

Испитна питања (шк. година 2019/20):

Испитне цедуље садрже по два питања. Испитна питања за шк. 2019/20. годину се односе на све студенте који су уписали Квантну хемију у шк. 2019/20. години.

1. Средња вредност операбле у датом стању и дисперзија резултата мерења у квантној механици
2. Једначина својствених вредности. Својствене вредности и својствена стања: улога. Пример.
3. Шредингерова једначина: егзактно решавање, приближно решавање, значење, добијање израза за хамилтонијан.
4. Ротације двоатомских молекула – квантномеханички крути ротатор
5. Квантизација магнетних диполних момената
6. Орбитале код атома водоника: појам, графички приказ, физички смисао, енергија
7. Хибридизација код атома водоника
8. Енергија линеарног хармонијског осцилатора, дегенерација својствених вредности, растојање између нивоа, дозвољени електрични диполни прелази између нивоа.
9. Неинтерагујуће идентичне честице
10. Бозони, фермиони. Паулијев принцип искључења
11. Густина измене (идентичне честице): пример код две честице, када ће бити једнака нули?
12. Варијациона теорема
13. Линеаран варијациони проблем, LCAO.
14. Пертурбациона теорија првог реда (за недегенерисана стања)
15. Групе симетрије молекула: елементи, операције симетрије, класификација молекула према групи симетрије
16. Дефиниција групе, изоморфизам, хомоморфизам, класе.
17. Матрична репрезентација симетријских група. Редуцибилне и иредуцибилне репрезентације. Правила за иредуцибилне репрезентације.
18. Редукција редуцибилне на иредуцибилне репрезентације.
19. Карактери матрица у репрезентацији и таблица карактера групе.
20. Обележавање стања атома и молекула и величина момената прелаза применом теорије група
21. Примена симетрије при израчунавању матричних елемената хамилтонијана.
22. Шредингерова једначина за молекуле. Атомске јединице.
23. Борн-Опенхајмерова апроксимација: електронска и нуклеарна Шредингерова једначина
24. Борн-Опенхајмерова апроксимација: потенцијалне површи, равнотежна растојања.
25. Хартри-Фоков метод: средња енергија, Фокова једначина, RHF, UHF.
26. Примена ХФ методе: периодни систем елемената, Копмансова теорема.
27. Атомске орбитале као базис за LCAO. Хартри-Фоков лимит.
28. Енергија корелације и пост-Хартри-Фокове методе: метода интеракције конфигурација и метода спрегнутих кластера.
29. Хемијска веза код H_2^+ .
30. Локализоване молекулске орбитале и питање хемијске везе. Хибридизација у молекулским системима.