

**Tematy pytań na poprawkowym kolokwium
z Chemii Kwantowej A - laboratorium 20.02.2018**

Numer tematu	Tematy
1	Podstawy mechaniki kwantowej. Częstka w pudle: warunki brzegowe, funkcja falowa, energia, dozwolone wartości liczby kwantowej, wykresy funkcji falowych i ich kwadratów. Zastosowania modelu cząstki w pudle do widm cząsteczek π -elektronowych.
2	Jednowymiarowy oscylator harmoniczny: energia, dozwolone wartości liczby kwantowej, wykresy funkcji falowych i ich kwadratów.
3	Rotator sztywny: funkcje falowe, dozwolone wartości liczb kwantowych, wartości własne operatorów Hamiltona, kwadratu momentu pędu i składowej L_z momentu pędu, krotność degeneracji poziomów energetycznych.
4	Atom wodoru i jony wodoropodobne: energia, funkcje falowe (wykresy funkcji falowych, gęstości prawdopodobieństwa i radialnej gęstości prawdopodobieństwa), dozwolone wartości liczb kwantowych, krotność degeneracji poziomów energetycznych, przekroje konturów orbitali typu s , p i d , funkcje i wartości własne operatorów: Hamiltona, kwadratu momentu pędu i rzutu momentu pędu na wyróżnioną oś (z).
5	Metoda Hartree-Focka. Metoda SCF. Atom wieloelektronowy. Twierdzenie Koopmansa. Bazy funkcji Gaussa.
6	Termy atomowe. Sprzężenie L - S . Reguły Hunda. Określanie termu podstawowego i podstawowego poziomu energetycznego dla dowolnej konfiguracji atomu lub jonu. Wyznaczanie wszystkich termów i poziomów energetycznych dla dowolnej konfiguracji z dwoma nierównoważnymi elektronami na otwartych podpowłokach.
7	Diagramy orbitali molekularnych, konfiguracje elektronowe, symetria i kontury orbitali molekularnych dla cząsteczek i jonów dwuatomowych homo- i heterojądrowych.
8	Symetria orbitali molekularnych i konfiguracje elektronowe dla cząsteczek wieloatomowych, należących do abelowych (przemiennej) grup symetrii.
9	Przybliżenie Borna-Oppenheimera, krzywe energii potencjalnej dla cząsteczek dwuatomowych, poziomy oscylacyjne, energia dysocjacji.
10	Optymalizacja geometrii cząsteczki. Moment dipolowy cząsteczki. Drgania normalne. Znajdowanie i charakterystyka punktów stacjonarnych na hiperpowierzchni energii potencjalnej. Stan przejściowy; obliczanie bariery energetycznej dla reakcji chemicznej.