

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Кузько Андрей Евгеньевич  
Должность: Заведующий кафедрой  
Дата подписания: 12.09.2023 16:18:50  
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

Строение вещества  
(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***

Тема № 1. Корпускулярно-волновой дуализм вещества

Волновые свойства микрочастиц. Гипотеза де Бройля. Соотношения неопределенностей как проявление корпускулярно - волнового дуализма свойств вещества. Принцип суперпозиции. Операторы физических величин.

Тема № 2. Элементы квантовой механики

Временное и стационарное уравнение Шредингера. Волновая функция и ее свойства. Частица в одномерной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Квантование энергии

Тема № 3. Строение атомов

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

Тема № 4. Многоэлектронные атомы

Принцип Паули. Электронная конфигурация атомов. Энергия ионизации и средство к электрону

Тема № 5 Методы расчёта энергии и других характеристик молекул

Молекулы. Потенциальная поверхность. Равновесная конфигурация. Теория химической связи и её задачи

Тема № 6 Методы расчёта энергии и других характеристик молекул

Вариационный метод решения уравнения Шредингера

Тема № 7. Методы расчёта энергии и других характеристик молекул

Метод валентных связей и метод МО. Приближённое описание молекулярной орбитали в методе МО ЛКАО

Тема № 8 Методы расчёта энергии и других характеристик молекул

Приближённое описание молекулярной орбитали в методе МО ЛКАО. Расчёт энергии и волновой функции  $H_2^+$  в методе МО ЛКАО

Тема № 9. Теория химической связи

Ковалентная связь в методе МО ЛКАО. МО гомонуклеарных двухатомных молекул. Гетеронуклеарные двухатомные молекулы. Насыщение ковалентной связи

Тема № 10 Теория химической связи

Донорно-акцепторная связь. Ионная связь. Степень полярности химической связи. Метод Хюккеля. Ионная связь в кристалле.

Тема № 11 Теория химической связи

Силы Ван-дер-Ваальса. Ориентационное взаимодействие. Индукционное взаимодействие. Водородная связь

Тема № 13 Спектральные методы исследования строения и энергетических состояний молекул

Внутримолекулярное движение и электромагнитный спектр. Молекулярные спектры испускания, поглощения и комбинационного рассеяния

Тема № 14 Спектральные методы исследования строения и энергетических состояний молекул

Спектры ЭПР и ЯМР. Вращательный спектр двухатомной молекулы (приближение жёсткого ротатора). Колебательно- вращательный спектр двухатомной молекулы (приближение гармонического осциллятора)

Тема № 15 Спектральные методы исследования строения и энергетических состояний молекул

Ангармонизм колебательного спектра. Структура колебательного спектра. Электронные спектры. Определение энергии диссоциации двухатомных молекул  
Тема № 16 Спектральные методы исследования строения и энергетических состояний молекул  
Вращательные спектры и строение многоатомных молекул  
Тема № 17 Элементы химической термодинамики  
Первый закон термодинамики. Нециклические процессы. Теплоёмкость. Влияние температуры на теплоёмкость. Температурные ряды  
Тема № 18 Элементы химической термодинамики  
Квантовая теория теплоёмкости кристаллов Эйнштейна  
Тема № 19 Элементы химической термодинамики  
Теория теплоёмкости Дебая. Теория теплоёмкости газообразного вещества  
Тема № 20 Элементы химической термодинамики  
Тепловые эффекты. Закон Гесса. Зависимость теплового эффекта от температуры. Уравнения Кирхгофа  
Тема № 21 Элементы химической термодинамики  
Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы. Второй закон термодинамики. Энтропия  
Тема № 22 Элементы химической термодинамики  
Изменение энтропии в нестатических процессах  
Тема № 23 Элементы химической термодинамики  
Энергия Гиббса смеси идеальных газов. Общие условия химического равновесия. Закон действующих масс. Константа равновесия для газофазных реакций. Уравнение изотермы реакции  
Тема № 24 Элементы химической термодинамики  
Тепловая теорема Нернста. Третий закон термодинамики. Метод Темкина-Шварцмана

***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% дискуссии





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

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

**13. Число занятых МО в расчете молекулы нафталина методом молекулярных орбиталей Хюккеля**

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

**14. Число атомных орбиталей, используемых в расчете методом Хюккеля молекулы толуола ( $C_6H_5-CH_3$ )**

- |      |      |      |
|------|------|------|
| 1. 6 | 2. 5 | 3. 2 |
| 4. 7 | 5. 8 |      |

**15. Процесс изомеризации в квантово-химическом описании 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

**16. Число вырожденных по энергии конформеров у молекулы этана**

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

**17. 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. изменение формы ППЭ и переход системы на соседнюю ППЭ

**18. Валентное состояние атома**

1. модель, используемая в методе ВС
2. одно из спектрально наблюдаемых состояний
3. модель, используемая в методе Хартри-Фока
4. модель, используемая в методе функционала плотности
5. собственное состояние оператора  $S^2$

**19. Электронная волновая функция метода ВС**

1. строится как линейная комбинация некоторых произведений наборов АО
2. строится как детерминант Слейтера
3. строится как произведение МО
4. строится как произведение всевозможных МО
5. строится на основе вариационного принципа для расчете энергии

**20. Последовательность основных стадий образования молекулы из свободных атомов в методе ВС**

1. делокализация электронов, включая их межатомное смещение
2. взаимное проникновение (интерференция) орбиталей, приводящее к спариванию электронов под контролем принципа Паули

3. гибридизация атомов (ориентация, поляризация и промотирование)

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 SF<sub>6</sub>**

1. d<sup>2</sup>sp<sup>3</sup>
2. sp
3. sp<sup>2</sup>
4. sp<sup>3</sup>
5. dsp<sup>2</sup>

**29. При переходе от канонических орбиталей к sp<sup>3</sup>-гибридизованным орбиталям в молекуле метана**

1. энергия системы не изменяется
2. повышается энергия системы
3. понижается энергия системы
4. увеличивается прочность связей C—H 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.  $\text{HNO}_3$
3.  $\text{H}_2\text{O}$
4. *цис*- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
5.  $\text{O}_3$

**34. Рассчитанные дипольные моменты равны нулю в молекулах**

1. *транс*- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
2.  $\text{HNO}_3$
3.  $\text{H}_2\text{O}$
4. *цис*- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
5.  $\text{O}_3$

**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  $H$  в уравнении  $H\Psi_i = E_i\Psi_i$ , 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  $B_2$



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

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

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

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

### 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  $\tau$  жизни атома в возбужденном состоянии принять равным  $10^{-8}$  с, а длину волны  $\lambda$  излучения—равной 600 нм. Ответ указать в ангстремах.

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

$$\Delta\lambda = 20 \text{ фм}$$

$$\Delta\lambda = 2000 \text{ фм}$$

$$\Delta\lambda = 50 \text{ фм}$$

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

$$\Delta\lambda = 200 \text{ фм}$$

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

$$\Delta\lambda = 20 \text{ фм}$$

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  $\omega_1$  того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой радиуса, равного борновскому 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  $\varphi$  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  $\mathfrak{J}_{Iz}$  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  $E_{\text{возб}}$  возбуждения молекулы  $\text{HCl}$  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. $E_{\text{возб}} = \hbar \omega (1 - 2\gamma) = 0.356 \text{ эВ}$ ,           | 2. $E_{\text{возб}} = 2\hbar \omega (1 - 2\gamma) = 0.72 \text{ эВ}$ |
| 3. $E_{\text{возб}} = \frac{1}{2}\hbar \omega (1 - 2\gamma) = 0.18 \text{ эВ}$ , | 4. $E_{\text{возб}} = \hbar \omega (1 + 2\gamma) = 0.831 \text{ эВ}$ |
| 5. $E_{\text{возб}} = \frac{1}{2}\hbar \omega (1 + 2\gamma) = 0.573 \text{ эВ}$  |  |

72. Определить максимальную колебательную энергию  $E_{\text{max}}$  молекулы  $\text{O}_2$ , 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  $\text{CH}$ , если интервалы  $\Delta \nu$  между сосед-

ними линиями чисто вращательного спектра испускания данной молекулы равны  $29 \text{ см}^{-1}$ .

- |           |            |           |
|-----------|------------|-----------|
| 1. 112 пм | 2. 500 пм  | 3. 20 мкм |
| 4. 20 нм  | 5. 500 мкм |           |

74. Длины волн  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  двух соседних спектральных линии в чисто вращательном спектре молекулы  $\text{HC1}$  соответственно равны 117 и 156 мкм. Вычислить вращательную постоянную ( $\text{см}^{-1}$ ) для молекулы  $\text{HC1}$ .

- |                           |                            |                            |
|---------------------------|----------------------------|----------------------------|
| 1. $10.7 \text{ см}^{-1}$ | 2. $233.3 \text{ см}^{-1}$ | 3. $156.3 \text{ см}^{-1}$ |
| 4. $0.7 \text{ см}^{-1}$  | 5. $2000 \text{ см}^{-1}$  |                            |

75. Определить длину волны  $\lambda$ , 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  $\lambda = 121,5 \text{ нм}$ . 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. $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{kx^2}{2} \right) \psi = 0$ | 2. $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{kx^2}{2} \right) \psi = 0$ | 3. $\frac{d\psi}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{kx^2}{2} \right) \psi = 0$ |
| 4. $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - kx) \psi = 0$                          | 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  $x \frac{d}{dx} - u \cdot x$ .

- |        |          |            |
|--------|----------|------------|
| 1. $x$ | 2. $x^2$ | 3. $x + 1$ |
|--------|----------|------------|

4.  $x^2 + 1$

5. 0

80. При помощи правил Слэтера определите значения орбитальных экспонент  $\xi = \frac{(Z - s)}{n^*}$  для 2s орбитали атома фтора, находящегося в основном состоянии.

1. 2.6

2. 5.6

3. 8

4. 2

5. 21.8

81. При помощи правил Слэтера определите константы экранирования  $s$  для атомной орбитали 2s атома железа.

1. 4.15

2. 10.25

3. 23.25

4. 19.75

5. 2

82. При помощи правил Слэтера определите константы экранирования  $s$  для атомной орбитали 3d атома железа.

1. 19.75

2. 10.25

3. 2.6

4. 0.5

5. 0.333(3)

83. Используя условие нормировки, определить нормировочный множитель  $C_0$  нулевой собственной волновой функции осциллятора.

1.  $C_0 = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$

2.  $C_0 = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$

3.  $C_0 = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)$

4.  $C_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$

5.  $C_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$

84. Собственная круговая частота  $\omega_0$  колебаний молекулы водорода равна  $8,08 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ . Найти амплитуду  $A$  классических колебаний молекулы.

1. 12.5 пм

2. 10 пм

3. 10 мкм

4. 300 мкм

5. 500 пм

85. Определить энергию диссоциации  $D$  (в электрон-вольтах) молекулы CO, если ее собственная частота  $\omega = 4,08 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$  и коэффициент ангармоничности  $\gamma = 5,83 \cdot 10^{-3}$ .

1. 11.4 эВ

2. 11.4 кэВ

3. 11.4 мкэВ

4. 0.6 эВ

5. 102 эВ



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:  $n, l, m$ ;

1. 2

2. 8

3. 6

4. 1

5. 12

94. Найти число  $N$  электронов в атомах, у которых в основном состоянии заполнены: )  $K, -, L$ - и  $M$ -слои и  $4s$ -,  $4p$ - и  $4d$ -оболочки

1. 46

2. 32

3. 12

4. 6

5. 8

95. Вычислить множитель Ланде  $g$  для атомов с одним валентным электроном в состояниях  $S$

1. 2 в  $S$  состоянии

2. 1 в  $S$  состоянии

3. 6 в  $S$  состоянии

4. 3 в  $S$  состоянии

5. 12 в  $S$  состоянии

96. Вычислить энергию  $\varepsilon$  фотона, испускаемого при переходе электрона в атоме водорода с третьего энергетического уровня на первый.

1. 12.1 эВ

2. 121 эВ

3. 1.21 эВ

4. 11.3 МэВ

5. 113 МэВ

97. Нормировать волновую функцию  $\Psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x$  в области  $0 \leq x \leq l$  на единицу.

1.  $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$

2.  $A = \sqrt{\frac{2\pi}{l}}$

3.  $A = \sqrt{\frac{2}{3l}}$

4.  $A = \sqrt{\frac{2\pi}{3l}}$

5.  $A = \sqrt{\frac{\pi}{l}}$

98. 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.  $5x^4$

99. Определить неточность  $\Delta x$  в определении координаты электрона, движущегося в



### 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 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  $45^\circ$  со скоростью движения электрона.

$$[B = 566 \text{ мкТл}]$$

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  $S = 100$  см<sup>2</sup> 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  $1 \text{ см}^3$ , 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  $^{23}_{12}\text{Mg} \rightarrow ^{23}_{11}\text{Na} + ^0_1\text{e} + ^0_0\nu$ . 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. Масса нейтральных атомов  $^4_2\text{He}$  и  $^3_2\text{He}$  соответственно равна  $6,6467 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$  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  $\alpha$ -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  $\alpha$ - и двух  $\beta$ -распадов. [ $^{226}_{88}\text{Ra}$ ]

15. Определите, во сколько раз магнетон Бора (единица магнитного момента электрона) больше ядерного магнетона (единица магнитного момента ядра). [ $\frac{\mu_B}{\mu_Y} = 1835$ ]

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  $\psi$ -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  $\sigma$  для  $L$ -серии рентгеновского излучения, если при переходе электрона в атоме вольфрама с  $M$ -оболочки на  $L$ -оболочку длина волны  $\lambda$  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.