

1. Podać wyrażenia określające wartości własne energii dla następujących układów: a) elektron w jednowymiarowej studni potencjału, b) oscylator harmoniczny, c) rotator sztywny. Dla powyższych układów narysować diagramy poziomów energetycznych zaznaczając obsadzone poziomy i dozwolone przejścia (punkt a: elektron w cząsteczce 1,3-butadienu).

2. Wyjaśnić następujące pojęcia, podając odpowiednie wyrażenia matematyczne oraz nazwy i definicje wielkości w nich występujących:

a) równanie Schrödingera niezależne od czasu dla cząstki w układzie współrzędnych x,y,z ,
b) funkcja własna i wartość własna operatora, c) operator hermitowski,
d) operator liniowy, e) składowa momentu przejścia między dwoma stanami układu,
f) absorpcja, g) funkcja unormowana, h) funkcje zdegenerowane.

3. Omówić sposób obliczenia średniej i najbardziej prawdopodobnej odległości elektronu od jądra dla stanu $1s$ atomu wodoru. Podać spodziewany wynik.

4. Omówić sposób wyznaczenia długości wiązania oraz stałej siłowej w cząsteczce HCl: podać jaki rodzaj spektroskopii wykorzystać, jakie parametry wyznaczyć z widma oraz z jakich zależności i przy jakich założeniach wyznaczyć te wielkości.

5. Dla elektronu w studni potencjału $(0,l)$ w stanie opisanym funkcją Ψ_2 zapisać wyrażenia na wartości średnie: a) położenia i b) pędu, c) omówić sposób wyznaczenia najbardziej prawdopodobnego położenia elektronu. Podać spodziewane wyniki (a, b i c).

6. Naskicować wykresy energii potencjalnej w funkcji zmiennej q rzeczywistej cząsteczki dwuatomowej i cząsteczki w przybliżeniu oscylatora harmonicznego (na wspólnym wykresie). Omówić różnice w parametrach spektroskopowych dla układu rzeczywistego i w przybliżeniu oscylatora harmonicznego.

7. Omówić sposób wyznaczenia energii stanu podstawowego elektronu w studni potencjału z wykorzystaniem a) funkcji własnej hamiltonianu b) funkcji przybliżonej. Określić relację między tymi wartościami.