularnych
   Konfiguracje elektronowe i termy cząsteczek wieloatomowych
   Poziom HOMO/LUMO, termy stanów wzbudzonych

8. Cząsteczki wieloatomowe
   Konstrukcja orbitali symetrii dla cząsteczek wieloatomowych (reprezentacja Γ^{AO})
   Rotacje cząsteczek wieloatomowych – główne momenty bezwładności, klasyfikacja bąków, energie

9. Optymalizacja geometrii
   Sposób przeprowadzania obliczeń optymalizacji geometrii
   Drgania cząsteczek wieloatomowych – drgania normalne, liczba drgań normalnych
   Warunek istnienia ekstremum na hiperpowierzchni energii potencjalnej; określanie charakteru ekstremum

10. Optymalizacja geometrii; drgania cząsteczek wieloatomowych
    Określanie symetrii drgań cząsteczek wieloatomowych (reprezentacja Γ^{3N})
    Liczba drgań, widoczność drgań w spektroskopii w podczerwieni (IR) i ramanowskiej (R)
    Warunek istnienia ekstremum na hiperpowierzchni energii potencjalnej; określanie charakteru ekstremum

11. Przebieg reakcji chemicznych
    Charakter ekstremum dla reagentów i stanu przejściowego
    Energie barier i energia stabilizacji
    Drgania międzysystemowe
    Warunek istnienia ekstremum na hiperpowierzchni energii potencjalnej; określanie charakteru ekstremum