

**Tematy testów („wejściówek”) z Chemii Kwantowej A -laboratorium
dla grup 1, 2, 9 i 10
w semestrze zimowym r. ak. 2016/17**

Numer testu	Tematy
1	Polecenia programu Maxima (nie ma poprawy)
2	Podstawy mechaniki kwantowej. Cząstka w pudle, część I : warunki brzegowe, funkcja falowa, energia.
3	Cząstka w pudle część II: wykresy gęstości prawdopodobieństwa, zastosowania modelu cząstki w pudle dla cząsteczek π -elektronowych
4	Jednowymiarowy oscylator harmoniczny.
5	Rotator sztywny.
6	Atom wodoru i jony wodoropodobne: energia, funkcje falowe (wykresy funkcji falowych i gęstości prawdopodobieństwa, radialna gęstość prawdopodobieństwa, kontury), funkcje i wartości własne operatorów: Hamiltona, kwadratu momentu pędu, rzutu momentu pędu na wyróżnioną oś (z).
7	Metoda Hartree-Focka. Twierdzenie Koopmansa. Bazy funkcji Gaussa.
8	Termy atomowe. Diagramy orbitali molekularnych, konfiguracje elektronowe i symbole termów dla cząsteczek dwuatomowych.
9	Kontury orbitali molekularnych dla cząsteczek dwuatomowych. Symetria orbitali dla cząsteczek dwuatomowych i wieloatomowych.
10	Przybliżenie Borna-Oppenheimera, krzywe energii potencjalnej dla cząsteczek dwuatomowych, oscylacje jąder, energia dysocjacji. Optymalizacja geometrii cząsteczki. Moment dipolowy cząsteczki.
11	Optymalizacja geometrii cząsteczki - ciąg dalszy. Znajdowanie i charakterystyka punktów stacjonarnych na hiperpowierzchniach energii potencjalnej. Stan przejściowy; obliczanie bariery energetycznej dla reakcji chemicznej.