Test 6

1. Człon zaniedbywany w przybliżeniu Borna–Oppenheimera nie zależy od:
   (a) mas jąder
   (b) geometrii cząsteczki
   (c) współrzędnych elektronów
   (d) elektronowej funkcji falowej

2. Która z funkcji nie opisuje fermionów? 1 oznacza trzy współrzędne przestrzenne i jedną spinową.
   (a) $\Phi(1,2,3,4) = \Phi(2,3,1,4)$
   (b) $\Phi(1,2,3,4) = \Phi(4,3,1,2)$
   (c) $\Phi(1,2,3,4) = \Phi(1,3,4,2)$
   (d) $\Phi(1,2,3,4) = \Phi(3,1,2,4)$

3. Która z podanych funkcji jest antysymetryczna ze względu na permutację położeń elektronów?
   (a) $\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\alpha(1)\alpha(2) + \beta(1)\beta(2)\Big)$
   (b) $\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\beta(2)\alpha(1) + \beta(1)\alpha(2)\Big)$
   (c) $\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\alpha(2)\beta(1) - \alpha(1)\beta(2)\Big)$
   (d) $\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\alpha(1)\beta(2) - \alpha(1)\beta(2)\Big)$

4. W zamkniętopowłokowej metodzie Hartree–Focka–Roothana dla molekuły metanu użyto bazy złożonej z 15 orbitali atomowych. Wymiar wyznacznika Slatera, liczba orbitali obsadzonych i wirtualnych wynosza odpowiednio:
   (a) 10, 10, 5
   (b) 10, 5, 10
   (c) 5, 5, 10
   (d) 5, 10, 5

5. Równanie Focka to:
   (a) równanie własne na orbitale molekularne
   (b) dwuelektronowe równanie na najlepsze orbitale molekularne
   (c) równanie na orbitale molekularne minimalizujące wartość oczekiwaną hamiltonianu
   (d) równanie na orbitale molekularne minimalizujące energie orbitalne

6. Nie jest prawdą, że wyznacznik Slatera:
   (a) zapewnia antysymetryczność funkcji falowej
   (b) spełnia zakaz Pauliego
   (c) pozwala na uzyskanie najlepszych orbitali molekularnych
   (d) wykorzystuje przybliżenie jednoelektronowe

7. Operator Focka:
   (a) zawiera operator energii kinetycznej wszystkich jąder
   (b) jest dwuelektronowy
   (c) zawiera dwuelektronowy operator kulombowski
   (d) uwzględnia przyciąganie elektronu przez jądra

8. Multipletowość stanu $\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\psi_n(1)\psi_m(2) - \psi_n(2)\psi_m(1)\Big)\Big(\beta(1)\beta(2)\Big)$ wynosi:
   (a) 0
   (b) 1
   (c) 2
   (d) 3