

Оценочные материалы для промежуточной аттестации по дисциплине

Квантовая химия

| | |
|-----------------------------|--|
| Код, направление подготовки | 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия |
| Направленность (профиль) | Аналитическая химия |
| Форма обучения | очная |
| Кафедра-разработчик | кафедра химии |
| Выпускающая кафедра | кафедра химии |

Примеры задач к контрольной работе

1. Сравните скорость электрона на первой борховской орбите с неопределенностью скорости электрона в атоме водорода, полагая размер атома порядка 0,1 нм.
2. Оцените минимальную кинетическую энергию электрона, локализованного в области размером $l = 0,1$ нм.
3. Электрон с кинетической энергией $T = 10$ эВ локализован в области размером $l = 1$ мкм. Оцените относительную неопределенность скорости электрона.
4. Кинетическая энергия T электрона в атоме водорода составляет величину порядка 10 эВ. Используя соотношение неопределенностей, оцените минимальные линейные размеры атома.
5. Электрон в атоме водорода перешел с четвертого энергетического уровня на второй. Определите энергию испущенного при этом фотона.
6. Определите энергию фотона, испускаемого при переходе электрона в атоме водорода с третьего энергетического уровня на основной.
7. Вычислите длину волны де Бройля для протона, движущегося со скоростью $v = 0,6c$ (c – скорость света в вакууме).
8. Определите относительную неопределенность $\Delta p/p$ импульса движущейся частицы, если допустить, что неопределенность ее координаты равна длине волны де Бройля.
9. Пучок нейтронов энергии 1 эВ падает на кристалл. Брэгговские рефлексы 1-го порядка наблюдаются при $11,8^\circ$. Чему равно расстояние между кристаллическими плоскостями?
10. Определите результаты действия операторов на указанные функции:

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}, f(x) = \sin x; \hat{A} = \frac{d}{dx}, f(x) = x^5 + 3e^x; \hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}, f(x) = e^{ax^2};$$

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}, \hat{B} = 3, f(x) = x^5 + 3e^x: (\hat{A} + \hat{B})f(x);$$

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}, \hat{B} = x, f(x) = e^x: \hat{A}\hat{B}f(x); (\hat{A} + \hat{B})f(x).$$

11. Коммутируют ли между собой приведенные ниже операторы:

$$\hat{A} = x, \hat{B} = y$$

$$\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}, \hat{B} = y$$

$$\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}, \hat{B} = x$$

$$\hat{A} = i \frac{\partial}{\partial x}, \hat{B} = \hat{f}(x) \text{ (оператор } \hat{f}(x) \text{ означает умножение на функцию } f(x))$$

$$\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \hat{B} = \hat{f}(x)$$

$$\hat{A} = x \frac{\partial}{\partial x}, \hat{B} = x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

12. Дан оператор $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$. Покажите, что $(\hat{A} + x)(\hat{A} - x) = \hat{A}^2 - x^2 - 1$.

13. Коммутируют ли между собой операторы $\left(\frac{\partial}{\partial x} + x\right), \left(\frac{\partial}{\partial x} - x\right) - ?$

14. Покажите, что:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$

$$[\hat{A}^m, \hat{A}^n] = 0 \text{ для любых натуральных чисел } m \text{ и } n$$

$$[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}$$

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$$

15. Линеен ли оператор:

$$\hat{A}f = \exp(f)$$

$$\hat{A}f = \int_{-\infty}^{+\infty} f dx$$

16. Выполняется ли соотношение $\hat{A}f = \text{const } f$ для приведенных ниже функций и операторов?

$$f = \sin kx, \hat{A} = \frac{d}{dx}$$

$$f = \sin kx, \hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$$

$$f = \exp kx, \hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$$

$$f = \cos kx \text{ и } f = c_1 \sin kx + c_2 \cos kx, \hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$$

$$f = \frac{1}{x}, \hat{A} = x$$

17. Докажите, что если k – собственное значение оператора \hat{A} , то k^n – собственное значение оператора \hat{A}^n .
18. Покажите, что если $\hat{A}f = kf$ и $\hat{A}g = mg$, где \hat{A} – линейный оператор, то для линейной комбинации $\varphi = c_1 f + c_2 g$ будет выполняться $\hat{A}\varphi = \text{const } \varphi$ при $k = m$.
19. Покажите, что если ψ_1 и ψ_2 – две собственные функции оператора \hat{H} , соответствующие различным собственным значениям E_1 и E_2 , то их любая линейная комбинация не будет являться собственной функцией этого оператора \hat{H} .
20. Является ли функция $\Psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$ собственной функцией оператора \hat{p}_x^2 ?
21. Являются ли операторы эрмитовыми: а) $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$; б) $\hat{M}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$?
22. Найдите коммутаторы: а) $[y, \hat{p}_y]$; б) $[\hat{M}_x, x]$; в) $[\hat{M}_x, y]$; г) $[\hat{M}_x, \hat{p}_x]$; д) $[\hat{M}_x, \hat{p}_y]$; е) $[\hat{M}_x, \hat{M}_y]$; ж) $[\hat{M}^2, \hat{M}_y]$; з) $[\hat{p}, x^2]$; и) $[\hat{p}^2, x]$.

Вопросы к экзамену

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии.
2. Становление квантовой механики.
3. Теория и постулаты Бора.
4. Электрон – волна и частица.
5. Принцип неопределенности. Принцип Гамильтона. Формула плоской волны.
6. Вероятностное рассмотрение электрона и микрочастиц.
7. Уравнение свободных колебаний струны, закрепленной на концах.
8. Принцип суперпозиции (наложения) состояний.
9. Операторы. Свойства квантово-механических операторов.
10. Свойства эрмитовых операторов. Спектры операторов.
11. Собственные функции.
12. Операторы координат, импульса, энергии (гамильтониан).
13. Оператор момента импульса в декартовых и в сферических координатах.
14. Собственные функции и собственные значения операторов \hat{M}_z и \hat{M}^2 .
15. Критерий возможности одновременного измерения двух физических величин на языке операторов.
16. Коммутаторы операторов. Примеры коммутаторов, коммутационные соотношения.

17. Связь неопределенности при одновременном определении значений в случае не коммутирующих операторов. Математические ожидания. Средние значения.
18. Законы сохранения и стационарные состояния.
19. Движение электрона в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
20. Движение электрона в двумерной бесконечно глубокой потенциальной яме.
21. Электронное веретено. Спин.
22. Ситуация со множеством электронов. Принцип тождественности микрочастиц.
23. Оператор перестановки. Принцип антисимметрии.
24. Орбиталь. Спин-орбиталь. Детерминант Слэтера.
25. Вариационный метод.
26. Вариационный метод Ритца.
27. Теория возмущений.
28. Метод Хартри-Фока
29. Электронная плотность.
30. Орбитальная модель атома. Квантовые числа.
31. Скрытая симметрия водородного атома. Преобразование комплексных орбиталей в вещественные.
32. Радиальные функции. Сферические функции. Извероятностные поверхности.
33. Электронные термы и конфигурации.
34. Гибридизация при столкновениях атомных и молекулярных систем.
35. Молекулярная структура.
36. Особенности приближения Борна-Оппенгеймера.
37. Молекула водорода с позиций квантовой механики
38. Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону.
39. Расчет бутадиена по методу МО.
40. Порядки связей. Индекс свободной валентности. Заряды на атомах.

Пример экзаменационного билета

1. Метод Хартри-Фока.
2. Оцените предел точности $\Delta\nu$, с которой можно определить частоту излучения атома, считая среднее время жизни атома $\Delta\tau = 10^{-8}$ с. Какую долю от частоты фотона с $\lambda = 5000 \text{ \AA}$ составляет величина $\Delta\nu$?
3. Определите среднее значение r^2 в основном состоянии атома водорода.