

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Косенок Сергей Михайлович
Должность: ректор
Дата подписания: 01.07.2025 15:20:09
Уникальный идентификатор документа:
e3a68f3eaa1a62674b54fa998099d3d6bfdf836

Тестовое задание для диагностического тестирования по дисциплине:

Квантовая химия, 6 семестр

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность
(профиль)

Аналитическая химия

Форма обучения

Очная

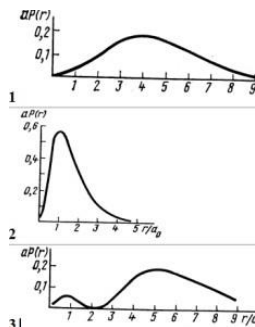
Кафедра-разработчик

Химии

Выпускающая кафедра

Химии

Проверяемая компетенция	Задание	Варианты ответов	Тип сложности вопроса
ОПК-1.1 ОПК-1.2	Основоположником теории атома водорода стал:	А) Макс Планк В) Эрнест Резерфорд С) Альберт Эйнштейн D) Нильс Бор	Низкий
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Согласно принципу неопределённости, невозможно одновременно точно измерить	А) Скорость и массу частицы В) Энергию и импульс частицы С) Координату и скорость частицы D) Заряд и спин частицы	Низкий
ОПК-1.1 ОПК-1.2	При каком условии оператор считается эрмитовым?	А) Если среднее значение оператора вещественное число В) Если оператор имеет комплексное представление С) Если спектр оператора непрерывный D) Если собственное значение равно нулю	Низкий
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Гамильтониан — это оператор, соответствующий физической величине:	А) Импульсу В) Координате С) Кинетической энергии D) Полной энергии	Низкий
ОПК-1.1 ОПК-1.2	Какие операторы являются примером некоммутативных операторов?	А) Операторы координаты и импульса В) Гамильтониан и оператор полного момента импульса С) Операторы квадрата полного момента импульса и любой компоненты момента импульса D) Операторы $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_y$	Низкий
ОПК-1.1 ОПК-1.2	При движении электрона в одномерной потенциальной яме разрешённые энергетические уровни образуют:	А) Непрерывный спектр В) Дискретный набор С) Случайное распределение D) Равномерное заполнение промежутков между уровнем нуля и бесконечности	Средний
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1	Какая функция является решением θ -уравнения для водородоподобного атома:	1) присоединенный полином Лежандра 2) полином Шредингера 3) присоединенный полином Лягерра 4) полином Чебышева-Эрмита	Средний

ОПК-5.3															
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-5.3	Квантовые числа, определяющие угловую часть волновой функции	A) l, m B) n, l C) m, s l, s	Средний												
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-5.3	Чему равно число узловых поверхностей угловой составляющей волновой функции орбитали 2s (ввести число)		Средний												
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Найдите соответствие между приведенными системами и определителями Слейтера	<table><thead><tr><th>Система</th><th></th><th>Определители Слейтера</th></tr></thead><tbody><tr><td>1</td><td>$\varphi_1(\uparrow)\varphi_2(\uparrow)$</td><td>A $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}$</td></tr><tr><td>2</td><td>$\varphi_1(\uparrow\downarrow)$</td><td>B $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$</td></tr><tr><td>3</td><td>$\varphi_1(\uparrow)\varphi_2(\downarrow)$</td><td>C $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$ D $\begin{vmatrix} \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$</td></tr></tbody></table>	Система		Определители Слейтера	1	$\varphi_1(\uparrow)\varphi_2(\uparrow)$	A $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}$	2	$\varphi_1(\uparrow\downarrow)$	B $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$	3	$\varphi_1(\uparrow)\varphi_2(\downarrow)$	C $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$ D $\begin{vmatrix} \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$	Средний
Система		Определители Слейтера													
1	$\varphi_1(\uparrow)\varphi_2(\uparrow)$	A $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}$													
2	$\varphi_1(\uparrow\downarrow)$	B $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$													
3	$\varphi_1(\uparrow)\varphi_2(\downarrow)$	C $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$ D $\begin{vmatrix} \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$													
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Чему равна мультиплетность молекулы в триплетном электронном состоянии (введите число)		Средний												
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-5.3	Найдите соответствие между обозначениями электронных орбиталей и их радиальными функциями распределения $aP(r)$:	 A) 1s B) 2s C) 2p	Средний												
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Что служит основой для введения адиабатического приближения?	A) медленно меняющаяся функция ядерных координат B) малая величина кинетической энергии электронов C) большая масса ядер по сравнению с массой электронов D) малая величина кинетической энергии ядер E) слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами	Средний												
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Интеграл $\hat{J} = e \int \int \psi_i^2(i) r_{ij}^{-1} \psi_j^2(j) d\tau_1 d\tau_2$ называют	F) обменным G) кулоновским H) резонансным I) интегралом перекрывания	Средний												

ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Чем метод Хартри-Фока-Ругана отличается от метода Хартри-Фока ?	А) введением приближения МО ЛКАО В) более полным учётом электронного отталкивания С) введением приближения самосогласованного поля D) учётом интеграла перекрывания Е) инвариантностью относительно ортогональных преобразований МО	Средний
ОПК-1.1 ОПК-1.2	Какие общие требования к волновой функции $\Psi(\{x\}, t)$ должны выполняться	А) определенной во всей области изменения переменных В) неотрицательной С) симметричной D) антисимметричной Е) конечной F) однозначной	Высокий
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-5.3	Выберите правильные утверждения для радиальной составляющей волновой функции:	А) входит в состав волновой функции электрона в атоме $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ как сомножитель В) $R \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$ С) волновые функции с одинаковыми $R_{n,l}(r)$ вырождены по энергии D) $R \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow \infty$ Е) радиальная часть волновой функции пропорциональна радиусу r^n вблизи начала координат F) радиальные части волновой функции для разных уровней энергии (разных n) обязательно пересекаются минимум один раз	Высокий
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Для конфигурации p^3 найдены термы: $^5S, ^3S, ^3P, ^1D, ^3D$. Установите последовательность состояний по устойчивости		Высокий
ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Коэффициенты c_{ij} в разложении МО ψ_j метиленициклопропена в простом методе МОХ представим в виде матрицы: $c_{ij} = \begin{pmatrix} 0,282 & 0,612 & 0,523 & 0,523 \\ 0,815 & 0,254 & -0,368 & -0,368 \\ 0 & 0 & 0,707 & -0,707 \\ 0,506 & -0,749 & 0,303 & 0,302 \end{pmatrix}$ Вычислите порядок π -связи P_{12} между 1 и 2 атомами углерода. Ответ введите числом с точностью до тысячных.		Высокий
ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.2 ОПК-5.3	Расставьте перечисленные квантово-химические методы в порядке возрастания точности расчета:	А) Метод функционала плотности В) Расширенный метод Хартри-Фока С) Метод Хюккеля D) Метод полного конфигурационного взаимодействия	Высокий