Test nr 7
grupa Konrada Patkowskiego

1. Ile liniowo niezależnych **spinorbitali** wchodzi w skład poziomu energetycznego $n = 3$ atomu wodoru:

   a) 4 b) 9 c) 16 d) 18

2. Układ trzech elektronów jest opisywany przez funkcję falową $\Psi(1,2,3)$, gdzie 1,2,3 są współrzędnymi elektronów (przestrzennymi i spinowymi). Która równość jest prawdziwa:

   a) $\Psi(2,3,1) = \Psi(1,2,3)$ b) $\Psi(2,3,1) = -\Psi(1,2,3)$
   c) $\Psi(2,3,1) = 1 - \Psi(1,2,3)$ d) żadna z wymienionych

3. Która z dwucząstkowych funkcji falowych $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, gdzie $\vec{r}_i = (r_i, \vartheta_i, \varphi_i)$ dla $i = 1, 2$ zapisane są we współrzędnych sferycznych, jest antysymetryczna względem zamiany współrzędnych cząstek:

   a) $e^{-(r_1+r_2)}$ b) $e^{r_1-r_2}$ c) $e^{-(r_1+r_2)}\cos(\vartheta_1-\vartheta_2)$ d) $e^{-(r_1+r_2)}\sin(\vartheta_1-\vartheta_2)$

4. W przybliżeniu jednoelektronowym (Hartree-Focka)

   a) zakładamy przybliżoną postać funkcji falowej i przybliżony hamiltonian elektronowy,
   b) zakładamy przybliżoną postać funkcji falowej i dokładny hamiltonian elektronowy,
   c) zakładamy dokładną postać funkcji falowej i przybliżony hamiltonian elektronowy,
   d) zakładamy dokładną postać funkcji falowej i dokładny hamiltonian elektronowy, ale energię liczymy w sposób przybliżony.

5. Wyznacznik Slatera dla atomu helu o konfiguracji $1s^2$ (tzn. obydwa elektrony są opisywane orbitalem $1s$) ma postać

   a) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1s\alpha(1)1s\alpha(1) - 1s\beta(2)1s\beta(2)\right)$
   b) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1s\alpha(1)1s\alpha(2) - 1s\beta(1)1s\beta(2)\right)$
   c) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1s\alpha(1)1s\beta(1) - 1s\alpha(2)1s\beta(2)\right)$
   d) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1s\alpha(1)1s\beta(2) - 1s\alpha(2)1s\beta(1)\right)$

6. Rozwiązaniem równań Hartree-Focka dla układu zamkniętopowłokowego jest taki ortonormalny układ orbitali, dla którego

   a) norma (czyli długość wektora) wyznacznika Slatera zbudowanego z odpowiadających im spinorbitali jest najmniejsza,
   b) wartość średnia hamiltonianu z wyznacznikiem Slatera zbudowanym z odpowiadających im spinorbitali jest najmniejsza,
   c) suma energii orbitalnych jest najmniejsza,
   d) najniższa energia orbitalna jest najmniejsza.

7. Konsekwencją antysymetrii funkcji falowej względem zamiany współrzędnych dwóch elektronów jest obecność w wyrażeniu na energię Hartree-Focka

   a) energii kinetycznej elektronów,
   b) energii potencjalnej oddziaływania elektronów z jądrami,
   c) całek kulombowskich,
   d) całek wymiennych.

8. Dla cząsteczki wody operator Focka $\hat{f}$ zależy od

   a) 3 orbitali b) 5 orbitali c) 6 orbitali d) 10 orbitali