Test nr 8
grupa Konrada Patkowskiego

1. Rozwiązujemy równania Hartree-Focka korzystając z metody pola samouzgodnionego. W poprzedniej, $(k-1)$-szej iteracji otrzymaliśmy orbitale $\psi_1^{(k-1)}, \ldots, \psi_n^{(k-1)}$ (n jest połową liczby elektronów). Nowe orbitale $\psi_1^{(k)}, \ldots, \psi_n^{(k)}$ wyznaczamy w k-tej iteracji z równania (w którym $\hat{f}$ jest operatorem Focka, $i = 1, \ldots, n$)

   a) $\langle \psi_i^{(k)} | \psi_i^{(k-1)} \rangle = 0$
   b) $\hat{f}(\psi_1^{(k)}, \ldots, \psi_n^{(k)}) \psi_i^{(k)} = \epsilon_i^{(k)} \psi_i^{(k)}$
   c) $\hat{f}(\psi_1^{(k-1)}, \ldots, \psi_n^{(k-1)}) \psi_i^{(k)} = \epsilon_i^{(k)} \psi_i^{(k)}$
   d) $\hat{f}(\psi_1^{(k)}, \ldots, \psi_n^{(k)}) \psi_i^{(k-1)} = \epsilon_i^{(k-1)} \psi_i^{(k-1)}$

2. Kiedy kończymy proces iteracyjny metody SCF ?

   a) gdy orbitale otrzymane w k-tej iteracji są prawie takie same jak orbitale otrzymane w $(k-1)$-szej iteracji,
   b) gdy orbitale otrzymane w k-tej iteracji są ortogonalne do orbitali otrzymanych w $(k-1)$-szej iteracji,
   c) gdy orbitale otrzymane w k-tej iteracji są ortogonalne do siebie nawzajem,
   d) gdy energie orbitalne otrzymane w k-tej iteracji są mniejsze niż energie orbitalne otrzymane w $(k-1)$-szej iteracji.

3. Orbitale atomu Ne (liczba atomowa 10) otrzymane z równań Hartree-Focka

   a) są takie same jak orbitale jonu wodoropodobnego Ne^{9+},
   b) mają taką samą część kątową jak orbitale jonu Ne^{9+}, ale inną część radialną,
   c) mają takie same wykładniki w funkcji e^{-ar} jak orbitale jonu Ne^{9+}, ale różnią się resztą części radialnej,
   d) nie wykazują żadnego spośród ww. podobieństw do orbitali jonu Ne^{9+}.

4. Który z atomów jest układem zamkniętopowłokowym ?

   a) H b) Be c) C d) N

5. W atomie n-elektronowym i-temu spośród n obsadzonych spinorbitali odpowiadają liczby kwantowe $n_i, l_i, m_{l_i}, m_{s_i}$. Orbitalny i spinowy moment pędu całego atomu określony jest przez liczby kwantowe L, M_L, S, M_S. Która równość jest prawdziwa:

   a) $L = l_1 + \cdots + l_n$
   b) $M_L = m_{l_1} + \cdots + m_{l_n}$
   c) $S = 1/2$
   d) $M_S = 1/2$ lub $M_S = -1/2$

6. Term atomowy ${}^2D$ jest zdegenerowany

   a) 6-krotnie b) 9-krotnie c) 10-krotnie d) 15-krotnie

7. Rozpatrujemy stan atomu węgla opisany wyznacznikiem Slatera, w którym obsadzone są spinorbitale $1s\alpha, 1s\beta, 2s\alpha, 2s\beta, 2p_{-1}\alpha, 2p_1\alpha$. Dla tego stanu liczby kwantowe M_L i M_S mają wartości

   a) $M_L = 0 \;\; M_S = 0$ b) $M_L = 0 \;\; M_S = 1$ c) $M_L = 1 \;\; M_S = 0$ d) $M_L = 1 \;\; M_S = 1$

8. Stan podstawowy atomu tytanu ma konfigurację elektronową $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$. Takiej konfiguracji odpowiadają termy ${}^3F, {}^3P, {}^1G, {}^1D, {}^1S$. Zgodnie z regułą Hunda, term podstawowy to

   a) ${}^1S$ b) ${}^1G$ c) ${}^3P$ d) ${}^3F$