

# **Mechanika i chemia kwantowa z elementami spektroskopii molekularnej.**

## **Pytania na egzamin ustny.**

**Rok akademicki 2014/2015**

### **Część pierwsza.**

1. Fizyczne podstawy mechaniki kwantowej. Postulaty.
2. Równanie Schrödingera. Probabilistyczna interpretacja funkcji falowej. Ewolucja czasowa.
3. Analiza pomiaru w mechanice kwantowej. Zasada nieoznaczoności.
4. Prostokątna jama potencjału. Widmo dyskretne i ciągłe.
5. Jednowymiarowy oscylator harmoniczny.
6. Moment pędu.
7. Cząstka w polu centralnym. Atom wodoru.

### **Część druga.**

1. Przybliżenie Borna-Oppenheimera.
2. Przybliżenie jednoelektronowe i metoda Hartree-Focka.
3. Konfiguracje atomów i cząsteczek dwuatomowych.
4. *Termy atomowe i cząsteczkowe.*
5. Podstawy teorii wiązania chemicznego.
6. Korelacja elektronowa. Metody: CI i MP.
7. *Opis wzbudzonych stanów elektronowych.*
8. *Teoria grup punktowych w zastosowaniu do reguł wyboru w spektroskopii.*

*Elementy podane kursywą wchodzą do puli pytań jako pytania dodatkowe, tzn. a) dla osób celujących w lepszą ocenę niż 3+ oraz b) dla osób, które same zdecydują, że odpowiedzią na te pytania mogą się podciągnąć do oceny pozytywnej w przypadku problemów z odpowiedzią na wylosowane pytania z puli podstawowej.*