Test nr 6
grupa Konrada Patkowskiego

1. Hamiltonian cząsteczki H_2 ma postać ($\hat{T}$ jest operatorem energii kinetycznej dwóch jąder i dwóch elektronów, $\vec{r}_a, \vec{r}_b$ są położeniami jąder, a $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ — położeniami elektronów)
   a) $\hat{T} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_b - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_b - \vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$
   b) $\hat{T} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_b - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_b - \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$
   c) $\hat{T} - \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_b - \vec{r}_1|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_b - \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$
   d) $\hat{T} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_b - \vec{r}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_b - \vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$

2. Funkcja falowa opisująca ruch względny jąder **(rotacje i oscylacje)** w cząsteczce amoniaku jest funkcją

   a) 3 współrzędnych b) 6 współrzędnych c) 9 współrzędnych d) 12 współrzędnych

3. Z fizycznego punktu widzenia, wprowadzenie przybliżenia adiabatycznego odpowiada założeniu, że

   a) oddziaływanie elektrostatyczne między jądrami i elektronami można pominąć,

   b) rozkład gęstości elektronowej w przestrzeni nie zależy od położeń jąder,

   c) gęstość elektronowa dostosowuje się nieskończenie szybko do zmiany położeń jąder,

   d) położenia jąder dostosowują się nieskończenie szybko do zmiany gęstości elektronowej.

4. Poprawka do energii potencjalnej dla ruchu jąder, zaniedbywana w przybliżeniu Borna-Oppenheimera, **nie zależy** od

   a) współrzędnych elektronów b) elektronowej funkcji falowej
   c) mas jąder d) geometrii cząsteczki

5. Energia wiązania w cząsteczce dwuatomowej jest

   a) taka sama dla wszystkich stanów elektronowych tej cząsteczki,

   b) mierzalna doświadczalnie,

   c) równa co do wartości bezwzględnej energii stanu podstawowego tej cząsteczki,

   d) większa co do wartości bezwzględnej od energii dysocjacji tej cząsteczki.

6. Przybliżony wzór na energię całkowitą cząsteczki dwuatomowej

$$E_{kJv} = E_k^{\text{elektronowa}} + \frac{\hbar^2}{2\mu R_e^2} J(J+1) + \hbar\omega_0(v + \tfrac{1}{2}),$$

   w którym k, J, v są liczbami kwantowymi, R_e — długością wiązania, zaś $\omega_0 = \sqrt{\frac{U_k''(R_e)}{\mu}}$ ($U_k(R)$ jest energią potencjalną dla ruchu jąder), jest spełniony

   a) tym lepiej, im v jest większe,

   b) tym lepiej, im J jest mniejsze,

   c) tym lepiej, im minimum funkcji $U_k(R)$ jest płytsze,

   d) tym lepiej, im minimum funkcji $U_k(R)$ jest szersze.

7. Odległości $\delta_{\text{el}}, \delta_{\text{rot}}, \delta_{\text{osc}}$ odpowiednio między kolejnymi poziomami elektronowymi, rotacyjnymi i oscylacyjnymi typowej cząsteczki spełniają nierówności

   a) $\delta_{\text{osc}} < \delta_{\text{el}} < \delta_{\text{rot}}$ b) $\delta_{\text{rot}} < \delta_{\text{osc}} < \delta_{\text{el}}$ c) $\delta_{\text{osc}} < \delta_{\text{rot}} < \delta_{\text{el}}$ d) $\delta_{\text{rot}} < \delta_{\text{el}} < \delta_{\text{osc}}$

8. Rozwiązujemy równanie Schrödingera dla pewnej cząsteczki, zakładając przybliżenie Borna-Oppenheimera i niezależność rotacji i oscylacji. Mamy do rozwiązania trzy równania różniczkowe opisujące poszczególne części całkowitej energii cząsteczki. Rozwiązujemy te równania w kolejności:

   a) elektronowe→rotacyjne→oscylacyjne b) elektronowe→oscylacyjne→rotacyjne
   c) rotacyjne→elektronowe→oscylacyjne d) rotacyjne→oscylacyjne→elektronowe