

**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

Компьютерная квантовая химия

по направлению подготовки

03.04.02 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:

– контроль посещаемости лекционных и практических занятий;

– практические задания (ИПК-1.1, ИПК-1.2):

1. Провести оптимизацию молекулы аммиака на уровне RHF/3-21G, RHF/6-31G(d,p), V3LYP/6-31G(d,p), V3LYP/3-21G, MP2/3-21G, MP2/6-31G(d,p). Сравнить геометрию с экспериментальными данными. Сделать вывод, какой уровень теории позволяет лучше воспроизвести геометрию молекулы.

2. Рассчитать частоты для молекулы аммиака на уровне V3LYP/6-31G(d) и сравнить с экспериментальными данными с учетом поправочного множителя для частоты. Определить какие колебания имеют меньшие частоты: деформационные или валентные.

Ключи:

1. Представить таблицу с оптимизированными структурными параметрами молекулы аммиака (длины связи, валентные углы), полученными на указанных уровнях теории. Представить значения экспериментальных данных. Провести сравнительный анализ точности воспроизведения структурных параметров молекулы теоретическими методами. Указать какой уровень теории дает наиболее близкие значения к экспериментальным данным.

2. Представить таблицу частот нормальных колебаний молекулы аммиака. Указать экспериментальные данные о частотах. Провести сравнительный анализ точности воспроизведения теоретическим методом V3LYP/6-31G(d) частот нормальных колебаний молекулы аммиака. По полученным значениям частот определить какой тип колебаний имеет меньшие частоты (меньшие частоты имеют деформационные колебания).

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

Экзамен проводится в письменной форме по билетам. Продолжительность экзамена 2,5 часа.

На промежуточную аттестацию планируется не более 40% рейтинга.

Результаты экзамена определяются исходя из результатов ответа и текущей аттестации в течение семестра и согласуются с принятым соответствием с 5-ти балльной шкалой оценивания: 99-86 – «отлично»; 85-66 – «хорошо»; 65-45 – «удовлетворительно», менее 45 – «неудовлетворительно».

Экзаменационный билет состоит из двух частей.

Первая часть представляет собой 2 вопроса, проверяющих сформированность компетенций ПК-1 в соответствии с индикаторами ИПК-1.1, ИПК 1.2.

Ответ дается в развернутой форме.

Вторая часть содержит 1 дополнительный вопрос по курсу, проверяющий соответствие индикатору достижения компетенции ИПК-1.2. Ответ на вопрос второй части дается в краткой форме, включающей краткую интерпретацию полученных результатов.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Основные постулаты квантовой химии. Уравнение Шредингера для атома водорода.

2. Многоэлектронные атомы. Метод самосогласованного поля.

3. Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.

4. Теория функционала плотности.

5. Метод конфигурационного взаимодействия.

6. Приближенные методы квантовой химии.

7. Электрические и магнитные свойства молекул.

8. Релятивистская квантовая химия. Основные приближения. Спин-спиновое и спин-орбитальное взаимодействие.

9. Электронные спектры молекул.

10. Базисные наборы функций. Примеры.

Оценка «отлично», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны правильные развернутые ответы на все теоретические вопросы по билету, а также даны правильные ответы на дополнительный вопрос. При этом все практические задания выполнены правильно.

Оценка «хорошо», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неполные правильные ответы на теоретические вопросы по билету, а также даны правильные ответы на дополнительный вопрос. При этом все практические задания выполнены правильно.

Оценка «удовлетворительно», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неполные правильные ответы на 1 из двух теоретических вопросов, но при этом даны правильные ответы на дополнительный вопрос. При этом все практические задания выполнены.

Оценка «неудовлетворительно», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неправильные ответы на 2 из двух теоретических вопросов билета, отсутствуют ответы на дополнительный вопрос. При этом все практические задания выполнены.

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

Проверка остаточных знаний, полученных при освоении лекционной части курса, осуществляется при проведении практических работ, путем проведения компьютерных квантово-химических расчетов, ответа на контрольные вопросы, и составлении отчета по выполненным работам при обработке, интерпретации и объяснении полученных в результате расчетов результатов.

Примеры практических задач и контрольных вопросов:

1. Оптимизировать молекулу водорода $b3lyp/6-31G(d,p)$. Рассчитать с помощью параметра sr энергию отдельных атомов водорода. С помощью рассчитанных параметров вычислить энергию диссоциации молекулы водорода на уровне. Определить длину связи в молекуле водорода. Выписать соответствующие экспериментальные данные.

2. Расшифровать набор функций в базисе $6-31++G(d)$.

3. Построить диаграмму энергий молекулярных орбиталей молекулы воды. Определить число занятых молекулярных орбиталей, число остоновых молекулярных орбиталей и число валентных молекулярных орбиталей.

4. Какова разность энергий двух спиновых состояний для H^1 во внешнем магнитном поле $B_0=2,3488$ Т? Чему равна соответствующая резонансная частота? Длина волны?

Ключи:

1. $R(H-H)=0,743$ Å ($R(H-H)_{\text{эксп.}}=0,742$ Å); $D(H-H)=4,84$ эВ ($D(H-H)_{\text{эксп.}}=4,48$ эВ)

2. Для описания атомных орбиталей остоновых электронов используется 6 гауссовых функций. Для описания валентных электронов используется 2 набора функций: первый включает 3 гауссовых функции и описывает сжатую часть атомной орбитали, второй – 1 гауссову функцию, описывающую диффузную часть атомной орбитали. Базис дополнен поляризационными функциями. Для всех элементов за исключением атома водорода добавлены d-функции. Данный набор включает в себя также и диффузные функции, добавленные как к тяжелым атомам, так и к атому водорода.

3. 5 занятых молекулярных орбиталей, 1 остоновая молекулярная орбиталь, 4 валентных молекулярных орбиталей.

4. $\Delta E=0,0004$ эВ; $\nu=100$ МГц; $\lambda=3$ м

Информация о разработчиках

Валиев Рашид Ринатович, доктор химических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ.

Черепанов Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ, заведующий кафедрой.