

Pytania egzaminacyjne:

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:

$$x_1 = \frac{n^2 \hbar^2}{m k e^2}; x_2 = \frac{Z k e^2}{n \hbar}; x_3 = \frac{m Z^2 k^2 e^4}{n^2 \hbar^2}$$

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. Wykazać, że komutujące operatory posiadają wspólny zbiór funkcji własnych.
36. Wykazać przemienność operatorów posiadających wspólny zbiór funkcji własnych.
37. Równanie Schrödingera zależne od czasu. Zależność od czasu funkcji falowej w stanach stacjonarnych.
38. Równanie Schrödingera dla stanów stacjonarnych.
39. Funkcja stanu, Ψ_k , jest funkcją własną operatora \hat{F} (z wartością własną f_k). Co można powiedzieć o wyniku pomiaru zmiennej F ?
40. Określić wartość oczekiwaną operatora \hat{F} w stanie Ψ_n jeżeli funkcja Ψ_n jest jego funkcją własną.
41. Funkcja Ψ może być rozwinięta na układ zupełny funkcji własnych operatora \hat{F} , ϕ_i . Wyrazić wartość spodziewaną operatora poprzez jego wartości własne.
42. Z badać czy funkcja e^{-ar} jest funkcją własną operatora d/dx .
43. Znormalizować funkcje $\Psi = e^{-ar}$ w całej przestrzeni.

44. Cząstka swobodna: operator energii, równanie Schrödingera, pęd cząstki.
45. Cząstka swobodna: funkcja falowa, normalizacja, wartości własne operatora energii.
46. Cząstka w pudle potencjału: hamiltonian, równanie Schrödingera, pęd cząstki.
47. Cząstka w pudle potencjału: funkcja falowa, normalizacja, wartości własne energii.
48. Kwantowanie energii kinetycznej atomów i cząsteczek w zbiorniku; poziomy energetyczne translacji.
49. Równanie ruchu dla oscylatora harmonicznego wg fizyki klasycznej.
50. Funkcje opisujące położenie, prędkość cząstki w ruchu harmonicznym w ujęciu klasycznym.
51. Energia całkowita, kinetyczna i potencjalna oscylatora harmonicznego w ujęciu klasycznym.
52. Przeliczyć na elektronowolty oraz dżule na mol energię drgań o częstości 1000 cm^{-1} ($h = 6.6 * 10^{-34} \text{ Js}$, $e = 1.6 * 10^{-19}$)
53. Podać funkcję własną hamiltonianu dla $v = 0$ (z dokładnością do stałej normalizacyjnej); udowodnić, że spełnia równanie Schrödingera dla oscylatory harmonicznego.

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

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

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

55. Znaleźć trzy wielomiany Hermite'a: H_1, H_2, H_3 ($H_v(x) = (-1)^v e^{x^2} \frac{d^v}{dx^v} e^{-x^2}$)
56. Hamiltonian i równanie Schrödingera dla oscylatora harmonicznego.
57. Wartości własne hamiltonianu dla oscylatora harmonicznego.
58. Funkcje własne hamiltonianu dla oscylatora harmonicznego.
59. Porównanie ruchu harmonicznego wg fizyki klasycznej i kwantowej.
60. Oscylacje cząsteczki dwuatomowej, poziomy energetyczne, reguły wyboru.
61. Moment pędu w fizyce klasycznej.
62. Operator momentu pędu: współrzędne kartezjańskie i sferyczne.
63. Wykazać, że operator kwadratu momentu pędu jest przemienny z operatorem dowolnej składowej momentu pędu.
64. Obliczyć komutator operatorów składowych momentu pędu np. $[\hat{M}_x, \hat{M}_y]$
65. Równanie własne operatora składowej zetowej momentu pędu.

66. Równanie własne operatora kwadratu momentu pędu.
67. Wartości własne operatorów kwadratu i składowej zetowej momentu pędu
68. Funkcje własne operatora składowej zetowej momentu pędu.
69. Funkcje własne i wartości własne kwadratu składowej zetowej momentu pędu.
70. Funkcje własne operatora kwadratu momentu pędu.
71. Liczby kwantowe w zagadnieniu momentu pędu.
72. Rotator sztywny: hamiltonian, równanie Schrödingera, wartości własne, degeneracja.
73. Energia poziomów rotacyjnych; stała rotacyjna, przejścia rotacyjne.
74. Widmo rotacyjne cząsteczek, poziomy energetyczne, reguły wyboru.
75. Zaproponować wyznaczenie długości wiązania w cząsteczce dwuatomowej w oparciu o jej widmo rotacyjne.
76. Formy energii molekularnej: oscylacyjna, rotacyjna, translacyjna. Porównanie odległości między poziomami energetycznymi w poszczególnych formach.
77. Hamiltonian i równanie Schrödingera dla atomu wodoru; związek hamiltonianu z operatorem kwadratu momentu pędu.
78. Ogólny schemat rozwiązywania równania Schrödingera dla atomu wodoru.
79. Kwantowanie wartości własnych hamiltonianu w atomie wodoru; degeneracja, korelacja z teorią Bohra.
80. Funkcje własne hamiltonianu dla atomu wodoru. Ogólna charakterystyka.
81. Część radialna funkcji falowej w jonach wodoropodobnych.
82. Część kątowna funkcji falowej w atomie wodoru.
83. Liczby kwantowe w atomie wodoru i jonach wodoropodobnych.
84. Orbitale atomowe; postać rzeczywista.
85. Warstwie orbitalu, warstwie gęstości prawdopodobieństwa.
86. Kontury orbitalu i kontury gęstości prawdopodobieństwa.
87. Radialna gęstość prawdopodobieństwa.
88. Promienie orbit bohrowskich a maksima radialnej gęstości prawdopodobieństwa w atomie wodoru.
89. Powierzchnie węzłowe w części radialnej i w części kątownej orbitali w atomie wodoru.
90. Orbitale s: kształt konturu, część radialna, część kątowna.
91. Orbitale p: kształt konturu, część radialna, część kątowna.

92. Orbitale d: kształt konturu, część radialna, część kątowna.
93. Spin i spinowa liczba kwantowa; liczby kwantowe opisujące stan elektronu w atomie.
94. Układ równań własnych dla operatorów spinowych: \hat{s}^2 i \hat{s}_z .
95. Zasada wariacyjna.
96. Metoda wariacyjna.
97. Metoda Ritza
98. Skonstruować wyznacznik sekularny i zapisać równania sekularne gdy N (=wymiar bazy) wynosi 3. Wskazać całki nakładania i elementy macierzy operatora energii.
99. Macierzowa postać równań sekularnych; zdefiniować występujące w nich macierze.
100. Zapisać operator Hamiltona dla atomu N-elektronowego.
101. Omówić zakaz Pauliego.
102. Realizacja zakazu Pauliego dla wyznacznikowej funkcji falowej.
103. Zapisać N-elektrową funkcję falową w przybliżeniu orbitalnym.
104. Omówić przybliżenie jednoelektronowe.
105. Zróżniczkować po c_p^* następujące wyrażenie (ϵ = jest funkcją parametrów c_p)

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

106. Podać po dwa przykłady pierwiastków o niezapełnionej podpowłoce f należących do różnych okresów w tablicy Mendelejewa.
107. Podać wyrażenie określające maksymalną liczbę elektronów na podpowłoce o liczbie kwantowej l.
108. Podać dwa przykłady pierwiastków zamkniętopowłokowych, z których każdy należy do innego stanu skupienia.
109. Podać przykład czterech pierwiastków, których konfiguracje elektronowe stanowią odstępstwo od reguł zabudowy elektronowej (przynajmniej jeden z niezapełnioną podpowłoką f).
110. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji np^4 .
111. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji nd^8 .
112. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji nf^{13} .
113. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji np^2 .

114. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji nd^2 .
115. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji ns^1p^1 .
116. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji ns^1d^1 .
117. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji ns^1f^1 .
118. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji $2s^13s^1$.
119. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji $2p^13p^1$.
120. Wyznaczyć termy atomowe i wskazać podstawowy dla konfiguracji $3d^14d^1$.
121. Podać przykład czterech pierwiastków, należących do różnych grup w układzie okresowym, których term podstawowy jest singletem .
122. Podać przykład czterech pierwiastków należących do różnych grup w układzie okresowym, których term podstawowy jest dubletem.
123. Podać przykład czterech pierwiastków należących do różnych grup w układzie okresowym, których term podstawowy jest trypletem.
124. Podać przykład czterech pierwiastków należących do różnych grup w układzie okresowym, których term podstawowy jest kwartetem.
125. Podać przykład dwóch pierwiastków należących do różnych grup w układzie okresowym, których term podstawowy jest kwintetem.
126. Podać przykład dwóch pierwiastków należących do różnych grup w układzie okresowym, których term podstawowy jest sekstetem.
127. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji p^3 .
128. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji d^4 .
129. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji d^5 .
130. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji d^6 .
131. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji d^7 .
132. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^5 .
133. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^6 .
134. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^7 .
135. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^8 .
136. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^9 .
137. Wskazać term podstawowy dla konfiguracji f^{10} .
138. Reguły Hunda dla termów atomowych.
139. Wyjaśnić istotę błędu wprowadzonego przez przybliżenie orbitalne.
140. Degeneracja poziomów energetycznych w atomach wieloelektronowych.

141. Zasady dodawania wektorów momentów pędu.
142. Część kątowna orbitali w atomie wieloelektronowym.
143. Przybliżone metody wyznaczania części radialnych orbitali w atomie wieloelektronowym.
144. Reguły Slatera.
145. Przybliżenie Borna-Oppenheimera.
146. Skonstruować hamiltonian w ramach przybliżenia Borna-Oppenheimera dla cząsteczki składającej się z dwóch atomów o liczbach atomowych Z_1 i Z_2 .
147. Skonstruować hamiltonian w ramach przybliżenia Borna-Oppenheimera dla dwuatomowej cząsteczki homojądrowej.
148. Skonstruować pełny hamiltonian dla cząsteczki benzenu.
149. Skonstruować pełny hamiltonian dla jonu SO_4^{-2}
150. Skonstruować pełny hamiltonian dla cząsteczki czterofluorku uranu.
151. Skonstruować pełny hamiltonian dla dimeru kwasu mrówkowego.
152. Skonstruować hamiltonian w ramach przybliżenia Borna-Oppenheimera dla kompleksu złożonego z trzech cząsteczek wody.
153. Cząsteczka H_2^+ i cząsteczka H_2 .
154. Znormalizować orbital molekularny $\Psi = N(\chi_a + \chi_b)$ przy założeniu, że funkcje χ_a, b są unormowane.
155. Znormalizować orbital molekularny $\Psi = N(\chi_a - \chi_b)$ przy założeniu, że funkcje χ_a, b są unormowane.
156. Wyznaczyć energię orbitalu wiążącego w cząsteczce wodoru
157. Klasyfikacja orbitali molekularnych
158. Scharakteryzować orbital molekularny typu σ .
159. Scharakteryzować orbital molekularny typu π .
160. Scharakteryzować orbital molekularny typu δ .
161. Orbitale wiążące i antywiązące.
162. metoda LCAOMO.
163. Cząsteczki dwuatomowe homojądrowe.
164. Poziomy energetyczne w cząsteczkach dwuatomowych homojądrowych.
165. Rząd wiązania w homojądrowych cząsteczkach dwuatomowych.
166. Trwałość cząsteczek dwuatomowych.
167. Konfiguracje elektronowe dwuatomowych cząsteczek homojądrowych.

168. Struktura elektronowa cząsteczki CO.
169. Energie i długości wiązań w szeregu N_2 , N_2^+ , N_2^- .
170. Własności paramagnetyczne cząsteczek dwuatomowych homojądrowych.
171. Omówić pojęcie hybrydyzacji orbitali atomowych.
172. Wykazać niezmienniczość wyznacznikowej funkcji falowej przy transformacji ortogonalnej orbitali.
173. Gęstość elektronowa wobec transformacji unitarnej (ortogonalnej) orbitali.
174. Hybrydyzacja sp . przykłady cząsteczek zawierających atomy o takiej hybrydyzacji.
175. Hybrydyzacja sp^2 . przykłady cząsteczek zawierających atomy o takiej hybrydyzacji.
176. Hybrydyzacja sp^3 . przykłady cząsteczek zawierających atomy o takiej hybrydyzacji.
177. Hybrydyzacja sp^3d . przykłady cząsteczek zawierających atomy o takiej hybrydyzacji.
178. Hybrydyzacja sp^3d^2 . przykłady cząsteczek zawierających atomy o takiej hybrydyzacji.
179. Hybrydyzacja sd . przykłady cząsteczek zawierających atomy o takiej hybrydyzacji.
180. Scharakteryzować geometrię cząsteczek CH_4 i $BaCl_2$; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
181. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek C_2H_4 i SCl_2 ; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
182. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek C_2H_2 i ICl_2^- ; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
183. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek PCl_5 i $ZnCl_2$; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
184. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek SF_6 i H_2O ; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
185. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek BCl_3 i NH_3 ; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
186. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek NO_3^- i H_3O^+ ; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
187. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek SO_4^{2-} i $BrICl^-$; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
188. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek NH_4^+ i $HgCl_2$; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.

189. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek PCl_6^- i SO_2 ; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
190. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek IF_5 i NO_2^- ; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
191. Scharakteryzować strukturę elektronową i geometrię cząsteczek BrF_5 i SO_3 ; posłużyć się pojęciem hybrydyzacji.
192. Układy π -elektronowe.
193. Węglowodory o układach π -elektronowych skumulowanych, skoniugowanych i izolowanych.
194. Metoda Hückla.
195. Konstrukcja macierzy energii (macierzy operatora Hamiltona) w metodzie Hückla.
196. Równania sekularne w metodzie Hückla.
197. Parametryzacja całki kulombowskiej w metodzie Hückla.
198. Parametryzacja całki rezonansowej w metodzie Hückla.
199. Energie orbitalne w metodzie Hückla.
200. Węglowodory naprzemienne i nienaprzemienne.
201. Zapisać i rozwiązać układ równań sekularnych w metodzie Hückla dla rodnika allilowego.
202. Orbitale Hückla dla etenu (energia, symetria, współczynniki LCAO).
203. Orbitale Hückla dla allilu (energia, symetria, charakterystyka).
204. Orbitale Hückla dla butadienu (rozkład energii, symetria, płaszczyzny węzłowe).
205. Orbitale Hückla dla heksatrienu (rozkład energii, symetria, płaszczyzny węzłowe).
206. Orbitale Hückla dla cyklopropenyłu (rozkład energii, symetria, płaszczyzny węzłowe).
207. Orbitale Hückla dla cyklobutadienu (rozkład energii, symetria, płaszczyzny węzłowe).
208. Orbitale Hückla dla cyklopentadienyłu (rozkład energii, symetria, płaszczyzny węzłowe).
209. Orbitale Hückla dla benzenu (energia, symetria, płaszczyzny węzłowe).
210. Struktura π -elektronowa węglowodorów aromatycznych.
211. Udział heteroatomów w układzie π -elektronowym węglowodorów aromatycznych.

212. Aromatyczność i reguła Hückla.
213. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce pirołu C_4H_4NH .
214. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce pirydyny C_5H_5N .
215. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce furanu C_4H_4O .
216. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce tiofenu C_4H_4S .
217. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce aniliny $C_6H_5NH_2$.
218. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce nitrobenzenu $C_6H_5NO_2$.
219. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce styrenu $C_6H_5CH=CH_2$.
220. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce aldehydu benzoowego C_6H_5CHO .
221. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce imidazolu $C_3N_2H_4$.
222. Struktura π -elektronowa i hybrydyzacja atomów w cząsteczce fenolu C_6H_5OH .
223. Energia delokalizacji w metodzie Hückla.
224. Rząd wiązania w metodzie Hückla.
225. Populacja π -elektronowa atomu ("gęstość π -elektronowa") w metodzie Hückla.
226. Wyznaczyć energię delokalizacji dla cząsteczki butadienu ($e_1 = 1.62, e_2 = 0.62$).
227. Obliczyć π -elektronowy rząd wiązania dla cząsteczki etenu.
228. Obliczyć π -elektronowy rząd wiązania dla wiązania 1-2 w cząsteczce butadienu:

$$\begin{aligned}\phi_1 &= 0.37\pi_1 + 0.60(\pi_2 + \pi_3) + 0.37\pi_4 \\ \phi_2 &= 0.60\pi_1 + 0.37(\pi_2 - \pi_3) - 0.60\pi_4\end{aligned}$$

229. Obliczyć π -elektronowy rząd wiązania dla wiązania 2-3 w cząsteczce butadienu:

$$\begin{aligned}\phi_1 &= 0.37\pi_1 + 0.60(\pi_2 + \pi_3) + 0.37\pi_4 \\ \phi_2 &= 0.60\pi_1 + 0.37(\pi_2 - \pi_3) - 0.60\pi_4\end{aligned}$$

230. Obliczyć π -elektronową populację dowolnego atomu ("gęstość π -elektronową") w cząsteczce butadienu:

$$\begin{aligned}\phi_1 &= 0.37\pi_1 + 0.60(\pi_2 + \pi_3) + 0.37\pi_4 \\ \phi_2 &= 0.60\pi_1 + 0.37(\pi_2 - \pi_3) - 0.60\pi_4\end{aligned}$$