

Chemia kwantowa. Pytania egzaminacyjne. 2010/2011:

1. Przesłanki doświadczalne mechaniki kwantowej.
2. Efekt fotoelektryczny - interpretacja Einsteina.
3. Efekt fotoelektryczny: jak skorelowana jest liczba wybijanych elektronów i ich pęd z natężeniem i częstotścią padającego promieniowania.
4. Foton uwalnia elektron o energii 2 eV z metalu, dla którego praca wyjścia wynosi 2 eV. Jaka jest największa możliwa długość fali tego fotonu ?
5. Wskazać prawa zachowania, których spełnienie pozwala poprawnie zinterpretować zjawisko Comptona.
6. Czy foton posiada pęd - wyjaśnić w oparciu o zjawisko Comptona
7. Hipoteza de Broglie'a. Fala de Broglie'a. Relacje de Broglie'a.
8. Oblicz długość fali de Broglie'a dla elektronu ($m_e = 9.1110^{-31}kg$) o energii 10 eV.
9. Oblicz długość fali de Broglie'a dla protonu ($M_p = 1.6710^{-27}kg$) o energii 10 eV.
10. Oblicz przeciętną długość fali de Broglie'a dla atomu helu ($M=7300m_e$) w temperaturze pokojowej.
11. Zasada nieoznaczoności: podstawowe relacje i interpretacja.
12. Założenia teorii Bohra budowy atomu wodoru.
13. Teoria Bohra: energia, prędkość i pęd elektronu w atomie wodoru; promienie orbit elektronowych w jonach wodoropodobnych.
14. Widmo elektronowe atomu wodoru.
15. Serie widmowe atomu wodoru w nadfiolecie.
16. Serie widmowe atomu wodoru w zakresie widzialnym
17. Serie widmowe atomu wodoru w podczerwieni.
18. Określić wymiar SI [kg,m,s] następujących wielkości x:

$$x_1 = \frac{n^2 \hbar^2}{mke^2}; x_2 = \frac{Zke^2}{n\hbar}; x_3 = \frac{mZ^2k^2e^4}{n^2\hbar^2}$$

gdzie: n- główna liczba kwantowa; Z — liczba atomowa; \hbar — stała Plancka kreślona; m— masa elektronu; k—stała Coulomba; e— ładunek elektronu

19. Postulaty mechaniki kwantowej: ogólna charakterystyka.
20. Pierwszy postulat mechaniki kwantowej.
21. Drugi postulat mechaniki kwantowej.
22. Trzeci postulat mechaniki kwantowej.
23. Czwarty postulat mechaniki kwantowej.
24. Piąty postulat mechaniki kwantowej.
25. Normalizacja funkcji falowej, przykład.
26. Interpretacja funkcji falowej: prawdopodobieństwo i gęstość prawdopodobieństwa.
27. Reguły Jordana konstrukcji operatorów kwantowomechanicznych: przykład.
28. Własności operatorów kwantowomechanicznych: liniowość i hermitowskość.
29. Wykazać hermitowskość operatora $i\frac{d}{dx}$
30. Wykazać hermitowskość operatora $\frac{d^2}{dx^2}$
31. Podać przykład równania własnego dowolnego operatora; udowodnić, że występująca w równaniu funkcja jest funkcją własną operatora.
32. Wykazać, że wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste.
33. Wykazać, że funkcje własne operatora hermitowskiego odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne.
34. Obliczyć komutator $[\hat{p}_x, \hat{x}]$.
35. Równanie Schrödingera zależne od czasu. Zależność od czasu funkcji falowej w stanach stacjonarnych.
36. Równanie Schrödingera dla stanów stacjonarnych.
37. Z badać czy funkcja e^{-ar} jest funkcją własną operatora d/dr .
38. Znormalizować funkcje $\Psi = e^{-ar}$ w całej przestrzeni.
39. Równanie ruchu dla oscylatora harmonicznego wg fizyki klasycznej.
40. Funkcje opisujące położenie, prędkość cząstki w ruchu harmonicznym w ujęciu klasycznym.
41. Energia całkowita, kinetyczna i potencjalna oscylatora harmonicznego w ujęciu klasycznym.
42. Przeliczyć na elektronowolty oraz džule na mol energię drgań o częstotliwości 1000 cm^{-1} ($h = 6.6 * 10^{-34} \text{ Js}$, $e = 1.6 * 10^{-19}$)
43. Podać funkcję własną hamiltonianu dla $v = 0$ (z dokładnością do stałej normalizacyjnej); udowodnić, że spełnia równanie Schrödingera dla oscylatory harmonicznego.

44. Wykazać że funkcja $\Psi = \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ spełnia równanie:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} - \xi^2 \Psi + \frac{\lambda}{\alpha} \Psi = 0$$

dla $v=1$ ($\frac{\lambda}{\alpha} - 1 = 2v$)

45. Znaleźć trzy wielomiany Hermite'a: H_1, H_2, H_3 ($H_v(x) = (-1)^v e^{x^2} \frac{d^v}{dx^v} e^{-x^2}$)
46. Hamiltonian i równanie Schrödingera dla oscylatora harmonicznego.
47. Wartości własne hamiltonianu dla oscylatora harmonicznego.
48. Oscylacje cząsteczki dwuatomowej, poziomy energetyczne, reguły wyboru.
49. Moment pędu w fizyce klasycznej.
50. Długość i składowe wektora momentu pędu.
51. Współrzędne kartezjańskie i biegunowe.
52. Współrzędne kartezjańskie i sferyczne.
53. Operator momentu pędu: współrzędne kartezjańskie.
54. Operator składowej zetowej momentu pędu: współrzędne kartezjańskie i sferyczne.
55. Wykazać, że operator kwadratu momentu pędu jest przemienny z operatorem dowolnej składowej momentu pędu.
56. Reguły komutacji dotyczące operatorów składowych momentu pędu np. $[\hat{M}_x, \hat{M}_y]$
57. Równanie własne operatora składowej zetowej momentu pędu.
58. Równanie własne operatora kwadratu momentu pędu.
59. Wartości własne operatorów kwadratu i składowej zetowej momentu pędu
60. Funkcje własne operatora składowej zetowej momentu pędu.
61. Liczby kwantowe w zagadnieniu momentu pędu.
62. Rotator sztywny: hamiltonian, równanie Schrödingera, wartości własne, degeneracja.
63. Energia poziomów rotacyjnych; stała rotacyjna, przejścia rotacyjne.
64. Zaproponować wyznaczenie długości wiązania w cząsteczce dwuatomowej w oparciu o jej widmo rotacyjne.
65. Formy energii molekularnej: oscylacyjna, rotacyjna, translacyjna. Porównanie odległości między poziomami energetycznymi w poszczególnych formach.
66. Hamiltonian i równanie Schrödingera dla atomu wodoru; także zapis z wykorzystaniem masy zredukowanej.
67. Kwantowanie wartości własnych hamiltonianu w atomie wodoru; degeneracja, korelacja z teorią Bohra.

68. Wykazać, że hamiltonian \hat{H}

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 - \frac{kZe^2}{r}$$

jest przemienny z operatorem \hat{L}^2 .

69. Wykazać, że hamiltonian \hat{H}

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 - \frac{kZe^2}{r}$$

jest przemienny z operatorem \hat{L}_z .

70. Funkcje własne hamiltonianu dla atomu wodoru. Ogólna charakterystyka.

71. Część radialna funkcji falowej w jonach wodoropodobnych. $R_{nl}(r)$.

$$R_{nl}(r') = N'_{nl} r'^l e^{-\frac{r'}{2}} L_{n+1}^{2l+1}(r')$$

72. Liczby kwantowe w atomie wodoru i jonach wodoropodobnych.

73. Orbitale atomowe; postać rzeczywista.

74. Wskazać trzy liczby kwantowe związane z każdym z orbitali: $3s, 4p_z, 5d^2$.

75. Spośród orbitali: $1s, 2p_x, 3d_{z^2}, 4f_2, 5p_z, 5d_{-2}, 6d_{xy}$, wskazać te dla których nie można określić wszystkich trzech liczb kwantowych.

76. Warstwie orbitalu, warstwie gęstości prawdopodobieństwa.

77. Kontury orbitalu i kontury gęstości prawdopodobieństwa.

78. Powierzchnie węzłowe w części radialnej $R_{nl}(r') = N'_{nl} r'^l e^{-\frac{r'}{2}} L_{n+1}^{2l+1}(r')$ i w części kątowej orbitali w atomie wodoru.

79. Orbitale s: kształt konturu, część radialna $\left(R_{nl}(r') = N'_{nl} r'^l e^{-\frac{r'}{2}} L_{n+1}^{2l+1}(r') \right)$, część kątowa.

80. Orbitale p: kształt konturu, część radialna $\left(R_{nl}(r') = N'_{nl} r'^l e^{-\frac{r'}{2}} L_{n+1}^{2l+1}(r') \right)$, część kątowa.

81. Orbitale d: kształt konturu, część radialna, $\left(R_{nl}(r') = N'_{nl} r'^l e^{-\frac{r'}{2}} L_{n+1}^{2l+1}(r') \right)$, część kątowa.

82. Wykazać, że funkcje falowe $1s$ ($\Psi_{1s} = N_{1s} e^{-Zr}$) i $2s$ ($\Psi_{2s} = N_{2s} e^{-\frac{Zr}{2}} (2 - Zr)$) są ortogonalne. $\left(\int_0^\infty e^{-br} r^n dr = \frac{n!}{b^{n+1}} \right)$

83. Wykorzystując dokładną wartość energii atomu helu $E_{He} = -79.009$ oblicz potencjał jonizacji atomu helu.

84. Wyznacz energie dwóch najniższych stanów jonu He^+ w jednostkach atomowych i w elektronowoltach.

85. Oblicz średnią wartość energii kinetycznej elektronu w stanie podstawowym jonu wodoropodobnego $\left(\Psi_{1s} = \pi^{-\frac{1}{2}} Z^{\frac{3}{2}} e^{-Zr}; \int_0^\infty e^{-br} r^n dr = \frac{n!}{b^{n+1}}\right)$.
86. Oblicz średnią wartość energii potencjalnej elektronu w stanie podstawowym jonu wodoropodobnego $\left(\Psi_{1s} = \pi^{-\frac{1}{2}} Z^{\frac{3}{2}} e^{-Zr}; \int_0^\infty e^{-br} r^n dr = \frac{n!}{b^{n+1}}\right)$.
87. Oblicz średnią odległość od jądra elektronu w stanie opisanym funkcją $1s$ w jonie wodoropodobnym $\left(\Psi_{1s} = \pi^{-\frac{1}{2}} Z^{\frac{3}{2}} e^{-Zr}; \int_0^\infty e^{-br} r^n dr = \frac{n!}{b^{n+1}}\right)$.
88. Oblicz średnią odległość od jądra elektronu w stanie opisanym funkcją $2s$ w jonie wodoropodobnym $\left(\Psi_{2s} = (32\pi)^{-\frac{1}{2}} Z^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{2}} (2 - Zr); \int_0^\infty e^{-br} r^n dr = \frac{n!}{b^{n+1}}\right)$.
89. Zjawisko Zeemana.
90. Spin i spinowa liczba kwantowa; liczby kwantowe opisujące stan elektronu w atomie.
91. Układ równań własnych dla operatorów spinowych: \hat{s}^2 i \hat{s}_z .
92. Zapisać operator Hamiltona dla atomu N-elektronowego.
93. Omówić zakaz Pauliego.
94. Realizacja zakazu Pauliego dla wyznacznikowej funkcji falowej.
95. Zapisać N-elektrową funkcję falową w przybliżeniu orbitalnym.
96. Omówić przybliżenie jednoelektronowe.
97. Podać po dwa przykłady pierwiastków o niezapełnionej podpowłoce f należących do różnych okresów w tablicy Mendelejewa.
98. Podać wyrażenie określające maksymalną liczbę elektronów na podpowłoce o liczbie kwantowej l .
99. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji np^4 .
100. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji nd^8 .
101. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji nf^{13} .
102. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji np^2 .
103. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji nd^2 .
104. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji ns^1p^1 .
105. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji ns^1d^1 .
106. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji ns^1f^1 .
107. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji $2s^13s^1$.
108. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji $2p^13p^1$.
109. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji $3d^14d^1$.
110. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji p^3 .

111. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji d^4 .
112. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji d^5 .
113. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji d^6 .
114. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji d^7 .
115. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^5 .
116. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^6 .
117. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^7 .
118. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^8 .
119. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^9 .
120. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^{10} .
121. Reguły Hunda dla termów atomowych.
122. Zasady dodawania wektorów momentów pędu.
123. Przybliżenie Borna-Oppenheimera.
124. Skonstruować hamiltonian w ramach przybliżenia Borna-Oppenheimera dla cząsteczki składającej się z dwóch atomów o liczbach atomowych Z_1 i Z_2 .
125. Skonstruować hamiltonian w ramach przybliżenia Borna-Oppenheimera dla dwuatomowej cząsteczki homojądrowej.
126. Skonstruować pełny hamiltonian dla cząsteczki benzenu.
127. Skonstruować pełny hamiltonian dla jonu SO_4^{-2} .
128. Skonstruować pełny hamiltonian dla cząsteczki czterofluorku uranu.
129. Skonstruować pełny hamiltonian dla dimeru kwasu mrówkowego.
130. Skonstruować hamiltonian w ramach przybliżenia Borna-Oppenheimera dla kompleksu złożonego z trzech cząsteczek wody.
131. Cząsteczka H_2^+ i cząsteczka H_2 .
132. Znormalizować orbital molekularny $\Psi = N(\chi_a + \chi_b)$ przy założeniu, że funkcje $\chi_{a,b}$ są unormowane.
133. Znormalizować orbital molekularny $\Psi = N(\chi_a - \chi_b)$ przy założeniu, że funkcje $\chi_{a,b}$ są unormowane.
134. Wyznaczyć energię orbitalu wiążącego w cząsteczce wodoru.
135. Klasyfikacja orbitali molekularnych.
136. Scharakteryzować orbital molekularny typu σ .
137. Scharakteryzować orbital molekularny typu π .
138. Scharakteryzować orbital molekularny typu δ .

139. Orbitale wiążące i antywiązące.
140. metoda LCAOMO.
141. Cząsteczki dwuatomowe homojądrowe.
142. Poziomy energetyczne w cząsteczkach dwuatomowych homojądrowych.
143. Rząd wiązania w homojądrowych cząsteczkach dwuatomowych.
144. Trwałość cząsteczek dwuatomowych.
145. Konfiguracje elektronowe dwuatomowych cząsteczek homojądrowych.
146. Energie i długości wiązań w szeregu N_2 , N_2^+ , N_2^- .
147. Własności paramagnetyczne cząsteczek dwuatomowych homojądrowych.
-
148. Zasada wariacyjna.
149. Metoda wariacyjna.
150. Metoda Ritza
151. Skonstruować wyznacznik sekularny i zapisać równania sekularna gdy N (=wymiar bazy) wynosi 3. Wskazać calki nakładania i elementy macierzy operatora energii.
152. Macierzowa postać równań sekularnych; zdefiniować występujące w nich macierze.
153. Zróżniczkować po c_p^* następujące wyrażenie (ϵ = jest funkcją parametrów c_p)

$$\epsilon \sum_{q=1}^N \sum_{r=1}^N c_r^* c_q S_{rq} = \sum_{q=1}^N \sum_{r=1}^N c_r^* c_q H_{rq}$$