

**Konspekt wykładu**  
**Chemia Kwantowa i Spektroskopia**  
**dla Szkoły Doktorskiej Warsaw-4-PhD, IChF PAN**

Wykładowcy: dr Aleksandra Siklitckaia (Chemia Kwantowa)  
prof. dr hab. Robert Kołos (Spektroskopia)

1. Podstawy fizyczne mechaniki kwantowej (promieniowanie ciała doskonale czarnego, efekt fotoelektryczny, zjawisko Comptona, dualistyczny charakter promieniowania, hipoteza de Broglie'a, zasada nieoznaczoności Heisenberga).
2. Równanie Schrödingera. Pojęcie i interpretacja funkcji falowej.
3. Częstka w pudle potencjału. Efekt tunelowy.
4. Klasyczny i kwantowy oscylator harmoniczny.
5. Kwantowy rotator sztywny.
6. Opis stanu elektronu w atomie wodoru.
7. Orbitalny i spinowy moment pędu. Moment magnetyczny. Doświadczenie Stern-Gerlacha. Efekt Zeemana.
8. Pojęcie orbitalu atomowego i cząsteczkowego. Zasada Pauliego, reguły Hunda. Podstawowe własności funkcji falowej układu wieloelektronowego i jej interpretacja.
9. Metoda wariacyjna.
10. Wiązanie chemiczne w cząsteczkach dwuatomowych.
11. Podstawowe pojęcia teorii grup i przykłady jej zastosowań w fizykochemii.
12. Podstawowe pojęcia, terminy i jednostki stosowane w spektroskopii. Prawdopodobieństwo zachodzenia przejść spektroskopowych. Moment przejścia i rozkład Boltzmann.
13. Spektroskopia rotacyjna sztywnych cząsteczek liniowych.
14. Spektroskopia rotacyjna cząsteczek typu rotatora symetrycznego, problem rotatora elastycznego oraz efekt Starka.
15. Spektroskopia oscylacyjna cząsteczek dwuatomowych w ujęciu harmonicznym i anharmonicznym. Oscylacje cząsteczek wieloatomowych.
16. Widma oscylacyjno-rotacyjne. Instrumentarium spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni.
17. Oscylacyjna spektroskopia ramanowska.
18. Spektroskopia elektronowa atomów.
19. Molekularna spektroskopia elektronowa. Widma elektronowo-oscyłacyjno-rotacyjne.
20. Zjawisko luminescencji. Diagram Jabłońskiego. Fotodysocjacja.
21. Spektroskopia fotoelektronów.
22. Spektroskopia jądrowego rezonansu magnetycznego.
23. Spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego.