Test 7

1. Nie jest prawdą, że w metodzie orbitali molekularnych MO zakładamy:
   (a) funkcję falową w postaci antysymetryzowanego iloczynu jednoelektronowych funkcji
   (b) każdy elektron porusza się w uśrednionym potencjale pozostałych elektronów
   (c) każdy elektron opisany jest dwuelektronową funkcją zwaną orbitalem
   (d) jądra są nieskończenie ciężkie

2. Elektronowa funkcja falowa zamkniętopowłokowej molekuły w metodzie LCAO MO:
   (a) jest kombinacją liniową orbitali atomowych
   (b) jest kombinacją liniową wyznaczników Slatera zbudowanych z orbitali atomowych
   (c) jest wyznacznikiem Slatera zbudowanym z dowolnych spinorbitali (iloczyn orbitalu molekularnego i funkcji spinowej)
   (d) jest wyznacznikiem Slatera zbudowanym ze spinorbitali (iloczyn orbitalu molekularnego w postaci kombinacji liniowej orbitali atomowych i funkcji spinowej)

3. Dla metody CI (oddziaływania konfiguracji) nie jest prawdą:
   (a) CI jest metodą wariacyjną
   (b) nie uwzględnia korelacji elektronowej
   (c) pojęcie konfiguracji elektronowej traci sens
   (d) funkcję przedstawiamy jako liniową kombinację wyznaczników Slatera utworzonych z orbitali obsadzonych i wirtualnych

4. Całka rezonansowa H_{ab} w cząsteczce H_2^+:
   (a) da sie oszacować jako E_H (energia atomu H)
   (b) jest pomijalnie mała (w stosunku do H_{aa})
   (c) przyjmuje tylko wartości ujemne
   (d) zbiega do $-\infty$ dla nieskończonej odległości pomiędzy jądrami

5. Orbital $\sigma 1s$ różni się od orbitalu $\sigma^* 1s$:
   (a) energią
   (b) wartością gęstości w połowie odległości pomiędzy jądrami
   (c) rozkładem ładunku wokół obu jąder
   (d) wszystkimi powyższymi

6. Konfiguracja dla molekuły O_2 to:
   (a) $(\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p)^2(\pi 2p)^4(\pi_x^* 2p)\ (\pi_y^* 2p)$
   (b) $(\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p)^2(\pi 2p)^4(\pi^* 2p)^2$
   (c) $(\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p)^2(\pi^* 2p)^4(\pi_x 2p)\ (\pi_y 2p)$
   (d) $(\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p)^2(\pi^* 2p)^4(\pi 2p)^2$

7. W przybliżeniu LCAO MO nietrwała jest molekuła:
   (a) He_2^+
   (b) He_2
   (c) Li_2
   (d) Li_2^+

8. W przybliżeniu LCAO MO prawdą jest:
   (a) wiązanie w H_2^+ jest krótsze niż w H_2
   (b) stan podstawowy N_2 jest singletem
   (c) O_2^+ ma słabsze wiązanie niż O_2
   (d) wiązanie dwuelektronowe jest słabsze niż jednoelektronowe