

TEST 1

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 $\Psi = \frac{1}{2} f_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} f_2$. 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 Schrödingera dla danego układu, które są funkcjami ciągłymi?

TEST 2

1. 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...
2. Czy funkcja: $\Psi(x) = \sqrt{\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi \cdot x}{2}$ 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).

TEST 3

1. Narysować 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 $x=1.5$
2. 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 .

TEST 4

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

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

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

2. Proszę wskazać stwierdzenia prawdziwe:
- Energia drgań zerowych kwantowego oscylatora harmonicznego jest równa połowie różnicy między energią pierwszego stanu wzbudzonego a energią stanu podstawowego dla tego układu.
 - W stanie podstawowym kwantowego oscylatora harmonicznego największą wartość ma gęstość prawdopodobieństwa znalezienia tej cząstki w położeniu równowagi.
 - Dwukrotne zwiększenie stałej siłowej oscylatora harmonicznego spowoduje dwukrotne zmniejszenie jego energii drgań zerowych
 - 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 5

- Stan rotatora sztywnego opisuje funkcja $Y_2^{-1}(\theta, \varphi)$, gdzie dolny indeks odpowiada wartości liczby kwantowej J , a górny indeks wartości liczby kwantowej M . Jaką wartość ma kwadrat momentu pędu, a jaką składowa z momentu pędu tego rotatora?
- Proszę wskazać stwierdzenia prawdziwe:
 - 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.
 - funkcja $Y_4^2(\theta, \varphi)$ 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
 - różnica energii między poziomem energetycznym E_2 a poziomem energetycznym E_1 rotatora sztywnego jest większa od różnicy między E_1 a E_0
 - funkcja $Y_3^2(\theta, \varphi)$ opisuje stan rotatora sztywnego o takiej samej energii jak energia stanu opisywanego przez funkcję $Y_2^2(\theta, \varphi)$

TEST 6

1. Naszycować przekroje konturów orbitali $2p_z$ oraz $3d_{yz}$ atomu wodoru (na osobnych rysunkach). Proszę pamiętać o właściwym oznaczeniu osi. Podać, jakie wartości własne hamiltonianu oraz operatora kwadratu orbitalnego momentu pędu odpowiadają tym orbitalom. Wartości własne operatorów można podać w dowolnych jednostkach, ale trzeba wyjaśnić, jakie jednostki zostały użyte.
2. Dla orbitali $2s$ i $2p_z$ narysować wykresy odpowiadającej im radialnej gęstości prawdopodobieństwa.

Wskazówka: $2s = N_{2s} e^{-r/2a_0} (2 - \frac{r}{a_0})$, $2p_z = N_{2p} e^{-r/2a_0} r \cos\theta$; gdzie N_{2s} i N_{2p} to czynniki normalizacyjne.

TEST 7

1. Wskaż stwierdzenia prawdziwe.
 - 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. Określić term podstawowy i poziom podstawowy dla jonu C^+ .

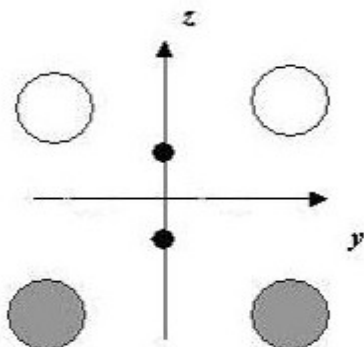
TEST 8

1. 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?
2. Wyjaśnij 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).

TEST 9

1. Naszycować 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).
2. 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 10



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

- 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 11

1. 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?
2. Czy i jak różni się energia drgań zerowych cząsteczki wodoru H_2 od energii drgań zerowych cząsteczki D_2 (gdzie D oznacza 2_1H)?