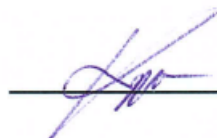


Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Кузько Андрей Евгеньевич
Должность: Заведующий кафедрой
Дата подписания: 12.09.2023 16:18:10
Уникальный программный ключ:
72581f52caba063db3331b3cc54ec107395c8caf

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий кафедрой
НМО и ПФ



Кузько А.Е.

«13» мая 2022 г.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА
для текущего контроля успеваемости
и промежуточной аттестации обучающихся
по дисциплине

Квантовая химия
(наименование дисциплины)

04.03.01 Химия
(код и наименование ОПОП ВО)

Курск – 2022

1 ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ

1.1 ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

1 семестр

Тема № 1. **Введение.**

1. Квантовая химия и квантовая механика молекул как составные части квантовой теории вещества.
2. Предмет, методы, цели и задачи квантовой химии.
3. История и основные этапы становления и развития квантовой химии, ее современное состояние и достижения.

Тема № 2 **Квантово механическое рассмотрение атома водорода.**

1. Уравнение Шредингера в сферических координатах. Решения угловых и радиального уравнений.
2. Квантовые числа атома водорода. Волновые функции атома водорода.
3. Расчет различных свойств водородоподобных атомов.

Тема № 3. **Строение атома**

1. Водородоподобные атомы. Атомные орбитали водородоподобного атома.
2. Спин электрона. Многоэлектронные атомы.

Тема № 4. **Гармонический осциллятор.**

1. Гармонический осциллятор, его собственные функции и собственные значения энергии.
2. Трехмерный изотропный гармонический осциллятор.
3. Ангармонический осциллятор

Тема № 5. **Общие принципы, касающиеся решения молекулярных задач.**

1. Молекулярное уравнение Шредингера: стационарное, отделение переменных центра масс.
2. Вращение молекулы как целого.

Тема № 6. **Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи**

1. Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи и теория возмущений, разновидности гамильтониана.
2. Выход за рамки адиабатического приближения.
3. Электронное волновое уравнение (одноэлектронный подход).

Тема № 7 **Одноэлектронное приближение**

1. Метод самосогласованного поля (одноконфигурационное приближение; уравнения Хартри-Фока, их разновидности, энергия и плотность).
2. Метод самосогласованного поля и общие свойства орбиталей.
3. Электронное волновое уравнение (одноэлектронный подход)..

Тема № 8 **Метод Хартри-Фока Роотхана.**

1. Аппроксимации атомных орбиталей, орбитали Слэтера-Зенера.
2. Силы в молекулах, теорема Гельмана-Фейнмана.
3. Теорема вириала и природа химической связи.

Тема № 9 **Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.**

1. Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.
2. Реакционные и натуральные орбитали, в том числе связанные.
3. Простейший метод Хюккеля. Пи-электронное приближение, метод орбиталей Хюккеля(МОХ).
4. Метод Хюккеля и теория возмущений

Тема № 10 **Метод молекулярных орбиталей**

1. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей.
2. Уточнения метода Хартри-Фока-Рутаана.
3. Молекула H_2 в МОЛКАО. Симметрия волновых функций, орбиталей

Тема № 11 **Движение ядер.**

1. Потенциальные поверхности и симметрия.
2. Электронно-колебательное взаимодействие.

Тема № 12 **Химическая связь**

1. О природе химической связи.
2. Межмолекулярное взаимодействие и химическая связь в конденсированных состояниях.
3. Атомы в молекулах

Тема № 13 **Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону**

1. Электронные, колебательные и вращательные уровни молекул.
2. Многоатомные молекулы и дипольные моменты, поляризуемость, магнитные моменты.
3. Межмолекулярные силы (понятие о силах Ван-дер-Ваальса).

Тема №14 **Неразличимость (тождественность) одинаковых микро-частиц.**

1. Симметричная и антисимметричная волновые функции.
2. Бозоны и фермионы. Элементы статистики Бозе-Эйнштейна и Ферми -Дикара.

Тема №15 **Электронные, колебательные состояния твердых тел**

1. Периодичность потенциала одноэлектронной волновой функции кристаллической решетки.
2. Понятие о зонах Бриллюэна. Экситоны. Акустические и оптические ветви спектра кристаллической решетки.
3. Понятие о нормальных колебаниях, их функция распределения по частотам.
4. Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.

Тема № 16 **Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.**

1. Характеристическая температура. Понятие о фононах.
2. Заполнение энергетических зон в кристалле. Зонные модели полупроводников, диэлектриков и металлов.
3. Собственная и примесная проводимость.
4. Понятие о сверхпроводимости.

Тема №17 **Метод конфигурационного взаимодействия**

1. Алгоритм вычислений. Метод валентных схем (ВС), спиновые функции для S^2 и S_z , диаграммы Румера
2. Молекула водорода. Молекула H_2 в варианте МОЛКАО.
3. Симметрия волновых функций и орбиталей.

Тема №18 **Полуэмпирические методы квантовой химии**

1. Полуэмпирические методы квантовой химии в прилбл. НДП (Нулевое дифференциальное перекрывание).
2. Валентное приближение, НДП и инвариантность состояний молекулярных орбит.
3. конфигурационное взаимодействие, валентное состояние.

Шкала оценивания: 5-балльная.

Критерии оценивания:

5 баллов (или оценка «отлично») выставляется обучающемуся, если он принимает активное участие в беседе по большинству обсуждаемых вопросов (в том числе самых сложных); демонстрирует сформированную способность к диалогическому мышлению, проявляет уважение и интерес к иным мнениям; владеет глубокими (в том числе дополнительными) знаниями по существу обсуждаемых вопросов, ораторскими способностями и правилами ведения полемики; строит логичные, аргументированные, точные и лаконичные высказывания, сопровождаемые яркими примерами; легко и заинтересованно откликается на неожиданные ракурсы беседы; не нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

4 балла (или оценка «хорошо») выставляется обучающемуся, если он принимает участие в обсуждении не менее 50% дискуссионных вопросов; проявляет уважение и интерес к иным мнениям,

доказательно и корректно защищает свое мнение; владеет хорошими знаниями вопросов, в обсуждении которых принимает участие; умеет не столько вести полемику, сколько участвовать в ней; строит логичные, аргументированные высказывания, сопровождаемые подходящими примерами; не всегда откликается на неожиданные ракурсы беседы; не нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

3 балла (или оценка «удовлетворительно») выставляется обучающемуся, если он принимает участие в беседе по одному-двум наиболее простым обсуждаемым вопросам; корректно выслушивает иные мнения; неуверенно ориентируется в содержании обсуждаемых вопросов, порой допуская ошибки; в полемике предпочитает занимать позицию заинтересованного слушателя; строит краткие, но в целом логичные высказывания, сопровождаемые наиболее очевидными примерами; теряется при возникновении неожиданных ракурсов беседы и в этом случае нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

2 балла (или оценка «неудовлетворительно») выставляется обучающемуся, если он не владеет содержанием обсуждаемых вопросов или допускает грубые ошибки; пассивен в обмене мнениями или вообще не участвует в дискуссии; затрудняется в построении монологического высказывания и (или) допускает ошибочные высказывания; постоянно нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

2 ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ

2.1 БАНК ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ В ТЕСТОВОЙ ФОРМЕ

1. Радиальная часть волновой функции определяется квантовым числом (квантовыми числами)

- | | | |
|-----------|-----------|-----------|
| 1. n, l | 2. l | 3. m, l |
| 4. s | 5. l, s | |

2. Угловая часть волновой функции определяется квантовыми числами

- | | | |
|-------------|-----------|-----------|
| 1. (l, m) | 2. n, m | 3. n, s |
| 4. m, s | 5. L, s | |

3. Интеграл от произведения двух атомных радиальных функций $R_{n,l}$ с различными значениями n , полученных в результате точного решения уравнения Шредингера

- | | | |
|------------------------|----------------------------------|-------------------|
| 1. всегда равен нулю | 2. зависит от условий нормировки | 3. всегда равно 1 |
| 4. равен бесконечности | 5. зависит от значений l | |

4. В качестве единицы массы в атомной системе единиц (системе Хартри) используется

1. масса электрона
2. масса протона
3. масса нейтрона
4. масса атома водорода (протия)
5. $1/12$ массы атома углерода ^{12}C

5. Если изменить знак волновой функции (умножить волновую функцию на -1), полная энергия системы:

1. не изменится
2. увеличится
3. уменьшится
4. изменится в зависимости от рассматриваемой системы
5. изменится непредсказуемым образом

6. Молекулярная орбиталь это

1. одноэлектронная волновая функция, получаемая при решении уравнений Хартри-Фока
2. область пространства, в которой электрон проводит более 90 % времени
3. область пространства, в которой вероятность локализации электрона равна 95 %
4. полная электронная волновая функция молекулы
5. область пространства, в которой вероятность локализации электрона равна 50 %

7. В методе Хартри-Фока электронная корреляция в основном не учитывается из-за

1. использования приближения независимых частиц
2. численных ошибок метода
3. использования вариационного принципа
4. ограниченного числа функций в базисном наборе
5. отсутствия вариационного принципа при расчете энергии

8. Процесс внутреннего вращения в молекуле этана представляет собой

1. переход системы из одного минимума на ППЭ в другой
2. переход системы на соседнюю ППЭ
3. изменение формы ППЭ
4. процесс, не приводящий к движению изображающей точки системы по ППЭ
5. переход системы на соседнюю ППЭ и изменение формы ППЭ

9. Число атомных орбиталей в базисе для расчета методом Хюккеля молекулы бутадиена ($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$)

- | | | |
|------|------|-------|
| 1. 4 | 2. 6 | 3. 12 |
| 4. 2 | 5. 8 | |

10. Число атомных орбиталей, используемых в расчете аллильного радикала ($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2\cdot$) методом Хюккеля

- | | | |
|------|------|------|
| 1. 3 | 2. 4 | 3. 6 |
| 4. 8 | | 5. 2 |

11. Число узлов несвязывающей МО в расчете аллильного радикала ($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2\cdot$) методом молекулярных орбиталей Хюккеля

- | | | |
|------|------|------|
| 1. 1 | 2. 3 | 3. 2 |
| 4. 5 | | 5. 6 |

12. Число вакантных МО в расчете молекулы нафталина методом молекулярных орбиталей Хюккеля

1. $3 \rightarrow 1 \rightarrow 2$

2. $3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$

3. $2 \rightarrow 1 \rightarrow 3$

4. $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$

5. $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$

21. В общем случае поправка к энергии первого порядка по теории возмущений

1. $E = \langle \psi^{(0)} | H^{(1)} | \psi^{(0)} \rangle$

2. $E = 0$

3. всегда положительна

4. всегда отрицательна

5. $E = \langle \psi^{(1)} | H^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle$

22. Первая поправка к энергии по теории возмущений к методу Хартри-Фока

1. равна нулю

2. описывает более половины корреляционной энергии

3. всегда отрицательна

4. всегда положительна

5. описывает около 90% корреляционной энергии

23. Метод Хартри-Фока-Рутана отличается от метода Хартри

1. введением приближения самосогласованного поля и приближения МО ЛКАО

2. более полным учётом электронного отталкивания

3. учётом интеграла перекрывания

4. инвариантностью относительно ортогональных преобразований МО

5. учетом кинетической энергии атомных ядер

24. В основе процедуры решения уравнений метода Хартри-Фока-Рутана лежит (лежат)

1. вариационный принцип

2. аналитические формулы

3. табулированные значения решений аналогичных систем

4. теория возмущений

5. эмпирические формулы и табулированные значения решений аналогичных систем

25. Метод Хартри-Фока-Рутана отличается от метода Хартри-Фока

1. введением приближения МО ЛКАО

2. более полным учётом электронного отталкивания

3. введением приближения самосогласованного поля

4. учётом интеграла перекрывания

5. инвариантностью относительно ортогональных преобразований МО

26. Уравнения Хартри-Фока-Рутана решаются

1. приближенно, численными методами

2. аналитически

3. не имеют решений

4. имеют бесконечное множество решений

5. эмпирическими методами на основе решений аналогичных систем

27. Гибридные орбитали — результат ортогонального преобразования канонических орбиталей. Поэтому при гибридизации

1. энергия системы не изменяется
2. повышается энергия системы
3. понижается энергия системы
4. изменяется симметрия ядерной конфигурации
5. изменяется область перекрытия электронных оболочек

28. Тип гибридизации в молекуле SF₆

1. d²sp³
2. sp
3. sp²
4. sp³
5. dsp²

29. При переходе от канонических орбиталей к sp³-гибридизованным орбиталям в молекуле метана

1. энергия системы не изменяется
2. повышается энергия системы
3. понижается энергия системы
4. увеличивается прочность связей С—Н за счет более полного перекрытия орбиталей
5. изменяется симметрия ядерной конфигурации

30. Полученные методом Хартри-Фока колебательные частоты молекул обычно завышены по сравнению с экспериментальными в результате

1. использования гармонического приближения и недостаточного учета электронной корреляции
2. использования ангармонического приближения
3. систематических ошибок вычисления двухэлектронных интегралов
4. недостаточно точной параметризации
5. неточности расчета коэффициента ангармоничности

31. Молекулярный электростатический потенциал характеризует энергию взаимодействия

1. молекулы и единичного положительного заряда
2. молекулярного катиона с электроном
3. молекулярного аниона с протоном
4. ядер и электронов в молекуле
5. молекулы и частиц растворителя

32. Молекулярный электростатический потенциал определяется

1. геометрией молекулы, зарядами ядер и электронной плотностью
2. дипольным моментом и электронной плотностью

3. зарядами ядер, электронной плотностью и дипольным моментом
4. геометрией молекулы и дипольным моментом
5. величиной дипольного момента и симметрией молекулы

33. Рассчитанные дипольные моменты равны нулю в молекулах

1. $\text{CH}_3\text{-CH}_3$
2. HNO_3
3. H_2O
4. цис- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
5. O_3

34. Рассчитанные дипольные моменты равны нулю в молекулах

1. транс- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
2. HNO_3
3. H_2O
4. цис- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
5. O_3

35. Прямой квантово-химический расчет позволяет получать следующие свойства

1. частоты молекулярных колебаний и заряды на атомах
2. энергию Гиббса
3. теплоту образования вещества
4. теплоту сублимации и энергию Гиббса
5. энтропию и теплоту образования вещества

36. При решении квантово-механической задачи вариационным методом минимизируется

1. электронная энергия
2. множители Лагранжа
3. межэлектронное отталкивание
4. коэффициенты разложения МО по АО
5. множители Лагранжа и коэффициенты разложения МО по АО

37. Число членов в нерелятивистском гамильтониане для атома лития при неподвижном ядре

- | | | |
|------|------|------|
| 1. 3 | 2. 5 | 3. 6 |
| 4. 2 | 5. 8 | |

38. Число членов в нерелятивистском гамильтониане для атома водорода при неподвижном ядре

- | | | |
|------|------|------|
| 1. 3 | 2. 6 | 3. 9 |
| 4. 8 | 5. 2 | |

39. Если $\{E_i\}$ — набор собственных значений гамильтониана \hat{H} в уравнении $\hat{H}\Psi_i = E_i\Psi_i$, то

1. E_i — энергия системы в i -м состоянии

2. $\sum_{i=0}^N E_i$ — полная энергия системы

3. E_0 — энергия системы, а E_i при $i \neq 0$ — величины, не имеющие физического смысла

4. $\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N E_i$ — полная энергия системы

5. E_i — кинетическая энергия системы в i -м состоянии

40. Детерминант Слейтера имеет вид $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$ для атома

1. He
2. H
3. Li
4. Na
5. Ba

41. Размерность детерминанта Слейтера для атома лития

1. 3
2. 4
3. 6
4. 2
5. 8

42. Размерность детерминанта Слейтера для молекулы воды

1. 10
2. 6
3. 4
4. 8
5. 3

43. Размерность детерминанта Слейтера для атома углерода

1. 6
2. 10
3. 8
4. 3
5. 4

44. Число связывающих молекулярных орбиталей (МО) в молекуле LiH

1. 1
2. 3
3. 6
4. 4
5. 2

45. Число неспаренных электронов в молекуле B_2

1. 2
2. 3
3. 5
4. 6
5. 8

46. Z — атомный номер атома, Q — число электронов, приписываемых атому.

Эффективный заряд атома q равен

1. $Z-Q$
2. $-Z$
3. Q
4. $Z+Q$
5. $+Z$

47. Матрица плотности

$$P_{\mu\nu} = \sum_i c_{i\mu} c_{i\nu}$$

1. рассчитывается как матрица из элементов разложения МО) ($c_{\alpha\beta}$ — коэффициенты в

2. измеряется экспериментально из данных рентгеноструктурного анализа
3. получается путем дифференцирования лапласиана ЭП
4. рассчитывается путем дифференцирования поверхности потенциальной энергии
5. рассчитывается как матрица, элементами которой являются заряды и порядки связей

48. При образовании химической связи стабильность молекулы в общем случае обеспечивается

1. минимизацией полной энергии системы
2. повышением электронной плотности в пространство между атомами
3. понижением кинетической энергии ядер
4. минимизацией ядер-ядерного отталкивания
5. минимизацией электрон-электронного взаимодействия

49. При образовании химической связи стабильность молекулы в общем случае обеспечивается минимизацией

1. полной энергии системы
2. суммы кинетической и потенциальной энергии электронов
3. электрон-электронного взаимодействия
4. ядер-ядерного отталкивания
5. перераспределением электронной плотности

50. При решении квантово-химических задач традиционно учитывают взаимодействия

1. кулоновское
2. сильное
3. слабое
4. гравитационное
5. кулоновское и гравитационное

51. Собственное значение оператора \hat{S}^2 для атома, находящегося в триплетном электронном состоянии

- | | | |
|------|------|------|
| 1. 2 | 2. 3 | 3. 1 |
| 4. 5 | 5. 4 | |

52. Собственное значение оператора \hat{S}^2 для атома, находящегося в синглетном электронном состоянии

- | | | |
|------|------|------|
| 1. 0 | 2. 1 | 3. 2 |
| 4. 5 | 5. 3 | |

53. Выражение для электронного химического потенциала

1. $-1/2(I+A)$
2. $1/2(I+A)$
3. $A-I$
4. $I-A$
5. $I-A+1/2(I+A)$

54. В приближении Борна-Оппенгеймера в гамильтониан электронного уравнения входят следующие члены

1. оператор кинетической энергии электронов, оператор потенциальной энергии отталкивания электронов, оператор электростатического взаимодействия электронов с ядрами
2. только оператор кинетической энергии ядер и оператор потенциальной энергии отталкивания электронов
3. только оператор потенциальной энергии отталкивания электронов, оператор электростатического взаимодействия электронов с ядрами
4. оператор кинетической энергии электронов, оператор потенциальной энергии отталкивания электронов
5. оператор кинетической энергии электронов, оператор потенциальной энергии отталкивания электронов, оператор электростатического взаимодействия электронов с ядрами, оператор спиновых взаимодействий

55. Конформеры молекулы

1. различаются по положению изображающей точки на ППЭ, могут иметь разные химические свойства, имеют разное геометрическое строение
2. имеют разный состав, одинаковое геометрическое строение
3. одинаковое геометрическое строение, разные химические свойства
4. различаются по положению изображающей точки на ППЭ, имеют разный состав
5. могут иметь разные химические свойства, имеют разный состав

56. Электронная волновая функция метода ВС

1. является многоэлектронной, строится как линейная комбинация некоторых произведений наборов АО
2. строится как детерминант Слейтера
3. является многоэлектронной, строится как детерминант Слейтера
4. строится как произведение МО
5. является одноэлектронной

57. Расчеты методом Хартри-Фока-Рутана неверно предсказывают

1. потенциальные кривые гомолитической диссоциации молекул, . поверхности Ферми в металлах, энергии молекул в возбужденных электронных состояниях
2. геометрические параметры молекул

3. аналитические формулы
4. табулированные значения решений аналогичных систем
5. геометрические параметры молекул и табулированные значения решений аналогичных систем

58. Уравнение Хартри-Фока-Рутана

$$\sum_{\nu=1}^N c_{i\mu} (F_{\mu\nu} - E_i S_{\mu\nu}) = 0, \quad \mu = 1, 2, \dots, N$$

1. $\varphi_i(r) = \sum_{\mu} c_{i\mu} \chi_{\mu}(r)$
2. $P_{\mu\nu} = \sum_i c_{i\mu} c_{i\nu}$
3. $E = \langle \Psi^{(0)} | H^{(1)} | \Psi^{(0)} \rangle$
4. $E = \langle \Psi^{(1)} | H^{(1)} | \Psi^{(1)} \rangle$

59. Выражения для члена в гамильтониане, который описывает кинетическую энергию N электронов

$$\begin{array}{ll}
 1. \quad -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) & 2. \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i \neq j) \\
 3. \quad -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 & 4. \quad -\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j) \\
 & 5. \quad \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j)
 \end{array}$$

60. Определите результат действия оператора $\frac{d}{dx}$ на функцию $f(x) = x^5 + 3 \exp(x)$

1. $5x^4 + 3 \exp(x)$
2. $4x^5 + 3x \exp(x)$
3. $4x^3 + x \exp(x)$
4. $5x^4 - \exp(x)$
5. $5x^4$

61. Используя соотношение неопределенностей энергии и времени, определить естественную ширину $\Delta\lambda$ спектральной линии излучения атома при переходе его из возбужденного состояния в основное. Среднее время τ жизни атома в возбужденном состоянии принять равным 10^{-8} с, а длину волны λ излучения—равной 600 нм. Ответ указать в ангстремах.

$$\begin{array}{lll}
 1. \quad \Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c \tau} , & 2. \quad \Delta\lambda = \frac{\lambda}{2\pi \tau^2} , & 3. \quad \Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{c \tau} ,
 \end{array}$$

$$\Delta\lambda = 20 \text{ фм}$$

$$\Delta\lambda = 2000 \text{ фм}$$

$$\Delta\lambda = 50 \text{ фм}$$

$$4. \Delta\lambda = \frac{\lambda}{2\pi\tau},$$

$$\Delta\lambda = 200 \text{ фм}$$

$$5. \Delta\lambda = \frac{\lambda}{2\tau},$$

$$\Delta\lambda = 20 \text{ фм}$$

62. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ оценить низший энергетический уровень электрона в атоме водорода. Принять линейные размеры атома $l \approx 0,1 \text{ нм}$.

$$1. E_{\min} = \frac{2\hbar^2}{ml^2}, 15 \text{ эВ}$$

$$2. E_{\min} = \frac{2\hbar}{ml}, 115 \text{ эВ}$$

$$3. E_{\min} = \frac{\hbar}{ml}, 75 \text{ эВ}$$

$$4. E_{\min} = \frac{\hbar}{ml^2}, 0.75 \text{ эВ}$$

$$5. E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2ml^2}, 5 \text{ эВ}$$

63. Атом водорода находится в основном состоянии. Собственная волновая функция, описывающая состояние электрона в атоме, имеет вид $\psi(r) = Ce^{-r/a}$, где C —некоторая постоянная. Найти из условия нормировки постоянную C .

$$1. C = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}},$$

$$2. C = \frac{1}{\sqrt{a^3}},$$

$$3. C = \frac{\pi}{\sqrt{a^3}}$$

$$4. C = \frac{2\pi}{a^{\frac{3}{2}}},$$

$$5. C = \frac{a^3}{\sqrt{\pi}}$$

64. Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислить вероятность ω_1 того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой радиуса, равного борзовскому радиусу a . Волновую функцию считать известной: $\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$.

$$1. 0.324$$

$$2. 0.526$$

$$3. 0.92$$

$$4. 0.98$$

$$5. 1.00$$

65. Зависящая от угла φ угловая функция имеет вид $\Phi(\varphi) = Ce^{im\varphi}$. Используя условие нормировки, определить постоянную C .

$$1. C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

$$2. C = \frac{2}{\sqrt{\pi}},$$

$$3. C = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}},$$

$$4. C = \frac{1}{2\pi},$$

$$5. C = \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}}$$

66. Вычислить момент импульса \mathfrak{L}_l орбитального движения электрона, находящегося в атоме в s -состоянии.

$$1. 0$$

$$2. 1$$

$$3. \frac{1}{2}$$

$$4. 2$$

$$5. \frac{3}{2}$$

67. Определить возможные значения проекции момента импульса \mathfrak{L}_{l_z} орбитального движения электрона в атоме на направление внешнего магнитного поля. Электрон находится в d -состоянии.

1. $0, \pm \hbar, \pm 2\hbar$ 2. $0, \pm \hbar, \pm \frac{3}{2}\hbar$ 3. $1, \pm \hbar, \pm 2\hbar$
 4. $1, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$ 5. $0, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$

68. Используя принцип Паули, указать, какое максимальное число N_{max} электронов в атоме могут иметь одинаковыми следующие квантовые числа: n, l, m .

1. 2 2. 6 3. 8
 4. 1 5. 3

69. Заполненный электронный слой характеризуется квантовым числом $n = 3$. Указать число N электронов в этом слое, которые имеют одинаковые следующие квантовые числа: $m_s = +\frac{1}{2}$.

1. 9 2. 8 3. 12
 4. 2 5. 6

70. Найти число N электронов в атомах, у которых в основном состоянии заполнены: 1) K - и L -слои, $3s$ -оболочка и наполовину $3p$ -оболочка.

1. 15 2. 12 3. 10
 4. 6 5. 24

71. Определить энергию $E_{возб}$ возбуждения молекулы $HC1$ с нулевого колебательного энергетического уровня на первый, если известны собственная круговая частота $\omega = 5,63 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\gamma = 0,0201$.

1. $E_{возб} = \hbar \omega (1 - 2\gamma) = 0.356 \text{ эВ}$, 2. $E_{возб} = 2\hbar \omega (1 - 2\gamma) = 0.72 \text{ эВ}$
 3. $E_{возб} = \frac{1}{2} \hbar \omega (1 - 2\gamma) = 0.18 \text{ эВ}$, 4. $E_{возб} = \hbar \omega (1 + 2\gamma) = 0.831 \text{ эВ}$
 5. $E_{возб} = \frac{1}{2} \hbar \omega (1 + 2\gamma) = 0.573 \text{ эВ}$

72. Определить максимальную колебательную энергию E_{max} молекулы O_2 , для которой известны собственная круговая частота $\omega = 2,98 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\gamma = 9,46 \cdot 10^{-3}$.

1. 5.18 эВ 2. 15.2 эВ 3. 150 МэВ
 4. 3.26 эВ 5. 8 МэВ

73. Найти расстояние d между ядрами молекулы CN , если интервалы $\Delta \nu$ между соседними линиями чисто вращательного спектра испускания данной молекулы равны 29 см^{-1} .

1. 112 пм 2. 500 пм 3. 20 мкм

4. 20 нм

5. 500 мкм

74. Длины волн λ_1 и λ_2 двух соседних спектральных линии в чисто вращательном спектре молекулы HC1 соответственно равны 117 и 156 мкм. Вычислить вращательную постоянную (см^{-1}) для молекулы HC1 .

1. 10.7 см^{-1}

2. 233.3 см^{-1}

3. 156.3 см^{-1}

4. 0.7 см^{-1}

5. 2000 см^{-1}

75. Определить длину волны λ , соответствующую третьей спектральной линии в серии Бальмера.

1. 434 нм

2. 720 нм

3. 720 мкм

4. 434 мкм

5. 555 нм

76. Атом водорода в основном состоянии поглотил квант света с длиной волны $\lambda = 121,5$ нм. Определить радиус r электронной орбиты возбужденного атома водорода.

1. 212 нм

2. 520 нм

3. 220 мкм

4. 121 нм

5. 0.222 нм

77. Построить уравнение Шредингера для частицы, движущейся под действием квазиупругой силы $F = -kx$.

$$1. \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{kx^2}{2} \right) \psi = 0 \quad 2. \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{kx^2}{2} \right) \psi = 0 \quad 3. \frac{d\psi}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{kx^2}{2} \right) \psi = 0$$

$$4. \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - kx) \psi = 0 \quad 5. \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{kx^2}{2} \right) \psi = 0$$

78. При помощи правил Слэтера определите значения орбитальных экспонент $\xi = \frac{(Z - S)}{n^*}$ для 1s орбитали атома фтора, находящегося в основном состоянии.

1. $\xi_{1s} = 8.7$

2. $\xi_{1s} = 10.5$

3. $\xi_{1s} = 24$

4. $\xi_{1s} = 200$

5. $\xi_{1s} = -12$

79. Найти коммутатор операторов $x \frac{d}{dx}$ и x .

1. x

2. x^2

3. $x + 1$

4. $x^2 + 1$

5. 0

80. При помощи правил Слэтера определите значения орбитальных экспонент

4. 0.056

5. 137

87. Вычислить вращательную постоянную B для молекулы CO, если межъядерное расстояние $d = 113$ пм. Ответ выразить в миллиэлектрон-вольтах.

1. 0.238

2. 23.8

3. 238

4. 0.562

5. 1.5

88. Определить для молекулы HCl вращательные квантовые числа двух соседних уровней, разность энергий $\Delta E_{j+1, j}$ которых равна 7,86 мэВ.

1. 2 и 3

2. 3 и 4

3. 4 и 5

4. 7 и 8

5. 10 и 11

89. Для молекулы NO найти температуру T , при которой средняя кинетическая энергия поступательного движения молекулы равна энергии, необходимой для ее возбуждения на первый вращательный энергетический уровень.

1. 3.3 К

2. 33 К

3. 303 К

4. 12К

5. 80 К

90. Найти межъядерное расстояние d молекулы CO, если интервалы ΔE между соседними линиями чисто вращательного спектра испускания молекул CO равны 0,48 мэВ.

1. 113 пм

2. 113 нм

3. 113 мкм

4. 0.5 нм

5. 50 нм

91. Атом водорода, находившийся первоначально в основном состоянии, поглотил квант света с энергией $\varepsilon = 10,2$ эВ. Определить изменение момента импульса $\Delta \mathfrak{L}$ орбитального движения электрона. В возбужденном атоме электрон находится в p -состоянии.

1. $\frac{3}{2} \hbar$

2. $\frac{1}{2} \hbar$

3. $\frac{5}{2} \hbar$

4. \hbar

5. $2\hbar$

92. Электрон в атоме находится в f -состоянии. Найти орбитальный момент импульса \mathfrak{L} электрона и максимальное значение проекции момента импульса \mathfrak{L}_z на направление внешнего магнитного поля.

1. $\hbar \sqrt{12}$

2. $\hbar \sqrt{2}$

3. $\hbar \sqrt{3}$

4. $\hbar \sqrt{5}$

5. $\hbar \sqrt{7}$

93. Используя принцип Паули, указать, какое максимальное число N_{max} электронов в атоме могут иметь одинаковыми следующие квантовые числа: n, l, m ;

4. 0.122 пм

5. 0.5 мкм

100. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ оценить низший энергетический уровень электрона в атоме водорода. Принять линейные размеры атома $l \approx 0,1$ нм.

1. 15 эВ

2. 150 эВ

3. 31 эВ

4. 13 мэВ

5. 31 кэВ

Шкала оценивания результатов тестирования: в соответствии с действующей в университете балльно-рейтинговой системой оценивание результатов промежуточной аттестации обучающихся осуществляется в рамках 100-балльной шкалы, при этом максимальный балл по промежуточной аттестации обучающихся по очной форме обучения составляет 36 баллов, по очно-заочной и заочной формам обучения – 60 баллов (установлено положением П 02.016).

Максимальный балл за тестирование представляет собой разность двух чисел: максимального балла по промежуточной аттестации для данной формы обучения (36 или 60) и максимального балла за решение компетентностно-ориентированной задачи (6).

Балл, полученный обучающимся за тестирование, суммируется с баллом, выставленным ему за решение компетентностно-ориентированной задачи.

Общий балл по промежуточной аттестации суммируется с баллами, полученными обучающимся по результатам текущего контроля успеваемости в течение семестра; сумма баллов переводится в оценку по дихотомической шкале (для зачета) или в оценку по 5-балльной шкале (для экзамена) следующим образом:

Соответствие 100-балльной и дихотомической шкал

<i>Сумма баллов по 100-балльной шкале</i>	<i>Оценка по дихотомической шкале</i>
100–50	зачтено
49 и менее	не зачтено

Соответствие 100-балльной и 5-балльной шкал

<i>Сумма баллов по 100-балльной</i>	<i>Оценка по 5-балльной шкале</i>
-------------------------------------	-----------------------------------

<i>шкале</i>	
100–85	отлично
84–70	хорошо
69–50	удовлетворительно
49 и менее	неудовлетворительно

Критерии оценивания результатов тестирования:

Каждый вопрос (задание) в тестовой форме оценивается по дихотомической шкале: выполнено – **2 балла**, не выполнено – **0 баллов**.

2.2 КОМПЕТЕНТНОСТНО-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ ЗАДАЧИ

1. Электрон движется прямолинейно с постоянной скоростью 0,2 Мм/с. Определите магнитную индукцию поля, создаваемого электроном в точке, находящейся на расстоянии $r = 2$ нм от электрона и лежащей на прямой, проходящей через мгновенное положение электрона и составляющей угол 45° со скоростью движения электрона.
[$B = 566$ мкТл]
2. Определите циркуляцию вектора магнитной индукции по окружности, через центр которой перпендикулярно ее плоскости проходит бесконечно длинный прямолинейный провод по которому течет ток $I = 5$ А. [6,28 мкТл*м]
3. Плоскость проволочного витка площадь $S = 100$ см² и сопротивлением $R = 50$ Ом, находящего в однородном магнитном поле напряженность $H = 10$ кА/м, перпендикулярна линиям магнитной индукции. При повороте витка в магнитном поле отсчет гальванометра, замкнутого на виток, составляет 12,6 мкКл. Определите угол поворота витка. [60°]
4. Катушку индуктивностью $L = 0,6$ Гн подключают к источнику тока. Определите сопротивление катушки, если за время $t = 3$ с сила тока через катушку достигает 80% предельного значения. [322 мОм]
5. По круговому контуру радиусом $r = 40$ см, погруженному в жидкий кислород, течет ток $I = 1$ А. Определить намагниченность в центре этого контура. Магнитная восприимчивость жидкого кислорода $\chi = 3,4 \cdot 10^{-3}$. [4,25 мА/м]

6. Напряженность однородного магнитного поля в пластине равна 5 А/м. Определить магнитную индукцию поля, создаваемого молекулярными токами, если магнитная восприимчивость платины равна $3,6 \cdot 10^4$. [2,26 нТл]
7. Соленоид диаметром $d = 3$ см имеет однослойную обмотку из плотно прилегающих друг к другу витков алюминиевого провода ($\rho = 26$ нОм*м) диаметром $d_1 = 0,3$ мм. По соленоиду течет ток $I_0 = 0,5$ А. Определите количество электричества Q , протекающее по соленоиду, если его концы замкнуть. [42,7 мкКл]
8. Красная граница фотоэффекта для некоторого металла равна 500 нм. Определите максимальную скорость электронов, вырванных из этого металла светом с длиной волны 400 нм. [$v_{\max} = 468$ км/с]
9. Определите плотность ядерного вещества, выражаемую числом нуклонов в 1 см^3 , если в ядре с массовым числом A все нуклоны плотно упакованы в пределах его радиуса. [$N = 8,7 \cdot 10^{37} \text{ см}^{-3}$]
10. Определите массу изотопа, если изменение массы при образовании ядра ${}^{15}_7\text{N}$ составляет $0,2058 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$. [$m = 2,4909 \cdot 10^{-26} \text{ кг}$]
11. Определите энергию, выделяющуюся в результате реакции ${}^{23}_{12}\text{Mg} \rightarrow {}^{23}_{11}\text{Na} + {}^0_1e + {}^0_0\nu$. Массы нейтральных атомов магния и натрия соответственно равны $3,8184 \cdot 10^{-26} \text{ кг}$ и $3,8177 \cdot 10^{-26} \text{ кг}$. [2,91 МэВ]
12. При отрыве нейтрона от ядра гелия ${}^4_2\text{He}$ образуется ядро ${}^3_2\text{He}$. Определите энергию связи, которую необходимо для этого затратить. Массы нейтральных атомов ${}^4_2\text{He}$ и ${}^3_2\text{He}$ соответственно равны $6,6467 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$ и $5,0084 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$. [$E_{\text{св}} = 0,3303 \cdot 10^{-11} \text{ Дж} = 20,64 \text{ МэВ}$]
13. Определите высоту кулоновского потенциального барьера для α -частицы в ядре свинца ${}^{206}_{82}\text{Pb}$. [22,5 МэВ]
14. Пользуясь таблицей Менделеева и правилами смещения, определите, в какой элемент превращается ${}^{238}_{92}\text{U}$ после трех α - и двух β -распадов. [${}^{226}_{88}\text{Ra}$]
15. Определите, во сколько раз магнетон Бора (единица магнитного момента электрона) больше ядерного магнетона (единица магнитного момента ядра). [$\frac{\mu_{\text{Б}}}{\mu_{\text{Я}}} = 1835$]

16. Определите максимальную и минимальную энергии фотона в видимой серии спектра водорода (серии Бальмера). [$E_{max} = 3,41$ эВ; $E_{min} = 1,89$ эВ]

17. Определите: 1) частоту f вращения электрона, находящегося на первой боровской орбите; 2) эквивалентный ток. [1) $f = 6,58 \cdot 10^{15}$ Гц; 2) $I = 1,05$ мА]

18. Определите длину волны де Бройля для электрона, находящегося в атоме водорода на третьей боровской орбите. [$\lambda = 1$ нм]

19. Волновая функция, описывающая некоторую частицу, может быть представлена в виде $\psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right) \cdot E t}$. Покажите, что плотность вероятности нахождения частицы определяется только координатной ψ -функцией. [$\omega = |\psi(x)|^2$]

20. Электрон с энергией $E = 5$ эВ движется в положительном направлении оси x , встречая на своем пути прямоугольный потенциальный барьер высотой $U = 10$ эВ и шириной $l = 0,1$ нм. Определите коэффициент D прозрачности потенциального барьера. [$D = 0,1$]

21. Определите постоянную экранирования σ для L -серии рентгеновского излучения, если при переходе электрона в атоме вольфрама с M -оболочки на L -оболочку длина волны λ испущенного фотона составляет 140 пм. [$\sigma = 5,63$]

22. Применяя теорию Бора к мезоатому водорода (в мезоатоме водорода электрон заменен мюоном, заряд которого равен заряду электрона, а масса в 207 раз больше массы электрона), определите: 1) радиус первой орбиты мезоатома; 2) энергию ионизации мезоатома. [1) $r = 0,254$ нм; 2) $E_i = 2,8$ кэВ]

23. Воспользовавшись соотношением неопределенностей, оцените размытость энергетического уровня в атоме водорода: 1) для основного состояния; 2) для возбужденного состояния (время его жизни равно 10^{-8} с). [1) $\Delta E = 0$; 2) $\Delta E = 414$ нэВ]

Шкала оценивания решения компетентностно-ориентированной задачи: в соответствии с действующей в университете балльно-рейтинговой системой оценивание результатов промежуточной аттестации обучающихся осуществляется в рамках 100-балльной шкалы, при этом максимальный балл по промежу-

точной аттестации обучающихся по очной форме обучения составляет 36 баллов, по очно-заочной и заочной формам обучения – 60 (установлено положением П 02.016).

Максимальное количество баллов за решение компетентностно-ориентированной задачи – 6 баллов.

Балл, полученный обучающимся за решение компетентностно-ориентированной задачи, суммируется с баллом, выставленным ему по результатам тестирования.

Общий балл по промежуточной аттестации суммируется с баллами, полученными обучающимся по результатам текущего контроля успеваемости в течение семестра; сумма баллов переводится в оценку по дихотомической шкале (для зачета) или в оценку по 5-балльной шкале (для экзамена) следующим образом:

Соответствие 100-балльной и дихотомической шкал

<i>Сумма баллов по 100-балльной шкале</i>	<i>Оценка по дихотомической шкале</i>
100–50	зачтено
49 и менее	не зачтено

Соответствие 100-балльной и 5-балльной шкал

<i>Сумма баллов по 100-балльной шкале</i>	<i>Оценка по 5-балльной шкале</i>
100–85	отлично
84–70	хорошо
69–50	удовлетворительно
49 и менее	неудовлетворительно

Критерии оценивания решения компетентностно-ориентированной задачи:

6-5 баллов выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует глубокое понимание обучающимся предложенной проблемы и разностороннее ее рассмотрение; свободно конструируемая работа представляет собой логичное, ясное и при этом краткое, точное описание хода решения задачи (последовательности (или выполнения) необходимых трудовых действий) и формулировку доказанного, правильного вывода (ответа); при этом обучающимся предложено несколько вариантов решения или оригинальное, нестандартное решение (или наиболее эффективное, или

наиболее рациональное, или оптимальное, или единственно правильное решение); задача решена в установленное преподавателем время или с опережением времени.

4-3 балла выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует понимание обучающимся предложенной проблемы; задача решена типовым способом в установленное преподавателем время; имеют место общие фразы и (или) несущественные недочеты в описании хода решения и (или) вывода (ответа).

2-1 балла выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует поверхностное понимание обучающимся предложенной проблемы; осуществлена попытка шаблонного решения задачи, но при ее решении допущены ошибки и (или) превышено установленное преподавателем время.

0 баллов выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует непонимание обучающимся предложенной проблемы, и (или) значительное место занимают общие фразы и словесные рассуждения, и (или) задача не решена.