

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана

А. С. Князев

Оценочные материалы по дисциплине

Квантовая химия

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

Химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2024

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

В.В. Шелковников

Томск – 2024

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.

ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности.

ИОПК 3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.

ИОПК 4.1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности.

ИОПК 4.2 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.

ИОПК 4.3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

- домашняя работа;
- контрольная работа.

Домашняя работа (ИОПК 3.1, ИОПК 3.2, ИОПК 4.1., ИОПК 4.2., ИОПК 4.3)

Тексты задач для выполнения домашних заданий в полном объеме приведены в пособиях: Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1: учебник и практикум для академического бакалавриата / А. И.Ермаков. – М.: Изд-во Юрайт, 2018. – 183 с., Шарутина О.К. Введение в квантовую химию. Задачи и упражнения Текст учеб. пособие по направлению 020100.62 "Химия" О. К. Шарутина; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Аналит. химия; ЮУрГУ. Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2015.-193с.

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если выполнено более 60 % от объема заданий домашней работы.

Оценка «не зачтено» выставляется студенту, если выполнено менее 60 % от объема заданий домашней работы.

Контрольная работа (ИОПК 3.1, ИОПК 3.2, ИОПК 4.1., ИОПК 4.2., ИОПК 4.3)

Контрольная работа №1 состоит из 4 теоретических вопросов и 6 задач.

Вариант 1

Вопрос 1: Сформулируйте физический смысл постоянной Планка.

Вопрос 2: В чем заключается явление фотоэффекта?

Вопрос 3: При каких переходах электронов образуется серия Лаймана в спектре излучения атома водорода?

Вопрос 4: Сформулируйте второй постулат Бора.

Задача 1: Рассчитайте величину кванта, участвующего в возбуждении электронного движения с периодом 10^{-15} . Выразите результаты в кДж/моль.

Задача 2: Определите красную границу фотоэффекта для Cs с работой выхода 2,1 эВ.

Задача 3 Определить наибольшие и наименьшие длины волн фотонов, излучаемых при переходе электронов в серии Лаймана.

Задача 4 Атом водорода испустил фотон с длиной волны $4.86 \cdot 10^{-7}$ м. Насколько изменилась энергия электрона в атоме?

Задача 5 Вычислить длину волны де Бройля электрона, движущегося со скоростью $v = 0.75c$ (c - скорость света).

Задача 6: Рубиновый лазер создает импульс длительностью 10 пс. Чему равна неточность в измерении энергии лазера?

Ответы:

Вопрос 1: Физический смысл постоянной Планка – мельчайшая порция энергии, которую может испустить система в одном акте излучения

Вопрос 2: Явление фотоэффекта состоит в том, что металлы (или полупроводники) при действии на них света испускают электроны.

Вопрос 3: серия Лаймана образуется при переходе электронов с вышележащих уровней на первый.

Вопрос 4: Переход электрона из одного стационарного состояния E_n в другое, (энергия которого E_k меньше) сопровождается испусканием кванта монохроматического излучения, частота которого определяется условием: $E_n - E_k = h\nu$

Задача 1: 399 кДж/моль

Задача 2: $5,9 \times 10^{-7}$ м

Задача 3: 122 нм, 91 нм

Задача 4: $4,09 \times 10^{-19}$ Дж

Задача 5: $3,2 \times 10^{-12}$ м

Задача 6: $5,25 \times 10^{-24}$ Дж

Критерии оценивания:

Результаты контрольной работы определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» выставляется, если даны правильные ответы на все теоретические вопросы и все задачи решены без ошибок.

Оценка «хорошо» выставляется, если даны правильные ответы на все вопросы и решены четыре, пять задач. Допускаются числовые ошибки.

Оценка «удовлетворительно» выставляется, если даны правильные ответы на не менее чем два вопроса и решены три задачи. Допускаются числовые ошибки.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если даны правильные ответы на часть вопросов и решено менее трех задач.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Экзамен в четвертом семестре проводится в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов, проверяющих РООПК 3.1.

Студент допускается к прохождению промежуточной аттестации при условии демонстрации практических навыков соответствующих РООПК 3.1, РООПК 3.2, ИОПК 4.1., ИОПК 4.2., ИОПК 4.3 по всем темам курса.

Список вопросов:

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии
2. Становление квантовой механики. (Включая эксперименты по спектрам газов и звезд. Открытие корпускулярных свойств света)
3. Теория и постулаты Бора.

4. Электрон – волна и частица: Волна Дэ Бройля.
5. Формула плоской волны.
6. Свойства волны дэ Бройля.
7. Физический смысл волн дэ Бройля.
8. Вероятностное рассмотрение электрона и микрочастиц. Физический смысл волновой функции.
9. Принцип суперпозиции (наложения) состояний.
10. Принцип неопределенности.
11. Уравнение Шредингера.
12. Оператор. Собственные функции. Спектры операторов.
13. Свойства квантово-механических операторов.
14. Операторы координат, импульса, энергии (гамильтониан).
15. Произведение векторов. Момент импульса: оператор момента импульса в декартовых и в сферических координатах. Собственные функции и собственные значения операторов $\hat{M}_z$ и $\hat{M}^2$.
16. Критерий возможности одновременного измерения двух физических величин на языке операторов. Коммутаторы операторов.
17. Примеры коммутаторов, коммутационные соотношения.
18. Связь неопределенности при одновременном определении значений в случае не коммутирующих операторов. Математические ожидания. Средние значения.
19. Законы сохранения и стационарные состояния
20. Представление ВФ и операторов векторами и матрицами.
21. Движение свободной частицы
22. Движение электрона в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
23. Движение электрона в двумерной бесконечно глубокой потенциальной яме.
24. Частица и одномерный потенциальный барьер (туннельный эффект)
25. Гармонический осциллятор.
26. Водородоподобный атом.
27. Квантовые числа и их физический смысл.
28. Преобразование комплексных орбиталей в вещественные.
29. Графическое изображение орбиталей: Изовероятностные поверхности. Радиальные функции. Сферические функции.
30. Опыт Штерна-Герлаха.
31. Операторы спина.
32. Волновая функция электрона с учетом спина.
33. Магнитные моменты.
34. Принцип тождественности микрочастиц (Оператор перестановки. Принцип антисимметрии.)
35. Вариационный метод.
36. Вариационный метод Ритца.
37. Детерминант Слэтера.
38. Метод Хартри.
39. Метод Хартри - Фока
40. Классификация атомных состояний многоэлектронных атомов.
41. Электронные термы и конфигурации.
42. Гибридные АО, типы гибридизации.
43. Построение электронных оболочек элементов.
44. Периодичность состояний и других свойств.
45. Теория возмущений: стационарная теория возмущений
46. Теория возмущений: случай отсутствия вырождения
47. Теория возмущений: случай вырождения

48. Молекулярная структура.
49. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
50. Приближение Борна-Оппенгеймера.
51. Эффект Яна — Теллера.
52. Ион молекулы водорода с позиций квантовой механики.
53. Интегралы S и H. Связующие и разрыхляющие орбитали.
54. Иерархия методов квантовой химии.
55. МЕТОД abinitio. Вид аналитических базисных функций.
56. Базисные наборы
57. Полуэмпирические методы.
58. π -электронное приближение
59. Метод Хюккеля.
60. Порядки связей. Индекс свободной валентности. Заряды на атомах.
61. Расчет химических систем в π приближении Хюккеля: этилен
62. Расчет химических систем в π приближении Хюккеля: аллильный радикал

Пример Билета:

Билет № 4

1. Свойства волны де Бройля.
 2. Движение электрона в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
-

Критерии оценивания:

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» ставится в случае полного, развернутого ответа на вопросы в билете и на дополнительные вопросы по предмету.

Оценка «хорошо» ставится при полном, развернутом ответе на вопросы в билете и неполных ответах на дополнительные вопросы.

Оценка «удовлетворительно» ставится в случае полного ответа на вопросы в билете и ответы на не все дополнительные вопросы.

Оценка «удовлетворительно» ставится в случае отсутствия ответов на вопросы.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Тест:

1. Частица находится в квантовом состоянии, описываемом нормированной волновой функцией $\Psi(\vec{r}, t)$. Какое из нижеследующих утверждений справедливо?
 - а) $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$ есть вероятность обнаружить частицу в момент времени t в объеме dV в окрестности точки $\vec{r}$;
 - б) $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dt$ есть вероятность обнаружить частицу в точке $\vec{r}$ в интервале времени $(t, t + dt)$;
 - в) $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV dt$ есть вероятность обнаружить частицу в интервале времени $(t, t + dt)$ в объеме dV в окрестности точки $\vec{r}$;
 - г) все утверждения неправильны.
2. Что такое волна де Бройля?
3. Для линейного оператора $\hat{A}$ верно:

- а) $\hat{A}(a_1 f_1 + a_2 f_2) = a_1 \hat{A} f_1 + a_2 \hat{A} f_2$;
 б) $\hat{A}(f_1 + f_2) = \hat{A} f_1 \hat{A} f_2$;
 в) $\hat{A} a f = a \hat{A} f$;
 г) $\hat{A} f_1 f_2 = \hat{A} f_1 + \hat{A} f_2$.
4. Какое из нижеперечисленных уравнений или законов относится к уравнениям на собственные значения и собственные функции какого-либо оператора?
 а) стационарное уравнение Шредингера;
 б) закон сохранения вероятности;
 в) принцип суперпозиции.
5. Какой формулой определяются энергии стационарных состояний частицы массой m в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной a (здесь $n = 1, 2, 3, \dots$)?
 а) $\frac{\pi^2 \hbar^2 n}{2ma^2}$;
 б) $\frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$;
 в) $\frac{\pi^2 \hbar^2 (n+1/2)}{2ma^2}$;
 г) $\frac{\pi^2 \hbar^2 (n^2 + 1/2)}{2ma^2}$.
6. Как меняется расстояние между уровнями энергии у квантового гармонического осциллятора с увеличением квантового числа n ?
 а) уровни энергии сближаются,
 б) расстояние не меняется (эквидистантный спектр),
 в) расстояние увеличивается.
7. Какой формулой определяется выражение для оператора проекции орбитального момента на ось z в сферических координатах?
 а) $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$;
 б) $i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$;
 в) $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$;
 г) $i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$.
8. Почему нельзя получить точное решение уравнения Шредингера для систем, содержащих более одного электрона?
9. В чем суть одноэлектронного приближения:
 а) действие на данный электрон всех остальных электронов заменяют средним полем;
 б) не учитывается взаимодействие между электронами;
 в) гамильтониан можно представить как сумму одно- и двухэлектронных операторов;
 г) не учитывается взаимодействие между ядром и электронами;
 д) не учитывается кинетическая энергия электронов.
10. Сформулируйте принцип тождественности микрочастиц.
11. Что такое спин?
12. Что понимают под термином «интеграл движения» в классической механике?
13. Суть вариационного метода Ритца.
14. Сформулируйте принцип неопределенности Гейзенберга.

15. Найдите коммутатор $[\hat{y}, \hat{p}_x]$.
16. Как определить среднее значение физической величины в квантовой механике?
17. Перечислите квантовые числа, с помощью которых можно описать состояние электрона, в каких пределах они меняются.
18. В чем суть π -электронного приближения в методе Хюккеля?
19. Критерий применимости теории возмущений:
 - а) $V_{km} \ll (E_k^{(0)} - E_m^{(0)})$,
 - б) $V_{km} \gg (E_k^{(0)} - E_m^{(0)})$,
 - в) $V_{km} = 0$,
 - г) Такого критерия нет.
20. Расположите электронную ($E_{эл}$), колебательную ($E_{кол}$) и вращательную ($E_{вр}$) энергии в порядке их возрастания:
 - а) $|E_{эл}| \gg E_{кол} \gg E_{вр}$
 - б) $|E_{эл}| \ll E_{кол} \ll E_{вр}$
 - в) $|E_{эл}| \gg E_{вр} \gg E_{кол}$
 - г) $|E_{эл}| \ll E_{вр} \ll E_{кол}$

Ключи:

- 1 а)
- 2 Волна де Бройля — волна вероятности (или волна амплитуды вероятности), определяющая плотность вероятности обнаружения объекта в заданном интервале конфигурационного пространства. В соответствии с принятой терминологией говорят, что волны де Бройля связаны с любыми частицами и отражают их волновую природу.
3. а)
4. а)
5. б)
6. б)
7. в)
8. В этом случае наличие члена межэлектронного взаимодействия не допускает разделения переменных.
9. а)
10. В системе, состоящей из N тождественных частиц, осуществляются лишь такие состояния, которые не меняются при перестановке любых двух таких частиц.
11. Собственный момент электрона
12. Физические величины, сохраняющие при движении постоянное значение, определяемое начальными условиями.
13. Приближенный метод решения уравнения Шредингера с помощью минимизации определённого функционала, характеризующийся представлением пробной волновой функции системы в виде линейной комбинации некоторых функций.
14. Существуют пары наблюдаемых величин, которым невозможно одновременно приписать точные значения (одноименные координата и проекция импульса).
15. 0
16. $\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV$
17. $n = 1, 2, \dots, \infty$, $l = 0, n-1$, $m = -l, l$, $s = 1/2$
18. Возможно обособленное рассмотрение π -электронной системы молекулы при фиксированных σ -орбиталях ее остова.
19. а)
20. а)

Информация о разработчиках

Меньщикова Татьяна Викторовна, канд. физ.-мат. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.