

Chemia Kwantowa
III rok Chemii, 2022/23
Zagadnienia na egzamin ustny

1. Promieniowanie ciała doskonale czarnego – teoria klasyczna a hipoteza Plancka
2. Zjawisko fotoelektryczne – hipoteza Einsteina
3. Teoria atomu Bohra
4. Efekt rozpraszania promieniowania rentgenowskiego – wyjaśnienie Comptona
5. Dualizm korpuskularno-falowy materii
6. Zasada nieoznaczoności Heisenberga
7. Postulat o stanie układu kwantowego
8. Postulat o reprezentacji wielkości mechanicznych
9. Postulat o ewolucji w czasie stanu układu
10. Postulat o interpretacji wyników pomiarów w mikroświecie
11. Postulat o spinie w mechanice nierelatywistycznej
12. Postulat o symetrii funkcji falowej
13. Model cząstki swobodnej
14. Model cząstki w studni potencjału
15. Model zjawiska tunelowania przez barierę potencjału
16. Model oscylatora harmonicznego
17. Model rotatora sztywnego i swobodnego
18. Model dwóch cząstek oddziaływujących kulombowsko – atom wodoru
19. Metoda wariacyjna
20. Hamiltonian dla zadanego układu
21. Metoda Ritza
22. Rachunek zaburzeń
23. Wyznacznik Slatera
24. Metoda Hartree-Focka
25. Metoda SCF
26. Metoda Hartree-Focka-Roothana

27. Jednoelektronowe funkcje bazowe stosowane w metodzie Hartree-Focka
28. Jednoelektronowe bazy funkcyjne
29. Hierarchia funkcji występujących w metodzie Hartree-Focka
30. Przybliżenie jednoelektronowe
31. Przybliżenie adiabatyczne
32. Przybliżenie Borna-Oppenheimera
33. Radialne równanie Schrödingera
34. Probabilistyczna interpretacja kwadratu modułu funkcji falowej
35. Porządność funkcji falowej
36. Reguły tworzenia operatorów kwantowomechanicznych
37. Radialna gęstość prawdopodobieństwa
38. Zasada korespondencji
39. Degeneracja poziomów energetycznych
40. Powstawanie wiązania chemicznego
41. Warunki efektywności tworzenia orbitali molekularnych
42. Energia korelacji
43. Twierdzenie Koopmansa
44. Parametry krzywej energii potencjalnej cząsteczki dwuatomowej, energia drgań zerowych
45. Obliczanie częstości harmoniczných przejść oscylacyjnych, Hessian
46. Rozkład Boltzmanna, termodynamiczna funkcja rozdziału
47. Modelowanie reakcji chemicznej
48. Metoda oddziaływania konfiguracji
49. Metoda Møllera-Plesseta
50. Metoda sprzężonych klasterów
51. Metoda funkcyjnałów gęstości
52. Funkcje jawnie skorelowane
53. Warunek ostrza korelacyjnego