

SYLABUS FK2

Atomy wieloelektronowe oraz ogólne pojęcia teorii układów wieloelektronowych.

1. Podstawowe postulaty mechaniki kwantowej
2. Jednostki atomowe.
3. Metody przybliżone mechaniki kwantowej: (rachunek zaburzeń), metoda wariacyjna; metoda Ritza
4. Równanie Schrödingera dla atomu wieloelektronowego
5. Funkcja falowa układu N-elektronowego.
6. Atom helu
7. Multipletowość stanów w układach wieloelektronowych; konfiguracje i termy.
8. Metoda Hartree-Focka, przybliżenie jednoelektronowe,
9. Korelacja elektronowa, metoda oddziaływania konfiguracji.
10. Budowa układu okresowego pierwiastków.

Molekuły dwuatomowe oraz ogólny opis układu złożonego z elektronów i jąder.

11. Przybliżenie adiabatyczne i Borna-Oppenheimera. Równania Schrödingera dla podukładu elektronów i jąder.
12. Funkcja potencjału w równaniu na ruch jąder- energia wiązania i długość wiązania.
13. Rozdzielenie oscylacji i rotacji.
14. Przybliżone wartości własne całkowitego hamiltonianu molekularnego.
15. Orbitale atomowe zhybrydizowane
16. Jon molekuly wodoru - istota wiązania chemicznego.
17. Teoria orbitali molekularnych.
18. Drobina wodoru
19. Klasyfikacja orbitali molekularnych i konfiguracje i termy stanów molekuł dwuatomowych;

Ciało stałe – krystaliczne - wprowadzenie.

20. Elementy teorii grup i teorii reprezentacji; symetrie kryształów.
21. Podstawowe pojęcia i definicje (kryształ idealny, sieć przestrzenna, baza, struktura krystaliczna, sieci Bravais, sieć odwrotna, pierwsza strefa Brillouina).
22. Wartości własne operatora translacji. Twierdzenie Blocha.
23. periodyczne warunki brzegowe.
24. Metoda ciasnego wiązania.
25. Zastosowanie do opisu struktury elektronowej grafenu.
26. Metoda prawie swobodnych elektronów.
27. Model Kroniga-Penneya.

28. Metale, izolatory, półprzewodniki

Zmianu układu kwantowego w czasie

29. Ewolucja układu kwantowego.

30. Obrazy.

31. Przejścia kwantowe wywołane zewnętrznym zaburzeniem.

32. Prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu.

33. Przejścia pod wpływem promieniowania elektromagnetycznego; przybliżenie elektryczne dipolowe.

34. Reguły wyboru

35. Elementy teorii rozpraszania.