

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

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

И.О. Фамилия

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 дэ 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 дэ 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:
- $V_{km} \ll (E_k^{(0)} - E_m^{(0)})$,
 - $V_{km} \gg (E_k^{(0)} - E_m^{(0)})$,
 - $V_{km} = 0$,
 - Такого критерия нет.
20. Расположите электронную ($E_{эл}$), колебательную ($E_{кол}$) и вращательную ($E_{вр}$) энергии в порядке их возрастания:
- $|E_{эл}| \gg E_{кол} \gg E_{вр}$
 - $|E_{эл}| \ll E_{кол} \ll E_{вр}$
 - $|E_{эл}| \gg E_{вр} \gg E_{кол}$
 - $|E_{эл}| \ll E_{вр} \ll E_{кол}$

Ключи:

- а)
- 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.
- а)
- а)
- б)
- б)
- в)
- В этом случае наличие члена межэлектронного взаимодействия не допускает разделения переменных.
- а)
- В системе, состоящей из N тождественных частиц, осуществляются лишь такие состояния, которые не меняются при перестановке любых двух таких частиц.
- Собственный момент электрона
- Физические величины, сохраняющие при движении постоянное значение, определяемое начальными условиями.
- Приближенный метод решения уравнения Шредингера с помощью минимизации определённого функционала, характеризующийся представлением пробной волновой функции системы в виде линейной комбинации некоторых функций.
- Существуют пары наблюдаемых величин, которым невозможно одновременно приписать точные значения (одноименные координата и проекция импульса).
- 0
- $\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV$
- $n = 1, 2, \dots, \infty, l = 0, n-1, m = -l, l, s = 1/2$
- Возможно обособленное рассмотрение π -электронной системы молекулы при фиксированных σ -орбиталях ее остова.
- а)
- а)

Информация о разработчиках

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