Test 7

Imię i nazwisko:

1. W metodzie wariacyjnej Ritza funkcja próbna ma postać: $\phi = \sum_{p=1}^{M} \chi_p \, c_p$, gdzie $\{\chi_p\}_{p=1}^{p=M}$ jest ustaloną bazą funkcji falowych, a $\{c_p\}_{p=1}^{p=M}$ jest zbiorem parametrów wariacyjnych (na ogół zespolonych), który może być zapisany w postaci macierzy jednokolumnowej $\boldsymbol{c}$. Który z poniższych warunków *nie jest istotny* w metodzie Ritza:

   a) $\det \boldsymbol{S} > 0$, b) $\det(\boldsymbol{H} - \epsilon \boldsymbol{S}) = 0$, c) $S_{pq} = 0$ dla $p \neq q$, d) $\boldsymbol{Hc} = \epsilon \boldsymbol{Sc}$,

   gdzie: $\epsilon = \langle \phi | \hat{H} \phi \rangle = minimum$, przy warunku $\langle \phi | \phi \rangle = 1$, a $\boldsymbol{H}$ i $\boldsymbol{S}$ są macierzami $(M \times M)$ odpowiednio hamiltonianu $\hat{H}$ i całek nakrywania w bazie $\{\chi_p\}_{p=1}^{p=M}$.

2. Oznaczenia jak w zad. 1. Warunek normalizacji funkcji ϕ zapisać można w postaci:

   a) $\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{S} \boldsymbol{c} = 1$, b) $\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{c} = 1$, c) $\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{c} = \boldsymbol{S}$, d) $\langle \chi_p | \chi_q \rangle = \delta_{pq}$,
   gdzie $\boldsymbol{c}^\dagger$ oznacza macierz jednowierszową hermitowsko sprzężoną w stosunku do $\boldsymbol{c}$.

3. $\hat{H}$ jest pełnym hamiltonianem molekuły dwuatomowej N-elektronowej, a $\hat{H}^o$ odpowiednim hamiltonianem elektronowym. W przybliżeniu adiabatycznym funkcję falową operatora $\hat{H}$ zapisuje się w postaci: $\Psi_k = \psi_k f_k$, gdzie ψ_k jest funkcją własną operatora $\hat{H}^o$. Które z poniższych stwierdzeń *jest prawdziwe*:

   a) ψ_k nie zależy od współrzędnych jąder,
   b) ψ_k zależy parametrycznie od współrzędnych jąder,
   c) f_k nie zależy od współrzędnych jąder,
   d) f_k zależy parametrycznie od współrzędnych jąder.

4. Które z poniższych stwierdzeń dotyczących spinu *jest nieprawdziwe*:

   a) spin jest wewnętrznym (tj. nie związanym z ruchem) momentem pędu cząstki,
   b) spinowa liczba kwantowa s przyjmuje wartość stałą dla danej cząstki elementarnej,
   c) jedyne dozwolone wartości liczby s to $0, 1, 2, \ldots$,
   d) magnetyczna spinowa liczba kwantowa $m_s = -s, -s+1, \ldots, s$ $(2s+1$ wartości).

5. Funkcje spinowe elektronu α i β są funkcjami własnymi operatora kwadratu spinu, $\hat{s}^2$, i operatora rzutu spinu na oś z, $\hat{s}_z$. Które z poniższych stwierdzeń *jest nieprawdziwe*:

   a) α i β zależą od zmiennej spinowej μ przyjmującej tylko dwie wartości: $\frac{1}{2}$ i $-\frac{1}{2}$,
   b) α i β tworzą układ ortonormalny,
   c) α jest funkcją własną operatora $\hat{s}^2$ z wartością własną $\frac{3}{4}\hbar^2$,
   d) β jest funkcją własną operatora $\hat{s}^2$ z wartością własną $\frac{-3}{4}\hbar^2$.

6. Spinorbital $\phi(x, y, z, \mu)$ jest iloczynem pewnego orbitalu $\psi(x, y, z)$ i funkcji spinowej $\sigma(\mu)$, gdzie $\sigma = \alpha$ lub β. Które z poniższych stwierdzeń *jest nieprawdziwe*:

   a) dwa spinorbitale są zawsze ortogonalne, jeśli mają różne funkcje spinowe,
   b) jeśli dwa spinorbitale są ortogonalne, to mają różne funkcje spinowe,
   c) dwa spinorbitale są zawsze ortogonalne, jeśli mają ortogonalne orbitale,
   d) zachodzi $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \langle \sigma_1 | \sigma_2 \rangle$.

7. Ψ jest N-elektronową funkcją falową ($N > 1$). Które z poniższych stwierdzeń *nie jest zgodne* z zakazem Pauliego?

   a) każda Ψ jest antysymetryczna ze względu na zamianę współrzędnych przestrzennych i spinowych dowolnej pary elektronów,
   b) każda $\Psi = 0$, gdy dwa elektrony opisane tą samą funkcją spinową znajdą się w tym samym punkcie przestrzeni,
   c) każda Ψ zmienia znak, gdy dwa elektrony zamienić miejscami w przestrzeni ,
   d) w atomie N-elektronowym żadne dwa elektrony nie mogą mieć takich samych wartości wszystkich czterech liczb kwantowych n, l, m, m_s.

8. $\Psi = \Psi(1, 2, 3)$ jest funkcja falową opisującą pewien układ trzech elektronów , gdzie $1 \equiv (x_1, y_1, z_1, \mu_1)$ symbolizuje zbiór współrzędnych przestrzennych i spinowych elektronu 1, itd. Która z poniższych równości *jest nieprawdziwa*?

   a) $\Psi(3, 1, 2) = -\Psi(1, 2, 3)$, b) $\Psi(1, 3, 2) = -\Psi(1, 2, 3)$, c) $\Psi(3, 2, 1) = -\Psi(1, 2, 3)$,
   d) $\Psi(2, 1, 3) = \Psi(1, 3, 2)$.