

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»  
Институт электронных и информационных систем

---

Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники

**КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

Учебный модуль по специальности  
04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Фонд оценочных средств

**СОГЛАСОВАНО**

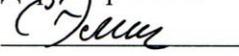
Заведующий выпускающей кафедрой ФПХ

 И.В.Зыкова  
« 09 » 06 2017 г.

Принято на заседании Ученого совета ИЭИС

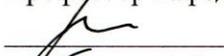
Протокол № 42 от 22.06 2017 г.

Директор ИЭИС

 С.И.Эминов

**Разработал**

Профессор кафедры ФТТМ

 М.А.Захаров  
« 05 » 06 2017 г.

Принято на заседании кафедры ФТТМ

Протокол № 11 от 05.06 2017 г.

Заведующий кафедрой ФТТМ

 Б.И.Селезнев

Паспорт фонда оценочных средств (ФОС)  
по учебному модулю «Квантовая химия»  
для специальности 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Модуль, раздел (в соответствии с РП)	ФОС		Контролируемые компетенции (или их части)
	Вид оценочного средства	Количество вариантов заданий	
1. Волновая функция, ее основные свойства и принцип суперпозиции состояний.	опрос	1	ОПК-1, ДПК-16
2. Операторы физических величин.	разноуровневые задачи	10	
	опрос	1	
3. Принцип неопределенности Гайзенберга.	опрос	1	
4. Волновое и стационарное уравнения Шредингера.	разноуровневые задачи	14	
	опрос	1	
5. Движение частиц в сферически симметричных полях.	разноуровневые задачи	10	
	опрос	1	
6. Приближенные методы квантовой химии.	разноуровневые задачи	10	
	опрос	1	
7. Ансамбли квантовых частиц и методы их описания.	разноуровневые задачи	10	
	опрос	1	
8. Приближенные методы Хартри-Фока и Томаса-Ферми.	разноуровневые задачи	5	
	опрос	1	
<b>Аттестация - экзамен</b>	Комплект экзаменационных билетов	15	

## Характеристики оценочных средств

### 1 Разноуровневые задачи

- 1.1 Комплект разноуровневых задач по разделу 2., приложение А к ФОС.
- 1.2 Комплект разноуровневых задач по разделу 4., приложение А к ФОС.
- 1.3 Комплект разноуровневых задач по разделу 5., приложение А к ФОС.
- 1.4 Комплект разноуровневых задач по разделу 6., приложение А к ФОС.
- 1.5 Комплект разноуровневых задач по разделу 7., приложение А к ФОС.
- 1.6 Комплект разноуровневых задач по разделу 8., приложение А к ФОС.

Таблица 1 – Параметры оценочного средства (разноуровневые задачи)

Предел длительности контроля	15-30 мин на одну задачу
Предлагаемое количество задач из одного контролируемого раздела	1-2
Последовательность выборки задач из каждого раздела	случайная
Критерии оценки: (разделы 2,7 и 8)	
9-10 баллов, если	Способен правильно выбрать нужную формулу и правильно ее применить
7-8 баллов, если	Допускает неточности в подборе формул и (или) допускает не критические ошибки в их использовании
5-6 баллов, если	Не всегда адекватно подбирает формулы и (или) использует их с ошибками
Критерии оценки: (разделы 5 и 6)	
17-20 баллов, если	Способен правильно выбрать нужную формулу и правильно ее применить
12-16 баллов, если	Допускает неточности в подборе формул и (или) допускает не критические ошибки в их использовании
10-11 баллов, если	Не всегда адекватно подбирает формулы и (или) использует их с ошибками
Критерии оценки: (раздел 4)	
35-40 баллов, если	Способен правильно выбрать нужную формулу и правильно ее применить
29-35 баллов, если	Допускает неточности в подборе формул и (или) допускает не критические ошибки в их использовании
21-28 баллов, если	Не всегда адекватно подбирает формулы и (или) использует их с ошибками

## 2 Опрос

Опрос студентов проводится на каждом занятии. Комплект вопросов приведен в приложении Б к фонду оценочных средств.

Таблица 2 – Параметры оценочного средства (опрос)

Предел длительности контроля	не более 20 минут на один опрос
Предлагаемое количество вопросов из одного раздела	все
Критерии оценки:	
5 баллов, если	даны правильные ответы на 90-100% вопросов
4 балла, если	даны правильные ответы на 70-89% вопросов
3 балла, если	даны правильные ответы на 50-69% вопросов

## 3 Экзамен

Каждый экзаменационный билет содержит два теоретических вопроса и одну задачу.

Полный комплект всех экзаменационных билетов дается в Приложении В к фонду оценочных средств, находится в закрытом для студентов доступе и хранится на кафедре.

Критерии оценивания экзамена:

- уверенное владение терминологией – 10 баллов максимум;
- глубина знаний по теме вопроса – 10 баллов максимум;
- полнота ответа – 10 баллов максимум;
- логическая связность – 10 баллов максимум;
- аргументированность ответа – 10 балла максимум.

Таблица 3 – Параметры оценочного средства (экзамен)

Предел длительности контроля	50 минут – подготовка; 20 минут – ответы на вопросы
Предлагаемое количество вопросов и задач	2 вопроса + 1 задача
Критерии оценки:	
«5», если 45-50 баллов, если	демонстрирует всестороннее и глубокое знание теоретического материала и задача решена правильно
«4», если 35-44 балла, если	допускает неточности при ответе на теоретические вопросы и (или) допущены неточности в решении задачи
«3», если 25-34 балла, если	испытывает трудности при ответе на теоретические вопросы или задача решена неправильно

## Приложение А (справочное)

### Разноуровневые задачи

#### Задачи к разделу 2.

##### ЗАДАЧА № 1

В состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\Psi(x) = C \exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right),$$

где  $p_0$ ,  $x_0$ ,  $a$  – вещественные параметры, найти функцию распределения по координатам частиц. Определить средние значения и флуктуации координаты и импульса частицы.

##### ЗАДАЧА № 2

Волновая функция состояния частицы имеет вид

$$\Psi(x) = C \exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar}\right) \varphi(x),$$

$\varphi(x)$  – вещественная функция. Показать, что  $p_0$  – средний импульс частицы в рассматриваемом состоянии.

##### ЗАДАЧА № 3

Доказать линейность оператора проекции импульса  $p_x$ .

##### ЗАДАЧА № 4

Доказать самосопряженность оператора проекции импульса  $p_x$ .

##### ЗАДАЧА № 5

Вычислить коммутатор  $[x, p_x]$ .

##### ЗАДАЧА № 6

Вычислить коммутатор  $[x, p_y]$ .

##### ЗАДАЧА № 7

Вычислить коммутатор  $[p_y, p_x]$ .

##### ЗАДАЧА № 8

Вычислить коммутатор  $[l_y, l_x]$ .

##### ЗАДАЧА № 9

Вычислить коммутатор  $[l^2, l_x]$ .

##### ЗАДАЧА № 10

Записать оператор кинетической энергии в сферической системе координат.

#### Задачи к разделу 4.

##### ЗАДАЧА № 1

Найти энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$ , т.е.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0, \quad x > a. \end{cases}$$

##### ЗАДАЧА № 2

Докажите интегрированием ортогональность собственных функций гамильтониана частицы, находящейся в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$ .

### ЗАДАЧА № 3

В стационарных состояниях частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$ , т.е.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0, \quad x > a. \end{cases}$$

найти функцию распределения по координатам и импульсам частицы, средние значения этих величин и их флуктуации.

### ЗАДАЧА № 4

Найти среднюю кинетическую энергию и ее флуктуацию в стационарных состояниях частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$ , т.е.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0, \quad x > a. \end{cases}$$

### ЗАДАЧА № 5

Состояние частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$  ( $0 < x < a$ ) описывается волновой функцией вида  $\Psi(x) = Ax(x-a)$ . Найти распределение вероятностей различных значений энергии частицы, среднее значение и среднюю квадратичную флуктуацию энергии.

### ЗАДАЧА № 6

Состояние частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$  ( $0 < x < a$ ) описывается волновой функцией вида

$$\Psi(x) = B \sin^2(\pi x / a).$$

Найти распределение вероятностей различных значений энергии частицы, среднее значение и среднюю квадратичную флуктуацию энергии.

### ЗАДАЧА № 7

Найти четные и нечетные энергетические уровни дискретного спектра частицы в симметричной потенциальной яме вида

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

### ЗАДАЧА № 8

Найти уровни энергии и нормированные волновые функции состояний дискретного спектра частицы в поле

$$U(x) = -\alpha\delta(x),$$

$\alpha > 0$ . Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии в этих состояниях.

### ЗАДАЧА № 9

Для частицы в поле вида

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ -\alpha\delta(x-a), & x > 0, \end{cases}$$

$\alpha > 0$ , найти зависимость числа состояний дискретного спектра от параметра  $\xi = m\alpha a / \hbar^2$ .

### ЗАДАЧА № 10

Для частицы в поле вида

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_2, & x > a, \end{cases}$$

найти условие существования состояний дискретного спектра. Рассмотреть предельные случаи: а)  $U_1 = \infty$ ; б)  $U_1 = U_2$ .

### ЗАДАЧА № 11

Для свободной частицы, движение которой ограничено непроницаемой стенкой, т.е.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x > 0, \\ \infty, & x < 0, \end{cases}$$

найти волновые функции стационарных состояний. Нормировать их на  $\delta$ -функцию по энергии.

### ЗАДАЧА № 12

Найти волновые функции стационарных состояний частицы в поле

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & x > 0, \quad (U_0 > 0), \end{cases}$$

для случая, когда энергия частицы  $E$  меньше высоты потенциальной стенки  $U_0$ . Убедиться в ортогональности полученных функций и нормировать их на  $\delta$ -функцию по энергии. Образуют ли полученные функции полную систему?

### ЗАДАЧА № 13

Определить коэффициент отражения частиц от потенциальной стенки

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & x > 0, \quad (U_0 > 0), \end{cases}$$

при энергии частицы  $E > U_0$ . Рассмотреть предельные случаи  $E \rightarrow \infty$  и  $E \rightarrow U_0$ .

### ЗАДАЧА № 14

Определить коэффициенты прохождения и отражения частиц в случае потенциального барьера  $U(x) = \alpha\delta(x)$ ,  $\alpha > 0$ . Рассмотреть предельные случаи  $E \rightarrow \infty$  и  $E \rightarrow 0$ .

### Задачи к разделу 5.

#### ЗАДАЧА № 1

Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии плоского ротатора с моментом инерции  $I$ . Какова кратность вырождения уровней?

(*Ротатором* называется вращающаяся (в плоскости или пространстве) система из двух жестко связанных друг с другом частиц. Момент инерции ротатора равен  $I = \mu a^2$ , где  $\mu$  - приведенная масса частиц,  $a$  - расстояние между ними.)

#### ЗАДАЧА № 2

Найти энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой двумерной потенциальной яме

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \leq a, \\ \infty, & \rho > a. \end{cases}$$

#### ЗАДАЧА № 3

Найти энергетические уровни дискретного спектра частицы в двумерной потенциальной яме  $U(\rho)$  вида

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0, & \rho < a, \\ 0, & \rho \geq a. \end{cases}$$

Отвечающие значению  $m=0$  проекции момента частицы на направление, перпендикулярное плоскости движения. Специально обсудить случай мелкой ямы  $\mu a^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$ ; сравнить с одномерным движением.

#### **ЗАДАЧА № 4**

Как изменяются значения  $E_{n,l}$  энергетических уровней частицы в дискретном спектре:

а) при фиксированном значении  $l$  с увеличением  $n_r$ ;

б) при фиксированном значении  $n_r$  с увеличением  $l$ ?

#### **ЗАДАЧА № 5**

Найти уровни энергии дискретного спектра  $s$ -состояний частицы в поле

$$U(r) = -U_0 \exp(-r/a).$$

Получить условие существования таких состояний. Каково условие появления новых  $s$ -состояний дискретного спектра частицы при углублении ямы? Специально обсудить случай глубокой ямы  $\mu a^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$ .

#### **ЗАДАЧА № 6**

Вычислить радиальную волновую функцию водородоподобного атома в  $1s$  состоянии.

#### **ЗАДАЧА № 7**

Вычислить радиальную волновую функцию водородоподобного атома в  $2s$  состоянии.

#### **ЗАДАЧА № 8**

Вычислить радиальную волновую функцию водородоподобного атома в  $2p$  состоянии.

#### **ЗАДАЧА № 9**

Вычислить радиальную волновую функцию водородоподобного атома в  $3s$  состоянии.

#### **ЗАДАЧА № 10**

Вычислить радиальную волновую функцию водородоподобного атома в  $3p$  состоянии.

### Задачи к разделу 6.

#### ЗАДАЧА № 1

Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$  ( $0 < x < a$ ), найти в первом порядке теории возмущений смещение энергетических уровней под воздействием возмущения вида:

$$V(x) = \frac{V_0}{a}(a - |2x - a|).$$

#### ЗАДАЧА № 2

Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$  ( $0 < x < a$ ), найти в первом порядке теории возмущений смещение энергетических уровней под воздействием возмущения вида:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & b < x < a - b, \\ 0, & 0 < x < b, \quad a - b < x < a. \end{cases}$$

#### ЗАДАЧА № 3

Показать, что поправка первого порядка  $E_n^{(1)}$  к энергетическим уровням частицы из предыдущей задачи для произвольного возмущения  $V(x)$  при достаточно больших значениях  $n$  не зависит от  $n$ .

#### ЗАДАЧА № 4

На заряженный линейный осциллятор наложено однородное электрическое поле  $\mathcal{E}$ , направленное вдоль оси колебаний. Рассматривая действие электрического поля как возмущение, рассчитать в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней осциллятора.

#### ЗАДАЧА № 5

Представим гамильтониан осциллятора в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2} + \frac{\alpha\hat{x}^2}{2}.$$

Рассматривая формально слагаемое  $\alpha x^2/2$  как возмущение, рассчитать в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней осциллятора. Ответ сравнить с точным решением. Каково условие сходимости ряда теории возмущений?

### ЗАДАЧА № 6

На частицу в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$  ( $0 < x < a$ ) наложено возмущение вида  $V(x) = V_0 \cos^2 \frac{\pi x}{a}$ . Рассчитать изменение энергетических уровней частицы в первых двух порядках теории возмущений.

### ЗАДАЧА № 7

Плоский ротор с моментом инерции  $I$  и электрическим дипольным моментом  $\mathbf{d}$  помещен в однородное электрическое поле  $\varepsilon_0$ , лежащее в плоскости вращения. Рассматривая действие поля как возмущение, найти поляризуемость основного состояния ротора.

### ЗАДАЧА № 8

Частица находится в центральном поле вида

$$U(r) = -\frac{U_0}{\exp(r/a) - 1},$$

причем  $ma^2U_0/\hbar^2 \gg 1$ . В первом порядке теории возмущений найти отличие энергетических уровней нижней части спектра от уровней энергии в кулоновском поле  $\tilde{U}(r) = -U_0a/r$ . Обратить внимание на снятие «случайного» кулоновского вырождения уровней. Указать условие применимости полученного результата.

### ЗАДАЧА № 9

То же, что и в предыдущей задаче, для потенциала Юкавы  $U(r) = -\alpha \exp(-r/a)/r$  при условии  $m\alpha a/\hbar^2 \gg 1$ .

### ЗАДАЧА № 10

Найти приближенный вид волновых функций стационарных состояний и энергетические уровни нижней части спектра плоского ротора, имеющего дипольный момент  $\mathbf{d}$ , в сильном электрическом поле  $\varepsilon_0$ , таком, что  $Id\varepsilon_0/\hbar^2 \gg 1$ . Указать условие применимости результата.

**Задачи к разделу 7.**

**ЗАДАЧА № 1**

Найти собственные функции и собственные значения операторов, определяемых матрицами Паули.

**ЗАДАЧА № 2**

Вычислить квадрат проекции спина электрона на произвольное направление.

**ЗАДАЧА № 3**

Найти скалярное произведение спинов двух частиц в триплетном и синглетном состояниях. Спин частицы равен  $\hbar/2$

**ЗАДАЧА № 4**

Выписать спектральные обозначения терма, у которого  $S = 3/2, L = 2, g = 0$ ;

**ЗАДАЧА № 5**

Выписать спектральные обозначения терма, у которого  $S = 1/2; J = 3/2, g = 4/3$ .

**ЗАДАЧА № 6**

Две тождественные частицы находятся во внешнем поле  $U(r)$  и слабо взаимодействуют друг с другом с оператором  $V_{12}$ . Предполагая решение уравнения Шредингера для одной частицы во внешнем поле известным, найти орбитальную волновую функцию для системы из двух частиц.

**ЗАДАЧА № 7**

Определить обменное расщепление уровней энергии системы двух электронов, рассматривая взаимодействие  $V_{12}$  как малое возмущение.

**ЗАДАЧА № 8**

Вычислить обменную энергию атома гелия при условии, что электроны находятся в состояниях  $1s$  и  $2s$ .

**ЗАДАЧА № 9**

Зная экспериментальные значения энергии парасостояния ( $E_s = -58,3712$  эВ) и ортосостояния ( $E_a = -59,1600$  эВ) атома гелия с электронной конфигурацией  $1s^1 2s^1$  найти обменную и кулоновскую энергию взаимодействия электронов.

**ЗАДАЧА № 10**

Записать полные волновые функции орто- и парасостояний для атомов (или ионов) с электронной конфигурацией  $1s^1 2s^1$ .

### Задачи к разделу 8.

#### ЗАДАЧА № 1

Рассчитать в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния двухэлектронного атома (или иона), рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение. Получить значение потенциала ионизации системы и сравнить его с экспериментальными данными для атома гелия и ионов лития, бериллия, углерода.

#### ЗАДАЧА № 2

Рассчитать в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния и потенциал ионизации двухэлектронного атома (или иона), выбрав невозмущенный гамильтониан в виде

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - Z_{эфф} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$$

(использована атомная система единиц). Параметр  $Z_{эфф}$  в этом гамильтониане выбрать из условия обращения в нуль поправки первого порядка к энергетическому уровню системы. Сравнить с результатом предыдущей задачи (см. также следующую задачу).

#### ЗАДАЧА № 3

Найти энергию и потенциал ионизации основного состояния двухэлектронного иона, исходя из вариационного принципа. В качестве пробной функции взять произведение водородных функций с некоторым эффективным зарядом  $Z_{эфф}$ , играющим роль вариационного параметра.

#### ЗАДАЧА № 4

Используя выражение для электронной плотности нейтрального атома согласно модели Томаса – Ферми, найти зависимость от  $Z$  среднего расстояния электрона от ядра и среднего значения квадрата этой величины. Каково значение  $\bar{r}^n$  для  $n \geq 3$ ?

#### ЗАДАЧА № 5

Найти распределение электронов по импульсам в нейтральном атоме с зарядом ядра  $Z$  согласно модели Томаса – Ферми. Учсть, что универсальная функция  $\chi(x)$  этой модели, определяющая объемную плотность электронов, монотонно убывает с ростом  $x$ .

## Приложение Б

(справочное)

### Вопросы к опросу по учебному модулю

#### Вопросы по разделу 1.

1. В опытах Дэвиссона и Джермера были обнаружены:

- а) Дифракция электронов
- б) Поляризация рентгеновских лучей
- в) Эффект Комптона
- г) Корпускулярные свойства света
- д) Линейчатые спектры атомов.

2. Опыты по дифракции микрочастиц свидетельствуют ...

- а) о наличии у микрочастиц волновых свойств
- б) о кристаллической структуре твердых тел
- в) о малых размерах микрочастиц
- г) размеры атомов кристаллического вещества превышают размеры микрочастиц
- д) о классической механике.

3. Гипотеза Планка состоит в том, что ....

- а) электромагнитные волны излучаются в виде отдельных порций (квантов), энергия которых зависит от частоты
- б) Электромагнитные волны поперечны
- в) Нельзя одновременно точно определить значение координаты и импульса
- г) электромагнитные волны излучаются зарядами движущимися с ускорением
- д) скорость света постоянна во всех инерциальных системах отсчета.

4. Какие частицы обладают волновыми свойствами?

- а) Любые частицы
- б) Только заряженные частицы
- в) Электрически нейтральные частицы
- г) Частицы, движущиеся с большими скоростями
- д) Частицы, движущиеся с ускорением.

5. Какое из приведенных утверждений является верным в теории Бора?

- а) Разрешенными орбитами для электронов являются такие, для которых момент импульса электронов кратен целому числу величин  $h$ .
- б) Энергия электрона на орбите и ее радиус могут быть произвольными.
- в) Радиус орбиты электрона с течением времени увеличивается.
- г) При движении электронов по орбите происходит непрерывной излучение энергии.
- д) Радиус орбиты электрона с течением времени уменьшается.

6. Под квантованием в физике понимается ...

- а) дискретность допустимых для частицы значений энергии, момента импульса, проекций магнитного и собственного
- б) удовлетворение принципу Паули
- в) описание механического состояния частицы с помощью волновой функции
- г) движение частицы, не подчиняющейся законам классической физики
- д) не удовлетворение принципу Паули.

7. Согласно гипотезе де Бройля не только фотон, но и каждый объект обладает ... свойствами
- корпускулярными и волновыми
  - электрическими
  - корпускулярными
  - световыми
  - волновыми.
8. Волновая функция или функция состояния дает возможность ...
- предсказать, какие значения всех измеряемых величин будут наблюдаться на опыте и с какой вероятностью
  - описать закон движения частицы
  - получить информацию о значении координат и импульса частицы
  - получить информацию о значении энергии и интервале времени, в течение которого частица имеет эту энергию
  - описать законы термодинамики.
9. Гипотеза Луи де Бройля состоит в том, что ...
- материальные микрочастицы обладают волновыми свойствами
  - свет-это электромагнитная волна
  - свет представляет собой совокупность частиц (квантов, фотонов)
  - не только световые, но и любые другие электромагнитные волны излучаются в виде порций (квантов)
  - свет распространяется прямолинейно
10. Корпускулярно - волновой дуализм материи заключается в том, что ...
- все материальные объекты в природе обладают волновыми свойствами
  - свет - это и поток фотонов, и электромагнитные волны
  - вещество и поле – 2 разновидности материи
  - при определенных условиях частицы вещества порождают поле, а поле порождает частицы
  - условиях частицы вещества порождают поле, а поле порождает частицы.
11. Состояние частицы в квантовой механике считается заданным, если заданы
- Волновая функция ( $\psi$  - функция)
  - Координата и импульс частицы
  - Энергия
  - Масса и энергия
  - Координаты частицы.
12. В силу наличия у микрочастиц волновых свойств к ним неприменимо понятие: 1-импульса, 2-энергии, 3-траектории, 4-массы.
- 3
  - 1 и 4
  - 2 и 4
  - 1 и 3
  - 2.
13. Чем определяется граница между классическим и квантовым описанием поведения микрочастиц?
- Соотношением неопределенностей Гейзенберга
  - Массой частиц

- в) Скоростью и размерами частиц
- г) Соотношением между длиной волны де Бройля и размерами препятствий или неоднородностей на пути движения частицы
- д) Скоростью частиц.

14. Длина волны де Бройля определяется формулой...

- а)  $\lambda = \frac{h}{mv}$
- б)  $\lambda = cT$
- в)  $\lambda = 2\pi c / \omega$
- г)  $\lambda = d \sin \varphi$
- д)  $\lambda = \frac{\ln 2}{T}$ .

15. Энергия фотона...

- а)  $\varepsilon = h\nu$
- б)  $E = mc^2$
- в)  $p = \frac{W}{c}$
- г)  $\lambda_{\max} = \frac{b}{T}$
- д)  $F = ma$ .

16. Волновая функция  $\Psi(\{x\}, t)$  должна быть

- а) положительной
- б) дифференцируемой
- в) действительной
- г) антисимметричной.

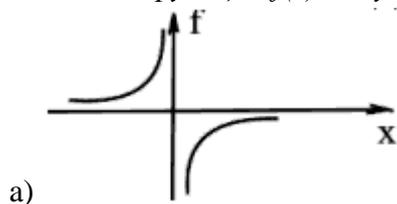
17. Общие требования к волновой функции. Волновая функция  $\Psi(\{x\}, t)$  должна быть

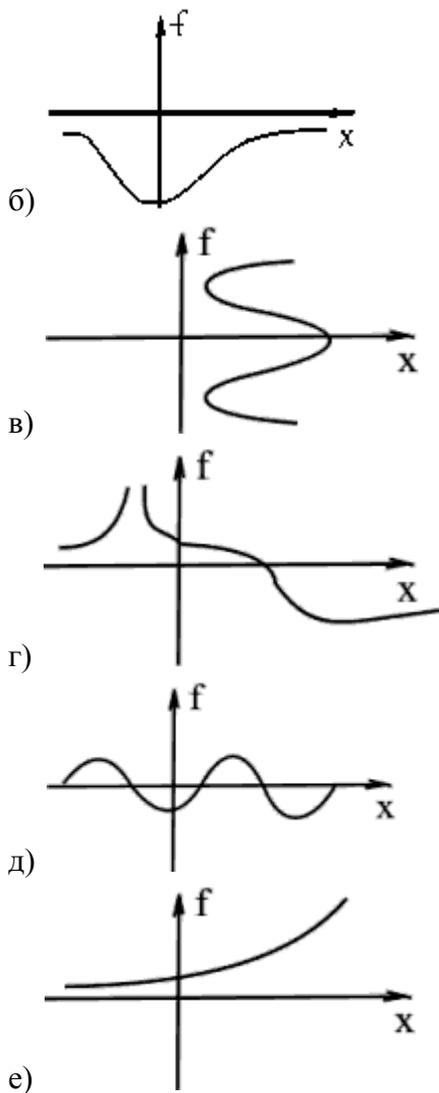
- а) определенной во всей области изменения переменных
- б) неотрицательной
- в) конечной
- г) однозначной
- д) симметричной
- е) антисимметричной.

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

- а) увеличится
- б) не изменится
- в) уменьшится
- г) изменится в зависимости от рассматриваемой системы
- д) изменится непредсказуемым образом

19. Из приведенных функций  $f(x)$  могут быть волновыми функциями





20. Пси( $\psi$ ) функция – это ... .

- а) амплитуда вероятности попадания микрочастиц в данную точку с координатами  $(x, y, z, t)$
- б) величина с координатами  $(x, y, z, t)$
- в) вероятность попадания электронов в пространство
- г) величина зависимости энергии от скорости частицы
- д) величина зависимости работы, от импульса частицы

### Вопросы по разделу 2.

1. Записать оператор импульса и оператор проекции импульса в координатном представлении.
2. Дать определение линейности оператора.
3. Собственные значения эрмитова оператора всегда
  - а) образуют непрерывный спектр
  - б) комплексные
  - в) действительные
  - г) отрицательные
  - д) равны между собой
4. Для линейного оператора  $A$  верно
  - а)  $A(a_1f_1 + a_2f_2) = a_1Af_1 + a_2Af_2$
  - б)  $A(f_1 + f_2) = Af_1Af_2$
  - в)  $Aaf = aAf$

г)  $Af_1f_2 = Af_1 + Af_2$

5. Для коммутирующих операторов  $A_1$  и  $A_2$  верно

а)  $[A_1, A_2] = 0$

б)  $[A_1, A_2] = [A_2, A_1]$

в)  $A_1f_1 + A_2f_2 = A_1A_2f_1f_2$

г)  $A_1A_2f = A_2A_1f$

д)  $A_1f_1A_2f_2 = A_1f_2A_2f_1$

6. Линейными операторами являются

а)  $Af = -f$

б)  $Af = f^3$

в)  $Af = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f$

г)  $Af = \frac{\partial}{\partial x} f$

д)  $Af = \frac{1}{\sqrt{f}}$

7. Записать общую формулу вычисления средних значений физической величины.

8. Записать условие нормировки волновых функций на единицу.

9. Записать условие нормировки волновых функций на дельта-функцию.

10. Записать условие ортогональности состояний.

### Вопросы по разделу 3.

1. В квантовой механике одновременно не могут быть определены с любой точностью

а) энергия и время

б) координаты и скорость

в) импульс и энергия

г) импульс и координаты

2. Дать определение соотношению неопределенности

а) Является квантовым ограничением к применимости классической механике к микрообъектам

б) Состояние с фиксируемым значением энергии

в) Вырыванием электронов из вещества под действием света

3. Дать формулировку принципа Гайзенберга в общем виде.

4. Дать формулировку принципа Гайзенберга для координаты и импульса.

5. Дать формулировку принципа Гайзенберга в энергии и времени.

6. Сформулировать принцип дополнительности Бора.

### Вопросы по разделу 4.

1. Волновое уравнение Шредингера имеет вид:

а)  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + v(x, y, z, t)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$

б)  $\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}$

в)  $W = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV = 1$

г)  $W = |\psi|^2 dV$

$$\text{д) } -\frac{\hbar^2}{2m} + v(x, y, z, t)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

2. Уравнение Шредингера для стационарных состояний

$$\text{а) } \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

$$\text{б) } -\frac{2m}{\hbar^2}\Delta\psi(x, y, z, t) + W^n(x, y, z, t)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\text{в) } \psi(x, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Wt - px)}$$

$$\text{г) } \psi = \psi(x, y, z, t)$$

$$\text{д) } -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

3. Основным уравнением нерелятивистской квантовой механики для стационарных состояний является

$$\text{а) } \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

$$\text{б) } \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\text{в) } \int S|\psi|^2 d_0V = 1$$

$$\text{г) } E = \hbar\omega$$

$$\text{д) } \lambda = \frac{2\pi\hbar}{P}$$

4. Записать волновое уравнение Шредингера как уравнение непрерывности.

5. Записать явный вид плотности вероятности и вектора плотности тока вероятности.

6. Перечислить основные свойства стационарных состояний.

7. Сформулировать правило квантования Бора-Зоммерфельда и условие его применимости.

8. Гамильтониан осциллятора.

9. Выражение для операторов  $a$  и  $a^+$  через операторы координаты и импульса.

10. Выражение операторов координаты и импульса через операторы  $a$  и  $a^+$ .

11.  $[a; a^+] = ?$ .

12. Выражение гамильтониана осциллятора через  $a$  и  $a^+$ .

13. Спектр осциллятора.

14. Состояния осциллятора (квантовые числа и их значения).

15.  $a|n\rangle = ?$

16.  $a^+|n\rangle = ?$

17.  $a|0\rangle = ?$

18. Выразить  $|n\rangle$  через основное состояние  $|0\rangle$ .

19. Волновая функция основного состояния осциллятора.

20. Общий вид волновой функции квазиклассического приближения в классически разрешенной области.

21. Точки поворота (определение).

22. Условие применимости квазиклассического приближения.

23. Условия квантования Бора-Зоммерфельда.

24. Плотность энергетического спектра в квазиклассическом приближении.

25. Связь коэффициентов прохождения и отражения.

### **Вопросы по разделу 5.**

1. Полный набор физических величин бесспиновой частицы в центральном поле.
2. Разделение переменных  $\Psi(r) = ?$
3. Радиальное уравнение.
4. Асимптотическое поведение радиальной функции  $R_{nl}(r)$  при  $r$  стремящемся к нулю.
5. Асимптотическое поведение радиальной функции  $R_{nl}(r)$  при  $r$  стремящемся к бесконечности.
6. Эффективная потенциальная энергия.
7. Гамильтониан атома водорода.
8. Атомная система единиц.
9. Полный набор и значения, которые могут принимать квантовые числа, определяющие состояние атома водорода.
10. Спектр атома водорода.
11. Кратность вырождения уровней энергии атома водорода.
12. Волновая функция основного состояния атома водорода.

### **Вопросы по разделу 6.**

1. Поправка первого порядка к уровням энергии для невырожденного спектра.
2. Поправка второго порядка к уровням энергии для невырожденного спектра.
3. Критерий применимости теории возмущений.
4. Обозначения Дирака. Скобки "бра" и "кэт".
5. "Золотое правило" Ферми.
6. Атом водорода помещен в постоянное электрическое поле. Напишите оператор возмущения, обусловленного взаимодействием электрона с этим полем.
7. Линейный гармонический осциллятор помещен в постоянное электрическое поле. Напишите оператор возмущения, обусловленного взаимодействием осциллятора с этим полем.
8. Нестационарная теория возмущений.
9. «Отталкивание» уровней.
10. Теория возмущений при наличии вырождения. Секулярное уравнение.

### **Вопросы по разделу 7.**

1. Что понимается под "координатой" частицы  $x$  при описании тождественных частиц?
2. Для ферми-частиц  $P \Psi(x_1; x_2) = ?$ , где  $P$  - оператор перестановки частиц.
3. Для бозе-частиц  $P \Psi(x_1; x_2) = ?$ , где  $P$  - оператор перестановки частиц.
4. Записать волновую функцию двух невзаимодействующих тождественных ферми-частиц.
5. Записать волновую функцию двух невзаимодействующих тождественных бозе-частиц.
6. Полный набор квантовых чисел, описывающих состояние свободного сложного атома.
7. Как определяется четность состояния атома с заданной конфигурацией?
8. Какова четность относительно перестановки координат координатной части волновой функции двух электронов, имеющих полный спин  $S = 1$ ?
9. Какова четность относительно перестановки координат координатной части волновой функции двух бозе-частиц со спином  $s = 1$ ; имеющих полный спин  $S = 1$ ?
10. Принцип запрета Паули.
11. Детерминант Слейтера.
12. Основное состояние атома гелия. Орто- и парагелий.
13. Системы из каких квантовых частиц описываются функцией распределения Ферми-Дирака:
  - а) Системы из частиц с полуцелым спином

- б) Системы из частиц с целым спином
- в) Системы из частиц с нулевым спином
- г) Системы из частиц, практически не взаимодействующих между собой
- д) Системы из частиц очень высоких энергий.

14. Какая из формулировок соответствует принципу Паули:

- а) В квантово-механической системе не может быть двух или более электронов, находящихся в состоянии с одинаковым набором квантовых чисел
- б) Энергетический спектр электронов в квантово-механической системе дискретен
- в) В квантово-механической системе не может быть двух или более электронов, обладающих одинаковым спином
- г) Состояние микрочастицы в квантовой механике задается волновой функцией  $\psi$
- д) Состояние микрочастицы в квантовой механике не может одновременно характеризоваться точными значениями координаты и импульса.

### **Вопросы по разделу 8.**

1. Оператор Гамильтона многоэлектронного атома.
2. Система уравнений Хартри.
3. Самосогласованное поле Хартри.
4. Метод Фока.
5. Обменный и кулоновский интегралы.
6. Статистический метод Томаса-Ферми. Область применимости теории.
7. Уравнение Томаса-Ферми в безразмерных переменных.
8. Полные орбитальные и спиновые квантовые числа.
9. Квантовое число полного момента.
10. Термы многоэлектронных атомов.