

TEST 2

1. Ortogonalne i znormalizowane funkcje f_1 i f_2 są funkcjami własnymi operatora $\hat{\alpha}$, przy czym: $\hat{\alpha} f_1 = 1.05 f_1$ i $\hat{\alpha} f_2 = 2.41 f_2$. Stan pewnej cząstki opisuje znormalizowana funkcja falowa $\Psi = \frac{1}{2} f_1 + \sqrt{\frac{3}{2}} f_2$. Jakie jest prawdopodobieństwo, że w wyniku pomiaru zmiennej dynamicznej A , której odpowiada operator $\hat{\alpha}$ otrzymana zostanie wartość 2.41?
2. Dlaczego funkcjami falowymi mogą być tylko takie rozwiązania równania Schrodingera dla danego układu, które są funkcjami ciągłymi?
3. Proszę wskazać stwierdzenia prawdziwe:
 - a) różnice między kolejnymi poziomami energetycznymi dla cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału rosną w miarę wzrostu energii
 - b) energia cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału wzrośnie trzykrotnie, kiedy długość pudła wzrośnie dziewięciokrotnie
 - c) energia stanu podstawowego cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału wzrośnie, kiedy zmaleje masa cząstki
 - d) dozwolone wartości liczby kwantowej n , od której zależy energia cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału, to 1, 2, 3, 4...
4. Czy funkcja: $\Psi(x) = \sqrt{\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi x}{2}$ może opisywać stan cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału o długości $L=4$, jeśli dla $x < 0$ i dla $x > 4$ cząstka ta napotyka nieskończenie wielką barierę potencjału, natomiast dla $0 \leq x \leq 4$ energia potencjalna cząstki wynosi 0? Odpowiedź uzasadnić. Jeśli tak, to jaka energia odpowiada stanowi, opisywanemu przez tę funkcję falową? Podać wyrażenie, przyjmując, że masa cząstki wynosi m .
5. Naszkicować wykres gęstości prawdopodobieństwa dla stanu podstawowego cząstki, poruszającej się wzdłuż osi x w jednowymiarowym pudle potencjału, jeśli energia potencjalna cząstki $V(x)=0$ dla $0 \leq x \leq 2$, a dla $x < 0$ i dla $x > 2$ cząstka napotyka nieskończenie wielką barierę potencjału. Wskazać, które z poniższych stwierdzeń dotyczących tej cząstki są prawdziwe:
 - a) prawdopodobieństwo znalezienia cząstki między $x=1.2$ a $x=2$ jest mniejsze od 0.5
 - b) prawdopodobieństwo znalezienia cząstki między $x=0$ a $x=0.5$ jest równe prawdopodobieństwu znalezienia cząstki między $x=1.5$ a $x=2$
 - c) prawdopodobieństwo znalezienia cząstki między $x=1.0$ a $x=1.5$ jest równe prawdopodobieństwu znalezienia cząstki między $x=1.5$ a $x=2$
 - d) prawdopodobieństwo znalezienia cząstki między $x=0.5$ a $x=1.5$ jest dwa razy większe niż prawdopodobieństwo znalezienia cząstki między $x=1$ a $x=1.5$

TEST 3

1. Zakładając, że do opisu 4 elektronów π w cząsteczce butadienu $H_2C=CH-CH=CH_2$ można zastosować model jednowymiarowego pudła potencjału o długości $4l$, gdzie l jest długością wiązania CC (zakładamy, że wszystkie wiązania CC są jednakowej długości oraz że oddziaływanie między elektronami można pominąć), podać wyrażenie na energię najniższego poziomu, który nie jest zajęty w stanie podstawowym tej cząsteczki. Masę elektronu oznaczyć m_e .

2. Funkcja falowa Ψ_1 , opisująca pierwszy stan wzbudzony jednowymiarowego kwantowego oscylatora harmonicznego o masie m poruszającego się wzdłuż osi x , ma postać

$$\Psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{2} y e^{-\frac{y^2}{2}}, \text{ gdzie } y = \sqrt{\alpha} x, \text{ a } \alpha = 2\pi \frac{\sqrt{km}}{h}, \text{ przy czym } k \text{ oznacza stałą siłową}$$

oscylatora. Proszę naszkicować wykres tej funkcji oraz (osobno) wykres jej kwadratu. Jaka jest wartość energii kwantowego oscylatora harmonicznego w tym stanie? Objaśnić stosowane symbole.

3. Proszę wskazać stwierdzenia prawdziwe:
 - a) Energia drgań zerowych kwantowego oscylatora harmonicznego jest równa połowie różnicy między energią pierwszego stanu wzbudzonego a energią stanu podstawowego dla tego układu.
 - b) W stanie podstawowym kwantowego oscylatora harmonicznego największą wartość ma gęstość prawdopodobieństwa znalezienia tej cząstki w położeniu równowagi.
 - c) Dwukrotne zwiększenie stałej siłowej oscylatora harmonicznego spowoduje dwukrotne zmniejszenie jego energii drgań zerowych
 - d) Różnica między energią piątego a energią czwartego stanu wzbudzonego oscylatora harmonicznego jest równa różnicy między energią drugiego a energią pierwszego stanu wzbudzonego tego oscylatora.

TEST 4

1. Stan rotatora sztywnego opisuje funkcja $Y_2^{-1}(\vartheta, \varphi)$, gdzie dolny indeks odpowiada wartości liczby kwantowej J , a górny indeks wartości liczby kwantowej M . Jaką wartość ma kwadrat momentu pędu, a jaką składowa L_z momentu pędu tego rotatora?
2. Proszę wskazać, które stwierdzenia są prawdziwe (P), a które fałszywe (F):
 - a) stopień degeneracji poziomu energetycznego rotatora sztywnego o energii E_3 (gdzie 3 jest wartością liczby kwantowej rotacji J), czyli liczba stanów rotatora sztywnego o energii równej E_3 , wynosi 7.
 - b) funkcja $Y_4^2(\vartheta, \varphi)$ opisuje stan rotatora sztywnego o energii równej $3\hbar^2/I$, gdzie \hbar oznacza wartość stałej Plancka, podzielonej przez 2π , a I moment bezwładności rotatora
 - c) różnica energii między poziomem energetycznym E_2 a poziomem energetycznym E_1 rotatora sztywnego jest większa od różnicy między E_1 a E_0
 - d) funkcja $Y_3^2(\vartheta, \varphi)$ opisuje stan rotatora sztywnego o takiej samej energii jak energia stanu opisywanego przez funkcję $Y_2^2(\vartheta, \varphi)$

TEST 5

1. Jak zmieni się (wzrośnie czy zmaleje i o jaki czynnik z dokładnością do 1 cyfry znaczącej) różnica energii między dwoma najniższymi poziomami rotatora sztywnego, który tworzą dwie cząstki o masach $m_1 = u$ i $m_2 = 40 \cdot u$, których odległość jest równa R , gdzie u jest jednostką masy, jeśli masa m_1 wzrośnie dwukrotnie, a masa m_2 nie zmieni się?
2. Na osobnych rysunkach narysować wykresy orbitali $2s$ i $2p_z$ oraz wykresy odpowiadającej im gęstości prawdopodobieństwa i radialnej gęstości prawdopodobieństwa.
3. Podać przykład jonu wodoropodobnego i postać operatora energii potencjalnej dla tego jonu.

TEST 6

1. Naszpicować przekroje konturów orbitali $2p_z$ oraz $3d_{yz}$ atomu wodoru (na osobnych rysunkach). Proszę pamiętać o właściwym oznaczeniu osi.
2. Określić krotność degeneracji poziomu energetycznego jonu Li^{2+} o energii równej $-\frac{1}{2}$ hartree. Podać wartości liczb kwantowych głównej n , pobocznej l i magnetycznej m dla wszystkich orbitali opisujących stany jonu Li^{2+} o takiej energii
3. Podać, jakie wartości własne hamiltonianu oraz operatorów kwadratu orbitalnego momentu pędu i składowej L_z momentu pędu odpowiadają orbitalom $2p_z$, $4d_{xy}$ i $3d_{3z^2-r^2}$. Wartości własne operatorów można podać w dowolnych jednostkach, ale trzeba wyjaśnić, jakie jednostki zostały użyte.

TEST 7

1. Wskaż, które stwierdzenie jest prawdziwe (P), a które fałszywe (F).
 - a) do skonstruowania funkcji falowej opisującej stan podstawowy atomu neonu w metodzie RHF (Restricted Hartree-Fock, czyli ograniczonej metodzie Hartree-Focka) potrzeba 10 orbitali
 - b) kiedy do opisu stanu atomu wieloelektronowego stosowana jest funkcja falowa metody Hartree-Focka, to spełniony jest zakaz Pauliego dla opisywanego układu
 - c) dla dużych odległości od jądra wartości funkcji Gaussa, która najlepiej przybliża orbital $1s$ atomu wodoru, maleją szybciej niż wartości tego orbitalu
 - d) energia obliczona metoda Hartree-Focka dla dowolnego układu wieloelektronowego jest wyższa od dokładnej energii dla tego układu
2. W wyniku obliczeń metodą Hartree-Focka otrzymano dla zajętych orbitali pewnego atomu następujące wartości energii orbitalnych (w hartree): -118.600, -12.318, -9.569, -9.569, -9.569, -1.274, -0.588, -0.588, -0.588. Ile wynosi w przybliżeniu pierwsza energia jonizacji tego atomu, czyli najmniejsza energia potrzebna do oderwania elektronu od atomu?
3. Wyjaśnić krótko, dlaczego do rozwiązywania równań Hartree-Focka stosowana jest metoda pola samouzgodnionego (SCF), czyli metoda iteracyjna (iteracja, to kolejne powtórzenie danej operacji odniesione do rezultatu poprzedniego jej wykonania).
4. Określić term podstawowy i podstawowy poziom energetyczny (zależny od liczby kwantowej J) dla jonu C^+ .
5. Wyznaczyć wszystkie termy i poziomy energetyczne dla konfiguracji $2p^1 3p^1$. Wskazać podstawowy term i poziom energetyczny i określić krotność ich degeneracji

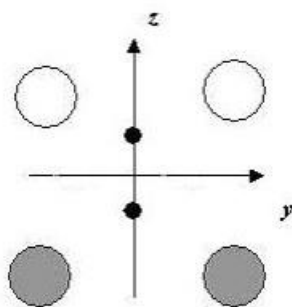
TEST 8

1. Wyjaśnić, dla jakich odległości od jądra występują największe różnice między wartościami orbitalu $1s$ atomu wodoru a wartościami przybliżającej ten orbital kombinacji liniowej funkcji Gaussa i na czym te różnice polegają.
2. Naszpicować schemat powstawania i kontury orbitali molekularnych dla cząsteczki homojądrowej: wiążącego σ_{2p} i antywiążącego σ_{2p}^* . Przyjąć, że osią wiązania jest oś z . Określić symetrię każdego z orbitali molekularnych względem środka symetrii (g czy u).

3. Podać konfigurację elektronową i narysować diagram rozmieszczenia elektronów na orbitalach molekularnych dla stanu podstawowego jonu molekularnego O_2^{2-} . Określić term molekularny dla stanu podstawowego tego jonu. Wyjaśnić, czy do zerwania wiązania w tym jonie potrzebna jest większa czy mniejsza energia niż do zerwania wiązania w cząsteczce O_2 .

TEST 9

1. Cząsteczce etenu odpowiada grupa symetrii D_{2h} . Na rysunku przedstawiono orbital otrzymany jako kombinacja liniowa czterech orbitali 1s atomów wodoru.



Zacieniony kontur orbitalu oznacza, że współczynnik, przez który pomnożony jest ten orbital ma znak ujemny. Czarne kółka oznaczają położenie atomów węgla. Oś x jest prostopadła do płaszczyzny rysunku i skierowana do obserwatora. Postępując się załączoną tabelą dla grupy D_{2h} przypisać przedstawionemu na rysunku orbitalowi symbol określający jego symetrię. Odpowiedź uzasadnić. W poniższej tabeli symbol C_2 oznacza obrót o 180° wokół osi, wskazanej w nawiasie, σ oznacza odbicie w płaszczyźnie, wskazanej w nawiasie, i oznacza przekształcenie przez środek symetrii (inwersję), a E – tożsamość (czyli brak jakiegokolwiek przekształcenia).

D_{2h}	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

2. Wskaż stwierdzenia prawdziwe (P) i fałszywe(F):

- orbitale zhybrydowane są kombinacjami liniowymi orbitali atomowych tego samego atomu różniących się wartością pobocznej liczby kwantowej
- kąt między wiązaniami w cząsteczce amoniaku można przewidzieć z błędem mniejszym niż 10° , przypisując atomowi azotu hybrydyzację sp^2 .
- kierunki wiązań w cząsteczce etanu można przewidzieć, przypisując atomowi węgla hybrydyzację sp^3 .
- całkowity rozkład gęstości elektronowej odpowiadający czterem pojedynczo obsadzonym orbitalom zhybrydowanym typu sp^3 atomu węgla ma kształt sferyczny

TEST 10

- Zależność energii cząsteczki od współrzędnej R (dla pewnego zakresu R) dobrze przybliża wzór: $E(R) = -R^4 + 4R$. Pierwsza pochodna dla tej funkcji ma postać: $E'(R) = -4R^3 + 4$, a jej druga pochodna $E''(R) = -12R^2$. Dla jakiej wartości współrzędnej R krzywa ta ma ekstremum i czy jest to minimum czy maksimum?
- Czy i jak różni się energia drgań zerowych cząsteczki wodoru H_2 od energii drgań zerowych cząsteczki D_2 (gdzie D oznacza izotop wodoru 2_1H)?

Test 11

- Wyjaśnić, w jaki sposób należy sprawdzić, czy znaleziony punkt stacjonarny na hiperpowierzchni energii potencjalnej dla cząsteczki wieloatomowej odpowiada minimum.
- Czy metody teorii funkcjonału gęstości (DFT) są metodami wariacyjnymi?