

Tematy testów („wejściówek”) z Chemii Kwantowej A -laboratorium
dla grup 1, 5, 6 i 7
w semestrze zimowym r. ak. 2018/19

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