

Испитна питања – Квантна хемија. Школска 2017/18. Година.

1. База векторских простора. Својствена база.
2. Скаларни производ, норма, ОНБ, Грамове детерминанте, поступак ортонормирања.
3. Оператори и њихова матрична репрезентација.
4. Ермитски оператори. Својства. Опсервабле.
5. Стање квантног система. Кетови. Таласне функције.
6. Комутатори. Канонске комутационе релације.
7. Просторна репрезентација.
8. Комплементарне и компатибилне променљиве
9. Комплетан скуп комутирајућих оператора
10. Једначина својствених вредности
11. Постулати квантне механике који се односе на мерење.
12. Средња вредност мерења и дисперзија резултата.
13. Временска еволуција квантних система – Шредингера једначина. Стационарна стања.
14. Временска зависност средње вредности опсервабле. Константе кретања.
15. Угаони моменти – општи приступ. Матрична репрезентација.
16. Лествичастии оператори
17. Орбитни угаони моменти – примена.
18. Сферни хармоници: улога.
19. Спински угаони момент. Спински кв.број $\frac{1}{2}$: Својствена стања.
20. Атом водоника – К.С.К.О. и квантни бројеви.
21. Шта је орбитала. Основно стање атома водоника: вероватноћа налажења електрона. Радијална дистрибуциона функција.
22. Спин-орбитна спрега у атому водоника. Укупни угаони момент.
23. Линеарни хармонијски осцилатор: својствене функције и енергије. Дегенерација нивоа.
24. Линеарни хармонијски осцилатор: основно стање. Значај и примена.
25. Заједничка својствена стања хамилтонијана система идентичних честица и оператора измене.
26. Бозони и фермиони: симетрија таласних функција, густина измене, силе измене.
27. Системи неинтерагујућих идентичних честица. Хамилтонијан, својствена стања и енергије.
28. Слејтерове детерминанте. Паулијев принцип искључења.
29. Варијациона теорема. Доказ. Основа методе.
30. Линеарне варијационе функције (LCAO). Примена.
31. Пертурбациона теорија првог реда (енергија, таласне функције). Енергија другог реда.
32. Слагање два спинска угаона момента: стања атома хелијума.
33. Шредингера једначина за молекуле. Борн-Опенхајмерова апроксимација
34. Атомске јединице. Шредингера једначина у атомским јединицама.
35. Електронска Шредингера једначина и општи принципи њеног решавања.
36. Основе Хартри-Фокове методе: веза укупне енергије система и енергија орбитала.
37. Орбитале НОМО, LUMO. Енергија јонизације и афинитета према електрону.
38. Атомске базе у квантно-хемијским прорачунима.
39. Пост-Хартри-Фокове методе: метода интеракције конфигурација и спрегнутих кластера.
40. Основе методе функционала густине.
41. Симетријске групе и њихова репрезентација.
42. Правила за иредуцибилне репрезентације.
43. Таблица карактера групе: примена, важност
44. Улога симетрије и симетријских група у квантној хемији и спектроскопији.
45. Моменти прелаза и њихова величина применом теорије група.
46. Франк-Кондоново правило. Интеграли преклапања.