

# Podstawy chemii kwantowej

## Przykładowe zagadnienia na egzamin

wersja: 18 stycznia 2020

1. Na czym polega efekt fotoelektryczny? Jak liczba i energia kinetyczna wybitych elektronów zależy od natężenia padającego światła?
2. Na czym polega probabilistyczna interpretacja funkcji falowej?
3. Jakie matematyczne warunki powinna spełniać funkcja falowa, aby mogła ona opisywać istniejący fizycznie układ?
4. Jakie równanie spełnia funkcja falowa? Omów składniki tego równania. Podaj to równanie dla wybranych prostych przykładów (cząstka w pudle, oscylator harmoniczny, rotator sztywny, jon wodoropodobny, jon  $H_2^+$ ).
5. Jak wyjaśniamy kwantowanie poziomów energetycznych?
6. Na czym polega efekt tunelowy? Podać przykład praktycznego wykorzystania zjawiska tunelowania.
7. Cząstka w pudle, oscylator harmoniczny, rotator sztywny, jon wodoropodobny – wzory na energie własne, liczby kwantowe i ich związek z odpowiednimi operatorami, degeneracja poziomów energetycznych.
8. Typy funkcji falowych w jonie wodoropodobnym (kształty tych funkcji, energie – zależność od liczb kwantowych).
9. Zadania na ww. wzory i zależności, takie jak na pierwszych zajęciach laboratoryjnych, typu: jak wykorzystać dane spektroskopowe (np. różnice energii poziomów energetycznych widm rotacyjnych) do znalezienia parametrów geometrycznych cząsteczek dwuatomowych?
10. Spin elektronu.
11. Na czym polega przybliżenie jednoelektronowe? Jak wygląda funkcja falowa atomu helu w przybliżeniu jednoelektronowym? Dlaczego jest ona antysymetryczna ze względu na przestawienie współrzędnych elektronów?
12. Jak tworzymy spinorbital do opisu elektronu w metodzie Hartree-Focka?
13. Na czym polega optymalizacja spinorbitali w metodzie Hartree-Focka?
14. Co to jest powłoka i podpowłoka elektronowa w atomie wieloelektronowym? Ile elektronów może maksymalnie znajdować się na podpowłoce elektronowej o liczbie kwantowej  $l$ ? Wyjaśnić dlaczego.
15. Co to jest konfiguracja elektronowa atomu wieloelektronowego? Czy znajomość konfiguracji elektronowej wystarcza do jednoznacznego określenia energii atomu? Odpowiedź uzasadnić. Które z atomów w trzech pierwszych okresach są zamkniętopowłokowe?
16. Sformułować reguły Hunda. Zdefiniować wielkości  $L$ ,  $S$ ,  $J$ , które występują w regułach Hunda.
17. Co to jest multipletowość? Określić multipletowość stanów podstawowych wszystkich atomów w bloku  $p$  drugiego okresu.

18. Korzystając z reguły Hunda, wyznaczyć symbol termu stanu podstawowego (oraz najniższego poziomu tego termu) dla konfiguracji:  $p^1, p^2, p^3, p^4, p^5, d^1, d^2, d^3, d^4, d^5, d^6, d^7, d^8, d^9$ .
19. Klasyfikacja orbitali molekularnych dla cząsteczek dwuatomowych ze względu na symetrię (orbitale molekularne typu  $\sigma, \pi$ ; co oznaczają symbole  $g$  i  $u$ ).
20. Klasyfikacja orbitali molekularnych dla cząsteczek dwuatomowych homo- i heterojądrowych ze względu na energię. Na wybranym przykładzie przedstawić schemat tworzenia molekularnych orbitali wiążących i antywiązących.
21. Jak teoria orbitali molekularnych objaśnia trwałość cząsteczek dwuatomowych?
22. Czy teoria orbitali molekularnych przewiduje trwałość następujących cząsteczek dwuatomowych:  $H_2, He_2, Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2, O_2, F_2, Ne_2$ ?
23. Jakie własności magnetyczne (paramagnetyzm, diamagnetyzm) przewiduje teoria orbitali molekularnych w przypadku następujących cząsteczek dwuatomowych:  $H_2, He_2, Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2, O_2, F_2, Ne_2$ ?
24. Przewidzieć wzajemną relację między energiami dysocjacji i długościami wiązań cząsteczek w szeregu:  $O_2^{2-}, O_2^-, O_2, O_2^+$ .
25. Podać konfiguracje elektronowe dwuatomowych cząsteczek homojądrowych:  $H_2, He_2, Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2, O_2, F_2, Ne_2$ .
26. Podać warunki powstania efektu wiążącego i antywiązącego w wyniku utworzenia kombinacji liniowej orbitali atomowych. Które z orbitali atomu tlenu i atomu wodoru będą tworzyły efektywne orbitale molekularne w jonie  $OH^-$ . Odpowiedź uzasadnić.
27. Podać wzór na energię dysocjacji cząsteczki dwuatomowej. Zdefiniować wszystkie występujące we wzorze wielkości. Które z tych wielkości zależą od masy jąder? W jaki sposób? Możliwe zadanie typu: oszacuj efekt izotopowy (tzn. różnicę energii dysocjacji) dla  $HF$  i  $DF$ .
28. Na czym polega przybliżenie Borna-Oppenheimera? W jaki sposób przyjęcie przybliżenia Borna-Oppenheimera upraszcza obliczenia energii całkowitej cząsteczek?
29. Na czym polega przybliżenie harmoniczne przy rozwiązywaniu jądrowego równania Schrödingera dla cząsteczek?
30. Formy energii molekularnej: elektronowa, oscylacyjna, rotacyjna. Porównanie różnic między sąsiednimi poziomami energetycznymi dla poszczególnych form energii.
31. Wyrażenie na energię całkowitą cząsteczek dwuatomowych w przybliżeniu harmonicznym. Narysować schemat poziomów energetycznych cząsteczki dwuatomowej.
32. Co to jest hiperpowierzchnia energii potencjalnej? W jaki sposób określamy charakter ekstremów na hiperpowierzchni energii potencjalnej? Jaką interpretację fizyczną mają te ekstrema?
33. Ile różnych drgań mogą wykonywać cząsteczki wieloatomowe? Wyjaśnić, z czego wynika wzór na liczbę drgań.
34. Co to są drgania normalne cząsteczki wieloatomowej? Jak wyznaczamy drgania normalne? Narysować drgania normalne dla cząsteczki  $CO_2, H_2O$ .
35. Jak zdefiniowana jest energia korelacji elektronowej? Jaki znak ma energia korelacji? Odpowiedź uzasadnić.