

Chemia teoretyczna

Przykładowe zagadnienia na egzamin

wersja: 20 stycznia 2020

1. Na czym polega efekt fotoelektryczny? Jak liczba i energia kinetyczna wybijanych elektronów zależy od natężenia padającego światła?
2. Postulat de Broglie'a. Możliwe zadanie typu: oblicz długość fali de Broglie'a dla cząstki (tu podana masa) poruszającej się z prędkością v .
3. Na czym polega zasada nieoznaczoności Heisenberga?
4. Jakie matematyczne warunki powinna spełniać funkcja falowa, aby mogła ona opisywać istniejący fizycznie układ?
5. Jakie równanie spełnia funkcja falowa? Omów składniki tego równania. Podaj to równanie dla wybranych prostych przykładów (cząstka w pudle, jon wodoropodobny, jon H_2^+).
6. Na czym polega probabilistyczna interpretacja funkcji falowej?
7. Jak wyjaśniamy kwantowanie poziomów energetycznych?
8. Cząstka w pudle, oscylator harmoniczny, rotator sztywny, jon wodoropodobny – wzory na energie własne, liczby kwantowe i ich związek z odpowiednimi operatorami, degeneracja poziomów energetycznych.
9. Typy funkcji falowych w jonie wodoropodobnym (kształty tych funkcji, energie – zależność od liczb kwantowych).
10. Spin elektronu.
11. Jak tworzymy spinorbital do opisu elektronu w metodzie Hartree-Focka?
12. Na czym polega przybliżenie jednoelektronowe? Jak wygląda funkcja falowa atomu helu w przybliżeniu jednoelektronowym? Dlaczego jest ona antysymetryczna ze względu na przestawienie współrzędnych elektronów?
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. Możliwe zadanie typu: korzystając z reguł Hunda, wyznaczyć symbol termu stanu podstawowego (oraz najniższego poziomu tego termu) dla konfiguracji: s^1 , s^2 , p^1 , p^2 , p^3 , p^4 , p^5 , p^6 , d^1 , d^2 , d^3 , d^4 , d^5 , d^6 , d^7 , d^8 , d^9 , d^{10} .

19. Klasyfikacja orbitali molekularnych dla cząsteczek dwuatomowych ze względu na symetrię (orbitale molekularne typu σ , π ; 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. Możliwe zadanie typu: które z orbitali atomu tlenu i atomu wodoru będą tworzyły efektywne orbitale molekularne w jonie OH^- ; odpowiedź uzasadnić.
27. Elementy teorii grup punktowych. Możliwe zadania typu: a) do jakiej reprezentacji grupy punktowej D_{2h} należy orbital $\phi = N \cdot (2p_x(C1) + 2p_x(C2))$ etylenu; b) utwórz wszystkie możliwe orbitale symetrii dla cząsteczki etylenu z orbitali $2p_x(C1)$ i $2p_x(C2)$, gdzie $C1$ i $C2$ oznaczają atomy, na których są scentrowane orbitale atomowe. *Dokładny opis położenia osi układu współrzędnych oraz tabela z charakterami reprezentacji będą zapewnione. Cząsteczka i orbitale atomowe mogą się zmienić. Możliwe grupy to: C_{2v} , D_{2h} , C_s .*
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. 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.
33. Co to jest hiperpowierzchnia energii potencjalnej? W jaki sposób określamy charakter ekstremów na hiperpowierzchni energii potencjalnej? Jaką interpretację fizyczną mają te ekstrema?
34. Ile różnych drgań mogą wykonywać cząsteczki wieloatomowe? Wyjaśnić, z czego wynika wzór na liczbę drgań.

35. Co to są drgania normalne cząsteczki wieloatomowej? Jak wyznaczamy drgania normalne? Podać wzór na energię drgań zerowych dla cząsteczki wieloatomowej. Narysować drgania normalne dla cząsteczki CO₂, H₂O.
36. Rotacje cząsteczek wieloatomowych, typy bąków.
37. Jak zdefiniowana jest energia korelacji elektronowej? Jaki znak ma energia korelacji? Odpowiedź uzasadnić.
38. Wymień główne metody obliczania energii korelacji elektronowej.
39. Co to jest metoda CI (hierarchia przybliżeń, zalety i wady)?
40. Co to jest metoda CC (hierarchia przybliżeń, zalety i wady)?
41. Co to jest metoda DFT (na czym się opiera – twierdzenie Hohenberga-Kohna, równanie Kohna-Shama, zalety i wady, przykładowe przybliżone funkcjonały gęstości)?
42. Do czego służą bazy orbitalne?
43. Klasyfikacja baz orbitalnych.
44. Energia oddziaływania międzycząsteczkowego – definicja, metody obliczania (supermolekularna, perturbacyjna) oraz ich zalety i wady.
45. Podział energii oddziaływania międzycząsteczkowego, wynikający z rachunku zaburzeń. Interpretacja poszczególnych wkładów do energii.
46. Zachowanie asymptotyczne poszczególnych wkładów do energii oddziaływania z pktu 45. Możliwe pytanie typu: z jaką potęgą R^{-1} zanika oddziaływanie indukcyjne dla oddziaływania cząsteczki HF z cząsteczką CO₂; odpowiedź uzasadnij.