Test nr 9

grupa Konrada Patkowskiego

1. W przybliżeniu LCAO MO całkowita elektronowa funkcja falowa cząsteczki zamkniętopowłokowej jest

   a) wyznacznikiem Slatera zbudowanym ze spinorbitali, które są iloczynami funkcji spinowej i kombinacji liniowej ustalonych orbitali atomowych,

   b) wyznacznikiem Slatera zbudowanym ze spinorbitali, które są iloczynami funkcji spinowej i orbitalu atomowego otrzymanego metodą Hartree-Focka,

   c) kombinacją liniową ustalonych orbitali atomowych,

   d) kombinacją liniową wyznaczników Slatera zbudowanych ze spinorbitali, które są iloczynami funkcji spinowej i pewnego orbitalu atomowego.

2. Załóżmy, że elektron jonu H_2^+ jest opisany orbitalem **antywiążącym** σ^*1s. Odległość między jądrami oznaczamy przez R. Energia potencjalna $U(R)$ (tzn. suma energii elektronu i energii odpychania jąder)

   a) maleje dla $0 < R < \infty$ b) maleje dla $R < R_0$ i rośnie dla $R > R_0$
   c) rośnie dla $0 < R < \infty$ d) rośnie dla $R < R_0$ i maleje dla $R > R_0$

3. Orbitale $\sigma 1s$ i $\sigma^* 1s$ **nie** różnią się

   a) energią,

   b) gęstością elektronową w połowie odległości między jądrami,

   c) sumą średnich odległości elektronu od obydwu jąder,

   d) symetrią przy obrotach wokół prostej łączącej jądra.

4. Która z cząsteczek (jonów) jest trwała w przybliżeniu LCAO MO?

   a) He_2 b) Li_2^{2+} c) Be_2^+ d) Be_2

5. W której cząsteczce (jonie) wiązanie O···O jest **najkrótsze**?

   a) O_2^{2-} b) O_2^- c) O_2 d) O_2^+

6. Która cząsteczka ma stan podstawowy **nie** będący singletem?

   a) B_2 b) N_2 c) O_2 d) F_2

7. Jon N_2^+ ma w stanie podstawowym konfigurację elektronową

   a) $(\sigma 1s)^2(\sigma^*1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^*2s)^2(\sigma 2p)^2(\pi 2p)^3$

   b) $(\sigma 1s)^2(\sigma^*1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^*2s)^2(\pi 2p)^4(\sigma 2p)^1$

   c) $(\sigma 1s)^2(\sigma^*1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^*2s)^2(\sigma 2p)^2(\sigma^*2p)^2(\pi 2p)^1$

   d) $(\sigma 1s)^2(\sigma^*1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^*2s)^2(\pi 2p)^4(\pi^*2p)^1$

8. Lokalizacja orbitali molekularnych służy do

   a) poprawienia energii cząsteczki otrzymanej w metodzie LCAO MO,

   b) poprawienia gęstości elektronowej otrzymanej w metodzie LCAO MO,

   c) podziału gęstości elektronowej otrzymanej w metodzie LCAO MO na poszczególne atomy i wiązania,

   d) podziału orbitali molekularnych na wiążące i antywiążące.