Test nr 4
grupa Konrada Patkowskiego

1. Hamiltonian opisujący ruch względny elektronu w jonie He^+ ma postać (μ oznacza masę zredukowaną tego układu)

   a) $\frac{-\hbar^2}{2\mu}\triangle_{xyz} + \frac{e^2}{r}$ b) $\frac{-\hbar^2}{2\mu}\triangle_{xyz} + \frac{2e^2}{r}$
   c) $\frac{-\hbar^2}{2\mu}\triangle_{xyz} - \frac{e^2}{r}$ d) $\frac{-\hbar^2}{2\mu}\triangle_{xyz} - \frac{2e^2}{r}$

2. Chcemy rozwiązać równanie różniczkowe cząstkowe $\hat{A}(x,y)F(x,y) = 0$, gdzie $\hat{A}$ jest pewnym operatorem; pisząc $\hat{A}(x,y)$ rozumiemy przez to, że operator $\hat{A}$ w działaniu na dowolną funkcję zmiennych x, y daje w wyniku także funkcję zmiennych x, y (np. operator $\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + x^2\right)$ jest przykładem operatora $\hat{A}(x)$). Rozdzielenie zmiennych x i y w tym równaniu, o ile daje się je wykonać, polega na sprowadzeniu równania do równoważnej postaci

   a) $\hat{B}(x)X(x) = \hat{C}(y)Y(y)$, gdzie $F(x,y) = X(x)\cdot Y(y)$
   b) $\hat{B}(x)X(x) = \hat{C}(y)Y(y)$, gdzie $F(x,y) = X(x) + Y(y)$
   c) $\hat{B}(y)X(x) = \hat{C}(x)Y(y)$, gdzie $F(x,y) = X(x)\cdot Y(y)$
   d) $\hat{B}(y)X(x) = \hat{C}(x)Y(y)$, gdzie $F(x,y) = X(x) + Y(y)$

3. W chemii kwantowej często używamy tzw. *układu jednostek atomowych* (a.u.), w którym $\hbar = e = m_e = 1$ (m_e jest masą elektronu). Jeśli założymy, że jądro atomu wodoru jest nieskończenie ciężkie, masa zredukowana atomu wodoru $\mu = m_e$ i wówczas energia stanu podstawowego atomu wodoru wynosi -0.5 a.u. Energia pierwszego stanu wzbudzonego atomu wodoru jest wtedy równa

   a) -0.3 a.u. b) -0.25 a.u. c) -0.125 a.u. d) -0.1 a.u.

4. Funkcja falowa stanu podstawowego atomu wodoru wyraża się wzorem (w którym N jest stałą normalizacyjną, zaś a_0 — promieniem Bohra)

   a) $Ne^{-\frac{a_0^2}{r^2}}$ b) $Ne^{-\frac{a_0}{r}}$
   c) $Ne^{-\frac{r}{a_0}}$ d) $Ne^{-\frac{r^2}{a_0^2}}$

5. Które z poniższych oznaczeń **nie** opisuje poprawnego orbitalu atomu wodoru:

   a) $4s$ b) $2p_{-1}$ c) $4d_0$ d) $3d_3$

6. Składowa M_z momentu pędu elektronu w atomie wodoru w stanie $2p_1$

   a) jest równa 0 b) jest równa $\hbar$ c) jest równa $2\hbar$ d) jest nieokreślona

7. Które zdanie jest **fałszywe**:

   a) Orbital $2p_x$ atomu wodoru jest funkcją rzeczywistą.
   b) Orbital $2p_x$ atomu wodoru jest funkcją własną operatora $\hat{H}$.
   c) Orbital $2p_x$ atomu wodoru **nie** jest funkcją własną operatora $\hat{M}^2$.
   d) Orbital $2p_x$ atomu wodoru **nie** jest funkcją własną operatora $\hat{M}_z$.

8. W teorii jądrowego rezonansu magnetycznego (NMR) duże znaczenie ma wielkość zwana *gęstością elektronową na jądrze*, tzn. gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w punkcie $(0,0,0)$. Dla którego z orbitali atomu wodoru gęstość elektronowa na jądrze jest różna od zera:

   a) $2s$ b) $2p_x$ c) $2p_y$ d) $2p_z$