

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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Оценочные материалы по дисциплине

Физика межмолекулярных взаимодействий

по направлению подготовки
03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
«Фундаментальная и прикладная физика»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
О.Н. Чайковская

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

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

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК-1 Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1. Знает основные стратегии исследований в выбранной области физики, критерии эффективности, ограничения применимости.

ИПК-1.2. Умеет выделять и систематизировать основные цели исследований в выбранной области физики, извлекать информацию из различных источников, включая периодическую печать и электронные коммуникации, представлять её в понятном виде и эффективно использовать.

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля.

- посещаемость;
- опрос на лекции и практических занятиях.

Критерии оценивания:

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты участия в работе в течение лекции и на практических занятиях, и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом):

- посещаемость, максимальный балл 10,
- выступление и работа на лекциях/практических занятиях, максимальный балл 10 баллов на одном занятии.

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

Экзамен в 1 семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет включает 2 вопроса (перечень вопросов приведен ниже), проверяющих сформированность компетенции ПК-1 в соответствии с индикатором ИПК-1.1. Ответы даются в развернутой форме. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Критерии оценивания.

На промежуточную аттестацию планируется не более 50 баллов.

Итоговая оценка по дисциплине складывается из суммы баллов, полученных по итогам текущего контроля и промежуточной аттестации.

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

Экзаменационная оценка определяется исходя из результатов экзамена и текущей аттестации в течение семестра и согласуется с принятым соответствием с 5-ти балльной шкалой оценивания: 100-86 – «отлично»; 85-66 – «хорошо»; 65-50 – «удовлетворительно», менее 50 – «неудовлетворительно».

Оценка «отлично», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны правильные ответы на все теоретические вопросы по билету, а также даны правильные ответы на дополнительные и/или уточняющие вопросы по основным темам и содержанию курса.

Оценка «хорошо», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неполные правильные ответы на теоретические вопросы по билету, но имеются так же

правильные ответы на часть дополнительных и/или уточняющих вопросов по основным темам и содержанию курса.

Оценка «удовлетворительно», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неправильные ответы на теоретические вопросы, но при этом даны правильные ответы на дополнительные и/или уточняющие вопросы по основным темам и содержанию курса.

Оценка «неудовлетворительно», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неправильные ответы на оба теоретических вопроса билета и отсутствуют ответы на дополнительные или уточняющие вопросы.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Классификация межмолекулярных сил. Короткодействующие и дальнедействующие силы.
2. . Понятия электростатической, индукционной и дисперсионной энергий. Эффекты задержки взаимодействия. Магнитные эффекты.
3. Гамильтониан взаимодействия пары молекул.
4. Мультипольные электрические моменты молекул.
5. Связь мультипольных моментов молекулы с индуцированным ей потенциалом, напряженностью поля и его градиентами на взаимодействующей с ней молекулой.
6. Связь электростатической энергии взаимодействия с мультипольными моментами.
7. Энергия молекулы и ее мультипольные моменты во внешнем однородном и неоднородном полях.
8. Поляризуемости и высшие поляризуемости молекул.
9. Определение электрических мультипольных моментов и (высших)поляризуемостей молекул через энергию молекулы во внешнем электрическом поле.
10. Отклик молекулы на гармоническое осциллирующее поле.
11. Комплексные мультипольные моменты и (высшие)поляризуемости.
12. Индукционная энергия и ее связь со статическими молекулярными поляризуемостями.
13. Дисперсионная энергия и ее связь с динамическими поляризуемостями на мнимых частотах.
14. Дипольный момент взаимодействующих молекул.
15. Приближение "constant ratio":CRA1и CRA2.
16. Поляризуемость взаимодействующих молекул.
17. Гиперполяризуемость взаимодействующих молекул.
18. Методы расчета мультипольных моментов и (высших)поляризуемостей молекул. Численный метод конечных разностей.

Перечень вопросов, выносимых на практические занятия

1. Возможности программы символьных вычислений MAPLE для расчетов электрических свойств молекулярных комплексов.
2. Расчет функций дипольного момента атомарных комплексов (комплексы задаются преподавателем). Анализ полученных результатов.
3. Расчет функций дипольного момента молекулярных комплексов (комплексы задаются преподавателем). Анализ полученных результатов.
4. Расчет функций поляризуемости молекулярных комплексов (комплексы задаются преподавателем). Анализ полученных результатов.
5. Расчет функций поляризуемости атомарных комплексов (комплексы задаются преподавателем). Анализ полученных результатов.

6. Расчет функций первой гиперполяризуемости атомарных комплексов (комплексы задаются преподавателем). Анализ полученных результатов.
7. Расчет функций первой гиперполяризуемости молекулярных комплексов (комплексы задаются преподавателем). Анализ полученных результатов.

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

1. Влияние релятивистских взаимодействий на энергию молекулярных взаимодействий в приближении теории дальнедействующих сил.
Ответ: вклад релятивистского взаимодействия слабый, на несколько порядков меньше по сравнению с вкладом электрических взаимодействий.
2. Границы применимости теории дальнедействующих сил.
Ответ: область правой стороны потенциальной энергетической ямы в направлении роста межмолекулярного расстояния и далее.
3. Компьютерные методы и пакеты программ для расчета электрических свойств взаимодействующих молекул.
Ответ: MAPLE, MATHEMATICA.
4. Поведение функции дипольного момента от межъядерного расстояния двухатомных комплексов на больших расстояниях.
Ответ: Если ни один из взаимодействующих атомов не имеет квадрупольного момента, то зависимость имеет вид R^{-4} , если хотя бы один из атомов имеет отличный от нуля квадрупольный момент, то $-R^{-7}$.

Проверка сформированности компетенций ИОПК-2, ПК-1 в соответствии с индикаторами достижения ИОПК-2.2, ПК-1.

Информация о разработчиках

Черепанов Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой оптики и спектроскопии ФФ НИ ТГУ