

**Tematy testów („wejściówek”) z Chemii Kwantowej A -laboratorium
dla grup 2, 6 i 7
w semestrze zimowym r. ak. 2017/18**

Numer testu	Tematy
1	Polecenia programu Maxima (nie ma poprawy)
2	Podstawy mechaniki kwantowej. Cząstka w pudle, część I : warunki brzegowe, funkcja falowa, energia, dozwolone wartości liczby kwantowej, wykresy funkcji falowych i ich kwadratów.
3	Cząstka w pudle, część II: zastosowania modelu cząstki w pudle do widm cząsteczek π -elektronowych. Wstępne wiadomości na temat jednowymiarowego oscylatora harmonicznego
4	Jednowymiarowy oscylator harmoniczny: energia, dozwolone wartości liczby kwantowej, wykresy funkcji falowych i ich kwadratów. Wstępne wiadomości na temat rotatora sztywnego.
5	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. Wstępne wiadomości na temat atomu wodoru i jonów wodoropodobnych.
6	Atom wodoru i jony wodoropodobne, część I : energia, funkcje falowe (wykresy funkcji falowych, gęstości prawdopodobieństwa i radialnej gęstości prawdopodobieństwa), dozwolone wartości liczb kwantowych, krotność degeneracji poziomów energetycznych.
7	Atom wodoru i jony wodoropodobne, część II : 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). Bazy funkcji Gaussa.
8	Metoda Hartree-Focka. Metoda SCF. Atom wieloelektronowy. Twierdzenie Koopmansa. Wstępne wiadomości na temat termów atomowych, reguły Hunda.
9	Termy atomowe. Sprzężenie L - S . 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. Diagramy orbitali molekularnych, konfiguracje elektronowe, symetria i kontury orbitali molekularnych dla cząsteczek i jonów dwuatomowych homojądrowych.
10	Diagramy orbitali molekularnych, konfiguracje elektronowe, symetria i kontury orbitali molekularnych dla cząsteczek i jonów dwuatomowych heterojądrowych. Symetria orbitali molekularnych i konfiguracje elektronowe dla cząsteczek wieloatomowych, należących do abelowych grup symetrii.
11	Przybliżenie Borna-Oppenheimera, krzywe energii potencjalnej dla cząsteczek dwuatomowych, poziomy oscylacyjne, energia dysocjacji. Optymalizacja geometrii cząsteczki. Drgania normalne.
12	Moment dipolowy cząsteczki. Optymalizacja geometrii cząsteczki - ciąg dalszy. Znajdowanie i charakterystyka punktów stacjonarnych na hiperpowierzchni energii potencjalnej. Stan przejściowy; obliczanie bariery energetycznej dla reakcji chemicznej. Wstępne wiadomości na temat metod teorii funkcjonału gęstości (DFT).