

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана химического факультета
А. С. Князев

Оценочные материалы по дисциплине

Вычислительные методы в химии

по направлению подготовки / специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) подготовки / специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

химик-специалист, преподаватель

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

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

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-2. Способен проводить синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследовать процессы с их участием;

– ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК 2.2 Знает теоретические основы методов изучения состава, структуры и свойств для грамотного выбора метода исследования

РООПК 3.1 Знает основы теоретической физики, математического анализа и квантовой химии; основные теоретические и полуэмпирические модели, применяемые при решении задач химической направленности

РООПК 3.2 Умеет решать расчетно-теоретические задачи химической направленности по разработанным методикам, использовать аппарат теоретической химии и физики для грамотной интерпретации полученных результатов.

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

- устный опрос;
- отчеты по лабораторным работам.

Устный опрос (РООПК 2.2, РООПК 3.1)

Примерный перечень вопросов:

1. Возникновение вычислительной компьютерной химии как науки: предпосылки, возможности, опасности. Основные программные пакеты, реализующие подходы вычислительной химии, их преимущества и недостатки.

2. Основные понятия квантовой механики: принцип неопределенности, вероятностный характер, волновая функция.

3. Основные постулаты квантовой механики.

4. Вариационный принцип.

5. Одноэлектронное приближение, волновая функция Хартри.

6. Метод самосогласованного поля Хартри, преимущества и недостатки метода.

7. Метод Хартри-Фока для атома. Приближения, используемые в методе Хартри-Фока. Детерминант Слэтера.

8. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока.

9. Гамильтониан молекулы, приближение Борна-Оппенгеймера.

10. Понятие поверхности потенциальной энергии. Примеры одно-, двух-, и многомерных ППЭ.

Критерии оценивания: устный опрос считается пройденным, если обучающий ответил правильно как минимум на 70% вопросов.

Отчет по лабораторной работе (РООПК 3.1, РООПК 3.2)

Перечень лабораторных работ приведен в пособии Фатеев А. В. Вычислительные методы в химии: лабораторные работы: учебно-методическое пособие по курсу «Вычислительные методы в химии» для студентов химического факультета ТГУ / А. В. Фатеев, В. П. Тугульдурова. – Томск: Издательство Томского государственного университета, 2021. – 103 с. По результатам выполненных лабораторных работ каждый студент составляет отчет. Отчет включает в себя цель и задачи работы, краткое изложение теоретических основ (в том числе основные понятия, законы, уравнения и др.), порядок и

методику выполнения работы, результаты эксперимента в виде таблиц и графиков, выводы по работе, содержащие качественные и количественные результаты исследований.

Примеры заданий

Задание к Лабораторной работе № 5

Вычислите, используя теорию функционала плотности и валентно-расщепленный базисный набор 6-31G, электронную энергию, энтальпию, энтропию и свободную энергию Гиббса для следующих молекул:

1. Этиловый спирт и диметиловый эфир;
2. Ацетон и 2-пропенол;
3. 1-бутен и 2-бутен;
4. Глюкоза (линейная форма) и α -D-глюкопираноза;
5. Пентан и 2-метилбутан;
6. Бензол и призмат.

Для каждой молекулы укажите первую частоту колебания. Сделайте вывод об относительной устойчивости исследуемых молекул на основе сравнения значений электронной энергии, энтальпии и энергии Гиббса в кДж/моль.

Задание к Лабораторной работе №6)

Рассчитайте $\Delta_r H$ и $\Delta_r G$ реакции гидрирования этилена, используя метод Хартри-Фока и базисный набор 6-31G(d,p).

Критерии оценивания:

Оценка «Зачтено» ставится при выполнении следующих условий:

– лабораторная работа выполнена в полном объеме; структура отчёта соответствует вышеописанным пунктам, в отчете правильно и аккуратно оформлены все необходимые записи, таблицы, рисунки, графики, вычисления, сделанные выводы соответствуют задачам работы и содержат итоговые качественные и количественные результаты исследований;

– лабораторная работа выполнена в полном объеме; структура отчёта соответствует вышеописанным пунктам, в отчете оформлены все таблицы, рисунки, графики, вычисления, но допущено два-три недочета, или не более двух негрубых ошибок (не влияющих на качество выводов), сделанные выводы соответствуют задачам работы и содержат итоговые качественные и количественные результаты исследований;

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);

– лабораторная работа выполнена не полностью, так что объем выполненных наблюдений не достаточен для достижения поставленной в работе цели и не позволяет сделать верных и обоснованных выводов.

Оценочные материалы в полном объеме содержатся в архиве кафедры и на странице курса в системе Moodle.

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

Для допуска к зачёту необходимо получить оценку «Зачтено» по итогам текущего контроля знаний.

Зачет с оценкой состоит из двух частей:

1. Зачет по практической части курса;
2. Зачет по лекционной части курса в режиме тестирования (Итоговый тест).

Зачет по практической части курса состоит в выполнении одного комплексного задания по всему курсу «Вычислительных методов в химии». Продолжительность зачета 1,5 часа.

Примеры заданий для зачета по практическим занятиям (РООПК 3.1, РООПК 3.2):

1. Рассчитайте с использованием программы Gaussian тепловой эффект реакций дегидрирования циклогексadiens-1,3 и дегидрирования этана. Используйте для этого метод HF/3-21G. Как вы можете объяснить полученные результаты?

2. Рассчитайте относительную устойчивость двух изомеров в газовой фазе: пропенол-2 и пропанон. В какую сторону будет смещено равновесие в кето-енольной таутомерии. Проведите расчет с учетом нулевых колебаний и без их учета. Сравните полученные результаты.

3. В программе Gaussian методом QST2 с использованием базисного набора 3-21 (HF) оптимизируйте переходное состояние реакции $\text{CH}_3\text{-OH} + \text{Br}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{-Br} + \text{OH}^-$. Докажите, что это состояние является переходным, укажите значение энтальпии с учетом энергии нулевых колебаний. Данная реакция протекает в водном растворе.

4. Рассчитайте колебательный спектр молекулы пропена. Сравните с экспериментальным спектром и сделайте вывод о целесообразности использования выбранной вами схемы расчета.

Критерии оценивания:

Оценка «Зачтено» ставится при выполнении следующих условий:

– комплексное задание выполнено в полном объеме; структура отчёта по заданию соответствует вышеописанным пунктам, в отчете правильно и аккуратно оформлены все необходимые записи, таблицы, рисунки, графики, вычисления, сделанные выводы соответствуют задачам работы и содержат итоговые качественные и количественные результаты исследований;

– комплексное задание выполнено в полном объеме; структура отчёта соответствует вышеописанным пунктам, в отчете оформлены все таблицы, рисунки, графики, вычисления, но допущено два-три недочета, или не более двух негрубых ошибок (не влияющих на качество выводов), сделанные выводы соответствуют задачам работы и содержат итоговые качественные и количественные результаты исследований;

Оценка «Не зачтено» ставится при выполнении следующих условий:

– обучающийся не выполнил комплексное задание;

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

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

Зачет по лекционной части курса проводится в тестовой форме. Итоговый тест состоит из 40 вопросов по всему курсу «Вычислительных методов в химии». Каждый вопрос оценивается в 1 балл. На выполнение теста отводится 60 минут.

Примеры заданий для зачета по лекционной части курса (РООПК 2.2, РООПК 3.1):

1. Переходное состояние соответствует на ППЭ точке, которая называется

- a) Глобальный минимум
- b) Локальный минимум
- c) Локальный максимум
- d) Седловая точка

2. Полуэмпирический метод, используемый для расчета спектра молекул

- a) ZINDO/S
- b) AM1
- c) PM3
- d) PM6

3. Выбери верное утверждение о теории функционала плотности

- a) Улучшенная теория Хартри-Фока
- b) Метод учета электронной корреляции
- c) Ключевой физической величиной является электронная плотность ρ

д) Не использует корреляционно-обменный функционал

4. Соотнесите базисный набор и рассчитываемое свойство

| | | | |
|---|---|---|---------------|
| 1 | Внутри- и межмолекулярные взаимодействия | A | HF/6-31++G** |
| 2 | Молекулярная геометрия | B | HF/6-31++G** |
| 3 | Химическая связь. Энергии реакций | C | MP2/6-311+G** |
| 4 | Взаимодействие ионов и диполей. Водородные связи | D | HF/6-31G |

5. Выберите адекватную схему расчета энергии системы с учетом электронной корреляции

а) CCSD(T)/cc-pVQZ//MP2/6-31G(d)

б) MP2/6-31G(d)//MP4/6-31G(d)

в) HF/6-311G(d)//HF/6-31G

г) CIS/6-31G(d)//CIS/cc-pVQZ

6. В основе метода Хартри-Фока для атомов лежит

а) Вариационный принцип и приближение независимых частиц, процедура ССП

б) Метод МО ЛКАО, одноэлектронное приближение

в) Приближение независимых частиц, детерминант Слетера, процедура ССП

г) Теорема Купманса, детерминант Слетера, процедура ССП

Критерии оценивания:

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

Оценка «отлично» выставляется, если обучающий выполнил тест и получил 30 и более баллов;

Оценка «хорошо» выставляется, если обучающий выполнил тест и получил не менее 25, но не более 30 баллов;

Оценка «удовлетворительно» выставляется, если обучающий выполнил тест и получил не менее 20, но не более 25 баллов;

Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если не выполнил тест и/или получил менее 20 баллов.

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

1. При расчете каким методом значение энергии частицы будет меньше?

A) HF/STO-3G

Б) HF/3-21G

В) HF/6-31G (d, p)

Г) HF/6-311++G(3df,2p)

2. В каких единицах измерения вычислительные программы представляют электронную энергию системы?

A) ккал/моль

Б) Хартри

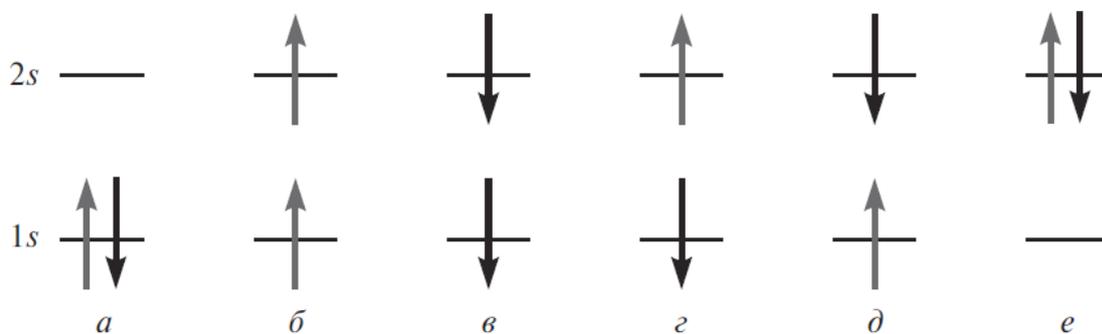
В) кДж/моль

Г) кал/моль

3. Сопоставьте тип спектра с областью электромагнитного излучения, в которой они получены.

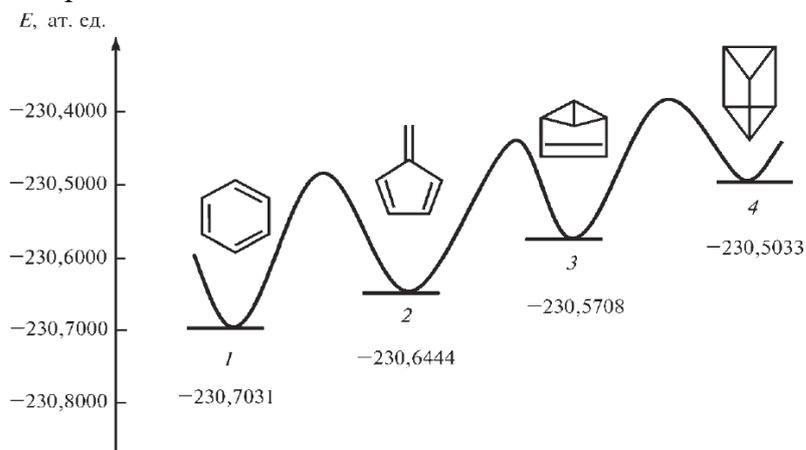
| | |
|-------------------------|---------------------------|
| А) Электронный спектр | 1 – Инфракрасная область |
| Б) Колебательный спектр | 2 – Микроволновая область |
| В) Вращательный спектр | 3 – УФ-видимая область |

4. Основному состоянию распределения электронов для атома He соответствует схема



- А) б и в
- Б) г и д
- В) а
- Г) е
- Д) все вышеперечисленные

5. Наиболее стабильным валентным изомером молекулы C_6H_6 является структура под номером



- А) 1
- Б) 2
- В) 3
- Г) 4

6. Выбери неверное утверждение о теории функционала плотности

- А) Не относится к методу Хартри-Фока
- Б) Учитывает электронную корреляцию
- В) Ключевой физической величиной является электронная плотность
- Г) Не использует корреляционно-обменный функционал

7. Метод, основанный на предположении, что взаимодействие каждого электрона со всеми остальными электронами заменено на его взаимодействие с усредненным полем, создаваемым всеми остальными электронами:

- А) Метод Кона-Шэма
- Б) Метод Хартри-Фока
- В) Метод Ритца
- Г) Полуэмпирические методы

8. Какой буквой обозначается оператор полной энергии системы?

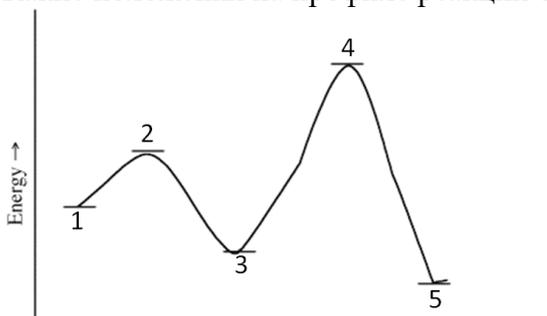
- А) E
- Б) H
- В) Ψ
- Г) A

9. Энергия ВЗМО равна



- А) 3,997
- Б) 0,793
- В) -10,78
- Г) -16,26

10. Какие положения на профиле реакции отвечают переходным состояниям?



- А) 1 и 5
- Б) 3 и 5
- В) 2 и 4
- Г) только 4

Информация о разработчиках

Тугульдурова Вера Петровна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.