

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 и квантовая механика

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

А.С. Князев

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

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

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

ПК-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских и/или производственных задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 1.1 Приобретает систематические теоретические и практические знания в избранной области химии или смежных наук, анализирует возникающие в процессе научного исследования проблемы с точки зрения современных научных теорий, осмысливает и делает обоснованные выводы из научной и учебной литературы

ИОПК 1.3 Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 1.4 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач

ИПК 1.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

– индивидуальное задание;

Примеры индивидуальных заданий (ИОПК-1.1, ИОПК-1.3-1.4, ИПК-1.2.):

Индивидуальное задание №1

Сформировать входные файлы для систем, представить результат графически (формат jpg) и измерить межатомные расстояния с помощью VESTA:

- 1) Этилен
- 2) Бутатриен
- 3) Циклобутадие
- 4) Метилциклопропен
- 5) NaCl
- 6) Si
- 7) Fe
- 8) GaTe

Индивидуальное задание №2

Сформировать 1 часть входного файла OpenMX для:

- 1) Этилен
- 2) Бутатриен
- 3) Циклобутадие
- 4) 3-Метилциклопропен

Индивидуальное задание №3

Сформировать 2-ю часть входного файла OpenMX для:

- 1) Этилен
- 2) Бутатриен
- 3) Циклобутadiен
- 4) 3-Метилциклопропен

Критерии оценивания:

Оценка «Зачтено» ставится при выполнении следующих условий:

– индивидуальное задание выполнено в полном объеме, в индивидуальном задании правильно и аккуратно оформлены все необходимые записи, таблицы, рисунки, графики, вычисления, сделанные выводы соответствуют задачам работы и содержат итоговые качественные и количественные результаты исследований;

– индивидуальное задание выполнено в полном объеме; структура отчёта соответствует вышеописанным пунктам, в индивидуальном задании оформлены все таблицы, рисунки, графики, вычисления, но допущено два-три недочета, или не более двух негрубых ошибок;

Оценка «Не зачтено» ставится при выполнении следующих условий:

– обучающийся не выполнил работу;

– качество проведенных измерений не позволяет сделать верных и обоснованных выводов (допущены принципиальные ошибки в вычислениях, в выполнении работы);

– Индивидуальное задание выполнено не полностью, так что объем выполненных наблюдений не достаточен для достижения поставленной в работе цели и не позволяет сделать верных и обоснованных выводов.

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

Экзамен в третьем семестре проводится в письменной форме в виде теста, проверяющего ИОПК-1.1-1.4. В ходе контрольного теста необходимо заполнить таблицу используя входной файл для расчетного кода OpenMX.

Контрольный тест:

Итоговое задание: Заполнить таблицу, используя входной файл.

Название файла		
Тип системы (атом, молекула, кристалл)		
Изображение системы		
Тип расчета		
Самосогласование	Приближение для обменно-корреляционной энергии	
	Сетка k-точек	
	Критерий сходимости	
	Спин-орбитальное взаимодействие	
Релаксация	Да\нет, если да то описать условия релаксации	
Магнетизм	Да\нет	

	Величина затравочного магнитного момента	
	Затравочная магнитная конфигурация (ФМ, АФМ, др.)	
	Модель Хаббарда: Да\нет, если да, то привести значении U, сорт атома и орбиталь, для которой применяется параметр	
Энергетический спектр	Да\нет	
	<u>Атомы,</u> молекулы (количество рассчитываемых орбиталей для визуализации)	
	<u>Кристаллы</u> (сколько направлений, сколько точек на направлении)	
Плотность состояний	Да\нет	
	Диапазон энергий	
	Сетка k-точек	

Пример входного файла:

```
#
# File Name
#

System.CurrentDirectory ./ # default=./
System.Name feo
level.stdout 1 # default=1 (1-3)
level.fileout 0 # default=1 (0-2)

#
# Definition of Atomic Species
#

Species.Number 2
<Definition.of.Atomic.Species
Fe Fe6.0S-s2p2d2f1 Fe_CA13S
O O5.0-s2p2d1 O_CA13
Definition.of.Atomic.Species>
```

```
<Hubbard.U.values      # eV
Fe 1s 0.0 2s 0.0 1p 0.0 2p 0.0 1d 5.0 2d 0.0 1f 0.0
O  1s 0.0 2s 0.0 1p 0.0 2p 0.0 1d 0.0
Hubbard.U.values>
```

```
#
# Atoms
#
```

```
Atoms.Number      4
Atoms.SpeciesAndCoordinates.Unit  AU # Ang|AU
<Atoms.SpeciesAndCoordinates      # Unit=AU
1 Fe 0.0000  0.000  0.000   8.0 6.0 120.01 60.0 127.45 61.78 0 off
2 Fe 4.0725  4.0725  0.000   6.0 8.0 120.01 60.0  52.55 241.78 0 off
3 O  4.0725  0.000  0.000   3.0 3.0      0.01 0.0  0.01 0.0  0 off
4 O  4.0725  4.0725  4.0725  3.0 3.0      0.01 0.0  0.01 0.0  0 off
Atoms.SpeciesAndCoordinates>
```

```
Atoms.UnitVectors.Unit      AU # Ang|AU
<Atoms.UnitVectors          # unit=AU
8.1450  4.0725  4.0725
4.0725  8.1450  4.0725
4.0725  4.0725  8.1450
Atoms.UnitVectors>
```

```
#
# SCF or Electronic System
#
```

```
scf.XcType          LSDA-CA  # LDA|LSDA-CA|LSDA-PW|GGA-PBE
scf.Hubbard.U       on      # On|Off , default=off
scf.Hubbard.Occupation  dual  # onsite|full|dual, default=dual
scf.SpinPolarization  NC    # On|Off|NC
scf.SpinOrbit.Coupling on    # On|Off, default=off
scf.ElectronicTemperature 300.0 # default=300 (K)
scf.energycutoff    210.0   # default=150 (Ry)
scf.maxIter         200     # default=40
scf.EigenvalueSolver band   # Recursion|Cluster|Band
scf.Kgrid           5 5 5   # means 4x4x4
scf.Mixing.Type      rmm-diis # Simple|Rmm-Diis|Gr-Pulay|Kerker|Rmm-Diisk
scf.Init.Mixing.Weight 0.010 # default=0.30
scf.Min.Mixing.Weight  0.010 # default=0.001
scf.Max.Mixing.Weight  0.250 # default=0.40
scf.Mixing.History    30    # default=5
scf.Mixing.StartPulay 10    # default=6
scf.criterion        1.0e-5 # default=1.0e-6 (Hartree)
```

```
#
# MD or Geometry Optimization
#
```

MD.Type	Nomd	# Nomd Constant_Energy_MD Opt
MD.maxIter	1	# default=1
MD.TimeStep	0.01	# default=0.5 (fs)
MD.Opt.criterion	1.0e-4	# default=1.0e-4 (Hartree/bohr)

Критерии оценивания:

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

Оценка «отлично» ставится в случае полного ответа на все вопросы в тесте.

Оценка «хорошо» ставится при ответе на 70-99% вопросов в тесте.

Оценка «удовлетворительно» ставится при ответе на 50-69% вопросов в тесте.

Оценка «неудовлетворительно» ставится в случае отсутствия ответов на вопросы или в случае не более 50 % правильных ответов.

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

Задание 1. (ИОПК-1.3-1.4)

Сформировать входной файл для димера железа (расстояние между атомами 2 ангстрема) для расчета:

- 1) Ферромагнитной конфигурации
- 2) Антиферромагнитной конфигурации
- 3) Для случая ферромагнитного порядка применить модель Хаббрда ($U_{\text{eff}} = 5$ эВ)

Задание 2. (ИОПК-1.3-1.4, ИПК-1.2)

Визуализировать плотность состояний для GaTe (случаи со спин-орбитальным взаимодействием и без). Определить к какому классу относится материал: изолятор, полупроводник, металл. Определить симметрию орбиталей атомов, которые вносят наибольший вклад в область уровня Ферми.

Задание 3. (ИОПК-1.1, ИПК 1.2)

Сформировать входной файл для самосогласованного расчета, с\без магнетизма, с\без спин-орбитального взаимодействия, для расчета электронного спектра, плотности состояний, оптимизации структуры. Тип расчета и система на выбор группы.

Информация о разработчиках

Меньщикова Татьяна Викторовна, канд. физ.-мат. наук, кафедра физической и коллоидной химии, доцент