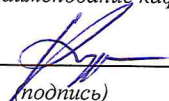


Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Кузько Андрей Евгеньевич  
Должность: Заведующий кафедрой  
Дата подписания: 08.07.2022 15:42:46  
Уникальный программный ключ:  
72581f52caba063db3331b3cc54ec107395c8caf

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой  
нанотехнологий, микроэлектроники,  
общей и прикладной физики

*(наименование кафедры полностью)*

 А.Е. Кузько

*(подпись)*

« 16 » 02 2022 г.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА  
для текущего контроля успеваемости  
и промежуточной аттестации обучающихся  
по дисциплине

Квантовая химия  
*(наименование дисциплины)*

28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника  
*(код и наименование ОПОП ВО)*

# 1. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ

## 1.1 ВОПРОСЫ ДЛЯ УСТНОГО ОПРОСА

### 1. Введение. Предмет квантовой химии

1. Предмет квантовой химии и ее роль в описании химических явлений и процессов.
2. Постулаты квантовой механики.
3. Вариационный принцип.
4. Решение уравнения Шредингера.

### 2. Атомные орбитали

1. Радиальные нормированные функции водородоподобных атомов.
2. Угловые части волновой функции атома, обладающего центральным полем.

### 3. Методы Хартри-Фока и Кона-Шема.

1. Приближение независимых частиц.
2. Метод самосогласованного поля.
3. Приближение центрального поля.
4. Метод Хартри-Фока.
5. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока. Метод Кона-Шэма.

### 4. Детерминант Слейтера.

1. Учет спина электрона.
2. Антисимметричность электронной волновой функции.
3. Принцип Паули. Детерминант Слейтера.
4. Электронные конфигурации атомов с точки зрения квантовой химии.

### 5. Химическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма.

1. Оценка потенциалов ионизации.
2. Оценка электроотрицательности.
3. Оценка химической жесткости.
4. Оценка энергии когезии.

### 6. Методы расчета молекул. Адиабатическое приближение.

1. Приближение Борна-Оппенгеймера.
2. Поверхность потенциальной энергии.
3. Энергии вращательных барьеров.
4. Молекулярная структура.

### 7. Метод Хартри-Фока для молекул.

1. Метод Хартри-Фока для молекул.
2. Приближение МО ЛКАО.
3. Уравнения Рутана.
4. Ограничения метода Хартри-Фока.

### 8. Методы теории функционала плотности

1. Методы ТФП.
2. Метод Хартри-Фока-Слейтера.

**Шкала оценивания:** 5 балльная.

**Критерии оценивания:**

**5 баллов** (или оценка «отлично») выставляется обучающемуся, если он демонстрирует глубокое знание содержания вопроса; дает точные определения основных понятий; аргументированно и логически стройно излагает учебный материал; иллюстрирует свой ответ актуальными примерами (типовыми и нестандартными), в том числе самостоятельно найденными; не нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

**4 балла** (или оценка «хорошо») выставляется обучающемуся, если он владеет содержанием вопроса, но допускает некоторые недочеты при ответе; допускает незначительные неточности при определении основных понятий; недостаточно аргументированно и (или) логически стройно излагает учебный материал; иллюстрирует свой ответ типовыми примерами.

**3 балла** (или оценка «удовлетворительно») выставляется обучающемуся, если он освоил основные положения контролируемой темы, но недостаточно четко дает определение основных понятий и дефиниций; затрудняется при ответах на дополнительные вопросы; приводит недостаточное количество примеров для иллюстрирования своего ответа; нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

**2 балла** (или оценка «неудовлетворительно») выставляется обучающемуся, если он не владеет содержанием вопроса или допускает грубые ошибки; затрудняется дать основные определения; не может привести или приводит неправильные примеры; не отвечает на уточняющие и (или) дополнительные вопросы преподавателя или допускает при ответе на них грубые ошибки.

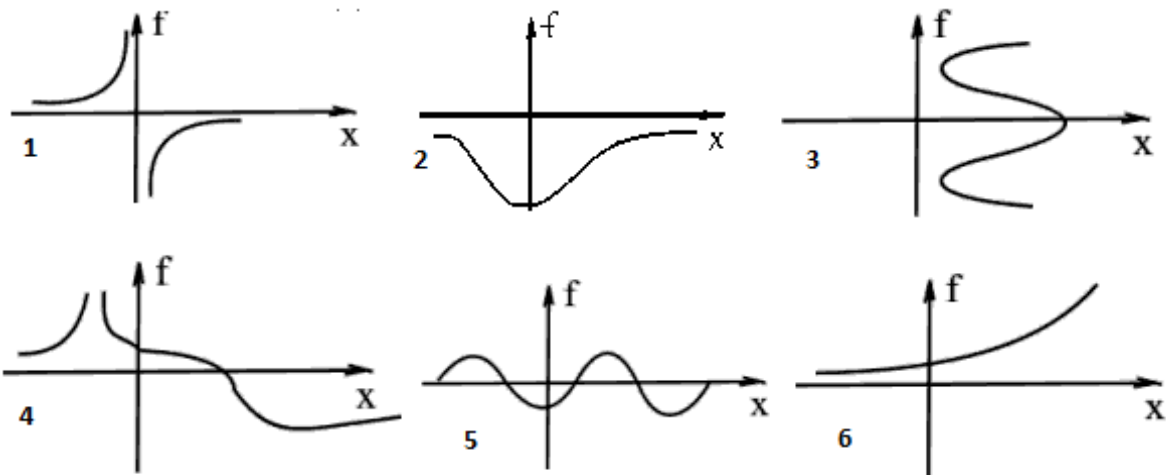
## **2 ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ**

### **2.1 БАНК ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ В ТЕСТОВОЙ ФОРМЕ**

1 Какой должна быть волновая функция  $\Psi(\{x\}, t)$ ?

- дифференцируемой
- положительной
- действительной

- антисимметричной
- 2 Какие общие требования к волновой функции  $\Psi(\{x\}, t)$  должны выполняться?
- определенной во всей области изменения переменных, конечной, однозначной
  - неотрицательной, симметричной, конечной
  - антисимметричной, неотрицательной, однозначной
- 3 Массу каких частиц принято измерять в единицах Хартри
- масса электрона
  - масса протона
  - масса нейтрона
  - масса атома водорода (протия)
  - $1/12$  массы атома углерода 12
- 4 Если изменить знак волновой функции (умножить волновую функцию на  $-1$ ), то как изменится полная энергия системы?
- не изменится
  - увеличится
  - уменьшится
  - изменится в зависимости от рассматриваемой системы
  - изменится непредсказуемым образом
- 5 Какие величины в квантовой механике одновременно не могут быть определены с любой точностью?
- энергия и время, координаты и скорость, импульс и координаты
  - координаты и скорость, импульс и энергия, импульс и координаты
  - энергия и время, координаты и скорость, импульс и энергия
- 6 Какими обязательно должны быть значения эрмитова оператора?
- действительные
  - комплексные
  - положительные
  - отрицательные
  - равны между собой
- 7 Какое равенство для линейного оператора  $A$  верно?
- $Aaf = aAf$
  - $Af_1f_2 = Af_1 + Af_2$
  - $A(f_1 + f_2) = Af_1Af_2$
- 8 Какое выражение для линейного оператора  $A$  верно?
- $A(a_1f_1 + a_2f_2) = a_1Af_1 + a_2Af_2$
  - $Af_1f_2 = Af_1 + Af_2$
  - $A(f_1 + f_2) = Af_1Af_2$
- 9 Какие из приведенных функций  $f(x)$  могут быть волновыми функциями?



- 2,5
- 1,6
- 3,4
- 1,4
- 3,6

10 Что верно для коммутирующих операторов  $A_1$  и  $A_2$  ?

- $[A_1, A_2]=0$
- $A_1f_1+A_2f_2= A_1A_2f_1f_2$
- $A_1f_1A_2f_2= A_1f_2A_2f_1$

11 Что верно для коммутирующих операторов  $A_1$  и  $A_2$  ?

- $[A_1, A_2]= [A_2, A_1]$
- $A_1f_1+A_2f_2= A_1A_2f_1f_2$
- $A_1f_1A_2f_2= A_1f_2A_2f_1$

12 Что верно для коммутирующих операторов  $A_1$  и  $A_2$  ?

- $A_1A_2f = A_2A_1f$
- $A_1f_1+A_2f_2= A_1A_2f_1f_2$
- $A_1f_1A_2f_2= A_1f_2A_2f_1$

13 В каком варианте правильно указан линейный оператор?

- $Af = -f,$
- $Af = f^3$
- $Af = f^{(-1/2)}$

14 Какой буквой обозначено правильное выражение для члена в гамильтониане, который описывает кулоновское взаимодействие  $N$  электронов?

<b>A</b> $-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2$	<b>Б</b> $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i \neq j)$	<b>В</b> $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j)$
<b>Г</b> $-\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j)$	<b>Д</b> $\sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial y_i} + \frac{\partial}{\partial z_i} \right)$	

- Б,В
- Г,Д
- А,Г
- Д,А

15

Какой буквой обозначено правильное выражение для члена в гамильтониане, который описывает кинетическую энергию  $N$  электронов ?

<b>А</b>	$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right)$	<b>Б</b>	$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i \neq j)$	<b>В</b>	$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2$
<b>Г</b>	$-\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j)$	<b>Д</b>	$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (i < j)$		

- А,В
- Б,Г
- Г,Д
- Д,Б

16 Соответствие между названиями операторов (координата  $x$ , полная энергия, кинетическая энергия, импульс вдоль оси  $x$ ) и их формулами (в системе Хартри для одного электрона)

1)	$\underline{x}$
2)	$-\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r)$
3)	$\frac{\partial}{\partial x}$
4)	$-\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$
5)	$-i \frac{\partial}{\partial x}$

- координата  $x$  – 1, полная энергия – 2, кинетическая энергия – 4, импульс вдоль оси  $x$  – 5
- координата  $x$  – 1, полная энергия – 2, кинетическая энергия – 3, импульс вдоль оси  $x$  – 4
- координата  $x$  – 2, полная энергия – 3, кинетическая энергия – 4, импульс вдоль оси  $x$  – 5
- координата  $x$  – 1, полная энергия – 2, кинетическая энергия – 3, импульс вдоль оси  $x$  – 5
- координата  $x$  – 1, полная энергия – 2, кинетическая энергия – 4, импульс вдоль оси  $x$  – 3

17 Если  $\{E_i\}$  — набор собственных значений гамильтониана  $H$  в уравнении  $H\Psi_i = E_i\Psi_i$ , то

- $E_i$  — энергия системы в  $i$ -м состоянии
- $E_0$  — энергия системы, а  $E_i$  при  $i \neq 0$  — величины, не имеющие физического смысла
- $E_i = E_j$  для любых  $i, j$
- $E_i$  — средняя энергия системы

18 Чему равно число членов в нерелятивистском гамильтониане для атома гелия при неподвижном ядре?

- 3
- 1
- 2
- 4

19 Чему равно число членов в нерелятивистском гамильтониане для иона  $H^+$  при неподвижном ядре?

- 0
- 3
- 1
- 2

20 Чему равно число членов в нерелятивистском гамильтониане для атома водорода при неподвижном ядре?

- 3
- 1
- 2
- 4

21 Чему равно число членов в нерелятивистском гамильтониане для атома лития при неподвижном ядре?

- 3
- 1
- 4
- 2

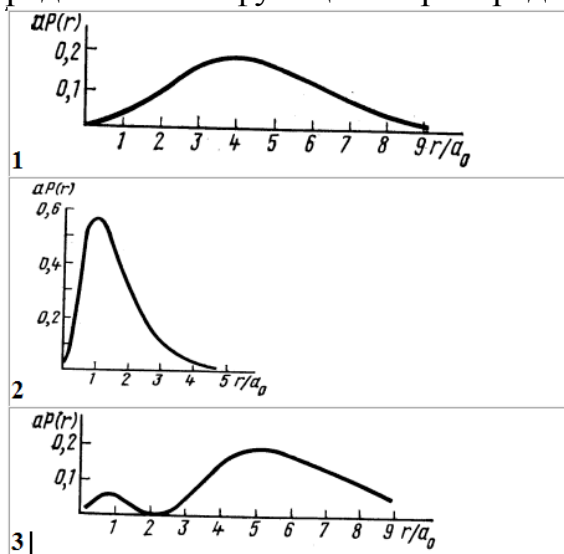
22 Что минимизируется при решении квантово-механической задачи вариационным методом?

- электронная энергия
- множители Лагранжа
- межэлектронное отталкивание
- коэффициенты разложения МО по АО

23 Каким квантовым числом (квантовыми числами) радиальная часть волновой функции определяется?

- $n, l$
- $n, s$
- $m, s$
- $l, m$

24 Соответствие между обозначениями электронных орбиталей и их радиальными функциями распределения  $aP(r)$



- 1 - 2p; 2 - 1s; 3 - 2s
- 1 - 1s; 2 - 2p; 3 - 2s
- 1 - 2p; 2 - 3-2s; 3 - 1s
- 1 - 2s; 2 - 1s; 3 - 2p

25 Каким квантовым числом в системах определяются энергия электронных орбиталей?

- H, He<sup>+</sup>
- H, He
- H<sub>2</sub>, H<sup>+</sup>
- H<sup>-</sup>, H<sup>+</sup>

26 Чему равен интеграл от произведения двух атомных радиальных функций  $R_{n,l}$  с различными значениями  $n$ , полученных в результате точного решения уравнения Шредингера ?

- всегда равно 0
- зависит от условий нормировки
- всегда равно 1
- равен бесконечности
- зависит от значений  $l$

27 Какое утверждение верно для радиальной составляющей волновой функции?

- входит в состав волновой функции электрона в атоме как множитель  $R_{n,l}(r)$
- волновые функции с одинаковыми  $R_{n,l}(r)$  вырождены по энергии  $R \rightarrow \infty, r \rightarrow \infty$

28 Какими квантовыми числами определяется угловая часть волновой функции?

- $l, m$
- $n, l$
- $m, s$



- 1, s
- 29 Значением какого квантового числа (значениями квантовых чисел) определяется энергия электрона в атоме гелия?
- n, l
  - m, s
  - l, m
  - n, s
- 30 Чему равно число узловых поверхностей угловой составляющей волновой функции орбитали 2s
- 0
  - 2
  - 1
  - 3
- 31 Чему равно число сферических узловых поверхностей радиальной составляющей волновой функции орбитали 3p
- 2
  - 0
  - 1
  - 3
- 32 Чему равно число плоских узловых поверхностей волновой функции орбитали 3d<sub>yz</sub>
- 2
  - 1
  - 3
  - 0
- 33 Какие системы можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока?
- Cl<sub>2</sub>, PF<sub>5</sub>,
  - Na, NO
  - Cl, Na
  - NO, Cl
- 34 Какие системы можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока
- P<sub>2</sub>, HNO<sub>3</sub>
  - NO<sub>2</sub>, Al
  - C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, NO<sub>2</sub>
  - Al, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>
- 35 Какие системы можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока
- B<sub>2</sub>, Br<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O
  - CH<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O, B, B<sub>2</sub>
  - B, Br<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, CH<sub>3</sub>
  - N<sub>2</sub>O, B, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>
- 36 Какие системы можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока
- Na<sub>2</sub>, CO, NaCl

- Li, NO<sub>2</sub>, CO
  - NO<sub>2</sub>, CO, NaCl
  - Na<sub>2</sub>, Li, CO
- 37 Какие системы можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока
- Cl<sub>2</sub>, NaCl, Na<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>
  - Cl, Na, Na<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>
  - Cl<sub>2</sub>, Na, NaCl, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>
  - Cl<sub>2</sub>, Cl, Na<sub>2</sub>, Na
- 38 Какое из утверждений верно для метода Хартри (приближения независимых частиц)?
- гамильтониан можно представить как сумму операторов, каждый из которых зависит только от координат одного электрона
  - не учитывается взаимодействие между электронами
  - не учитывается взаимодействие между ядром и электронами
  - не учитывается кинетическая энергия электронов
- 39 В чем заключается принципиальное отличие метода Хартри-Фока от метода Хартри?
- учет антисимметричности волновой функции, учет электронного обмена
  - использование орбитального приближения
  - использование одноэлектронного приближения
- 40 Какое из утверждений верно для метода Хартри-Фока?
- гамильтониан можно представить как сумму одно- и двухэлектронных операторов
  - гамильтониан можно представить как сумму операторов, каждый из которых зависит только от координат одного электрона
  - полная энергия атома  $E = \sum_i n_i \epsilon_i$ , где  $\epsilon_i = \epsilon_j$  при любых  $i$  и  $j$  — энергии занятых орбиталей
- 41 Почему методом Хартри-Фока нельзя получить точные волновые функции и энергии атомов или молекул?
- не учитывается электронная корреляция
  - электронная корреляция учитывается, но не полностью
  - учитывается принцип Паули
  - не учитывается принцип Паули
- 42 Почему методом Хартри-Фока нельзя получить точные волновые функции и энергии атомов или молекул?
- используется метод самосогласованного поля, а не непосредственный учет межэлектронного взаимодействия
  - учитывается принцип Паули
  - не учитывается принцип Паули
  - волновая функция ищется как антисимметричная относительно перестановок электронов
- 43 К чему приводит выполнение принципа Паули?

- волновая функция в методе Хартри-Фока записывается в виде детерминанта Слейтера
- волновая функция симметрична при перестановке двух электронов
- два электрона не могут находиться вблизи одной точки пространства
- все орбитали в атоме имеют разную энергию

44 К чему приводит выполнение принципа Паули?

в атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех квантовых чисел

в атоме не может быть двух электронов с одинаковой энергией

в атоме не может быть двух электронов с одинаковым спином

два электрона не могут находиться вблизи одной точки пространства

45 Найдите соответствие между приведенными системами и детерминантами Слейтера

Приведенные системы	Детерминанты Слейтера
<b>А)</b> $\varphi_1(\uparrow) \varphi_2(\uparrow)$	<b>1</b> $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}$
<b>Б)</b> $\varphi_1(\uparrow\downarrow)$	<b>2</b> $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$
<b>В)</b> $\varphi_1(\downarrow) \varphi_2(\downarrow)$	<b>3</b> $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$
	<b>4</b> $\begin{vmatrix} \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$
	<b>5</b> $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$

- А-1, Б-5, В-2
- А-1, Б-3, В-4
- А-1, Б-3, В-4
- А-2, Б-3, В-4
- А-3, Б-4, В-5

46 Найдите соответствие между приведенными системами и детерминантами Слейтера

Приведенные системы	Детерминанты Слейтера
<b>А)</b> $\varphi_1(\uparrow) \varphi_2(\downarrow)$	<b>1</b> $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}$
<b>Б)</b> $\varphi_2(\uparrow\downarrow)$	
<b>В)</b> $\varphi_1(\uparrow) \varphi_2(\uparrow)$	<b>2</b> $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$
	<b>3</b> $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$
	<b>4</b> $\begin{vmatrix} \varphi_2(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \\ \varphi_2(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$
	<b>5</b> $\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_2(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}$

- А - 5, Б - 4, В - 1
- А - 4, Б - 2, В - 1
- А - 3, Б - 4, В - 1
- А - 2, Б - 1, В - 5
- А - 1, Б - 3, В - 3

47 Простое произведение орбиталей не является подходящим описанием состояния многоэлектронной системы, а требуется детерминант Слейтера?

- при этом выполняется принцип Паули
- только в этом случае в полной мере учитывается электронная корреляция
- только применение детерминанта Слейтера позволяет использовать вариационный принцип
- при этом не выполняется принцип Паули

48 Для атома какого элемента детерминант Слейтера имеет вид представленный на рисунке?

$$\begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_1(2)\alpha(2) \\ \varphi_1(1)\beta(1) & \varphi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$$

- He
- H
- Li

- Na
- 49 Какова размерность детерминанта Слейтера для атома лития?  
Наличие картинки к у:НетИмя картинки на листе с картинками (при наличии):  
Код раздела:1
- 3
  - 5
  - 1
  - 2
- 50 Какова размерность детерминанта Слейтера для атома углерода?
- 6
  - 8
  - 3
  - 5
- 51 Какова размерность детерминанта Слейтера для молекулы воды?
- 10
  - 12
  - 6
  - 3
- 52 Чему равна мультиплетность молекулы в синглетном электронном состоянии?
- 1
  - 3
  - 5
  - 2
- 53 Чему равна мультиплетность молекулы в триплетном электронном состоянии?
- 3
  - 2
  - 1
  - 5
- 54 Какова причина того, что энергия, получаемая при расчёте методом UHF обычно ниже, чем методом RHF?
- в расчёте UHF электроны всегда неспарены, что понижает энергию за счёт их меньшего отталкивания
  - систематическая ошибка метода RHF
  - систематическая ошибка метода UHF
  - эта закономерность не имеет объяснения
- 55 Какова причина того, что энергия, получаемая при расчёте методом UHF обычно ниже, чем методом RHF?
- использование двух наборов орбиталей в методе UHF позволяет построить более точные волновые функции, чем в RHF
  - систематическая ошибка метода RHF

- систематическая ошибка метода UHF
- эта закономерность не имеет объяснения

56 Чему равно собственное значение оператора представленного на рисунке для атома, находящегося в триплетном электронном состоянии?

$$\hat{S}^2$$

- 2
- 4
- 5
- 0
- 1

57 Чему равно собственное значение оператора представленного на рисунке для атома, находящегося в синглетном электронном состоянии?

$$\hat{S}^2$$

- 0
- 2
- 3
- 4
- 5

58 В каком варианте указано выражение для электронного химического потенциала?

- $-1/2(I+A)$
- $1/2(I+A)$
- $A-I$
- $I-A$

59 Чему равна атомная жесткость в методе Хартри-Фока?

1)	$2(E_{\text{нсао}} - E_{\text{взао}})$
2)	$\frac{1}{2}(E_{\text{нсао}} - E_{\text{взао}})$
3)	$2(E_{\text{нсао}} + E_{\text{взао}})$
4)	$\frac{1}{2}(E_{\text{нсао}} + E_{\text{взао}})$

- 2
- 3
- 4
- 1

60 Какой атом обладает наибольшим значением сродства к электрону?

- P
- Al
- Mg
- Na

61

Какой энергией можно приближенно охарактеризовать сродство атома к электрону?

- НСАО
- НЗАО
- ВСАО
- ВЗАО

62

Что служит основой для введения адиабатического приближения?

- медленно меняющаяся функция ядерных координат
- малая величина кинетической энергии электронов
- электронная волновая функция
- малая величина кинетической энергии ядер
- слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами

63 Что служит основой для введения адиабатического приближения?

- большая масса ядер по сравнению с массой электронов
- малая величина кинетической энергии электронов
- электронная волновая функция
- малая величина кинетической энергии ядер
- слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами

64 Какова размерность ППЭ молекулы ацетилена?

- 7
- 6
- 8
- 5
- 9

65 Какова размерность ППЭ молекулы бензола?

- 30
- 25
- 31
- 29
- 35

66 Чему равно число независимых геометрических параметров, необходимых для ядерного уравнения молекулы этилена?

- 12
- 11
- 10
- 14
- 13

67 Какие члены входят в гамильтониан электронного уравнения в приближении Борна-Оппенгеймера?

- оператор кинетической энергии электронов; оператор потенциальной энергии отталкивания электронов; оператор электростатического взаимодействия электронов с ядрами

- оператор кинетической энергии ядер
- 68 Почему адиабатическое приближение может плохо выполняться?
- в случае близкого по энергии расположения электронных состояний; при близости по энергии колебательных и электронных
  - в нежестких молекулах
  - в электронно-возбужденных молекулах
  - в радикалах
- 69 Что представляет собой процесс изомеризации в квантово-химическом описании?
- переход системы из одного минимума на ППЭ в другой
  - переход системы на соседнюю ППЭ
  - изменение формы ППЭ
  - процесс, не приводящий к движению изображающей точки системы по ППЭ
- 70 Сколько вырожденных по энергии конформеров у молекулы этана?
- 3
  - 4
  - 9
  - 6
  - 8
- 71 Что представляет собой процесс внутреннего вращения в молекуле этана?
- переход системы из одного минимума на ППЭ в другой
  - переход системы на соседнюю ППЭ
  - изменение формы ППЭ
  - процесс, не приводящий к движению изображающей точки системы по
- 72 Что верно для конформеры молекулы?
- различаются по положению изображающей точки на ППЭ; могут иметь разные химические свойства; имеют разное геометрическое строение
  - имеют разный состав
- 73 Как обозначается неограниченный метод Хартри-Фока?
- HF; UHF
  - RHF
  - HF
  - NO
  - CIS
- 74 Как обозначаются методы конфигурационного взаимодействия?
- CI; KB-2; CISD
  - МКССП
  - UHF
- 75 Что относится к методам функционала плотности?
- B3LYP; DFT
  - CISD
  - MP2



- PM3
- 76 Как обозначается ограниченный метод Хартри-Фока ?
- ОХФ; RHF
  - B3LYP
  - MP2
  - МКССП
- 77 Как обозначается теория возмущений Меллера-Плессе ?
- MP2
  - ОХФ
  - B3LYP
  - RHF
  - МКССП
- 78 Как обозначаются методы Хартри-Фока?
- HX; ФHF; UHF; RHF
  - CIS
- 79 Как обозначается многоконфигурационный метод самосогласованного поля?
- MCSCF; МКССП
  - B3LYP
  - MP2
  - ОХФ
- 80 Какие из перечисленных методов являются полуэмпирическими?
- MNDO/3; CNDO
  - MCSCF
  - ОХФ
  - CISD
- 81 Какие из перечисленных методов являются полуэмпирическими?
- MNDO; CNDO
  - ОХФ
  - CISD
- 82 Какие из перечисленных методов являются полуэмпирическими?
- PM3; AM1
  - RHF
  - ОХФ
  - CISD
- 83 Какими цифрами обозначены уравнения Хартри-Фока-Рутана?

1)	$\sum_{\nu=1}^N c_{i\nu} (F_{\mu\nu} - E_i S_{\mu\nu}) = 0, \quad \mu = 1, 2, \dots, N$
2)	$\varphi_i(r) = \sum_{\mu} c_{i\mu} \chi_{\mu}(r)$
3)	$ F_{\mu\nu} - E_{\mu} S_{\mu\nu}  = 0$
4)	$F C = S C E$

- 1,3,4
- 2,3
- 4,2,3
- 2

84 Как решаются уравнения Хартри-Фока-Рутана?

- приближенно; численно; методом самосогласования
- аналитически
- не имеют решений

85 Чему равно число уравнений в ограниченном методе Хартри-Фока, которые решаются для молекулы Li2 в минимальном базисе?

- 3
- 4
- 7
- 18
- 9

86 Чему равно число уравнений в ограниченном методе Хартри-Фока, которые решаются для молекулы HF в минимальном базисе?

- 5
- 8
- 16
- 3
- 12

87 Чем метод Хартри-Фока-Рутана отличается от метода Хартри-Фока ?

- введением приближения МО ЛКАО
- более полным учётом электронного отталкивания
- введением приближения самосогласованного поля
- учётом интеграла перекрывания
- инвариантностью относительно ортогональных преобразований МО

88 Чему равна первая поправка к энергии по теории возмущений к методу Хартри-Фока?

- равна нулю
- описывает более половины корреляционной энергии
- всегда отрицательна
- всегда положительна
- описывает около 90% корреляционной энергии

89 Что служит основой процедуры решения уравнений метода Хартри-Фока-Рутана?

- вариационный принцип
- аналитические формулы
- табулированные значения решений аналогичных систем
- теория возмущений

90 Что неверно предсказывают расчеты методом Хартри-Фока-Рутана?

- потенциальные кривые гомолитической диссоциации молекул; поверхности Ферми в металлах; энергии молекул в возбужденных электронных состояниях
- геометрические параметры молекул

91 Чем метод Хартри-Фока-Рутана отличается от метода Хартри?

- введением приближения самосогласованного поля; введением приближения МО ЛКАО
- более полным учётом электронного отталкивания
- учётом интеграла перекрывания
- инвариантностью относительно ортогональных преобразований МО

92 В каких методах выполняется размерная согласованность?

- RHF; FCI (полное KB); MP2
- CIS
- CISD

93 Какие результаты даст по сравнению с методом RHF расчет молекулы бензола методом CIS в том же базисе?

- не изменит энергию системы
- увеличит энергию системы
- уменьшит энергию системы
- приведет к непредсказуемому результату

94 Что из перечисленного основано на вариационном принципе?

- RHF; МКССП; KB
- MP2
- MP3

95 В каких методах возможен наиболее полный учет электронной корреляции?

- FCI (полное KB)
- MP4
- MP2
- MINDO/3
- RHF

96

Какое значение имеет энергия электронной корреляции?

- всегда отрицательна; характеризует мгновенное кулоновское отталкивание электронов; её модуль уменьшается по мере использования все более точной волновой функции

- всегда положительна
  - характеризует отталкивание ядер
- 97 Почему в методе Хартри-Фока электронная корреляция в основном не учитывается?
- использования приближения независимых частиц
  - численных ошибок метода
  - использования вариационного принципа
  - ограниченного числа функций в базисном наборе
- 98 Каким путем может быть достигнут существенно более точный учет электронной корреляции?
- использования метода, дающего более точную волновую функцию
  - повышения точности процедуры согласования
  - использования более широких базисных наборов АО
  - использования вариационного принципа при расчете энергий
- 99 С помощью каких методов может быть достигнут существенно более точный учет электронной корреляции?
- методов, представляющих волновую функцию в виде нескольких детерминантов Слейтера; теории возмущения
  - вариационного принципа
  - более широких базисных наборов АО
- 100 В каких методах используется многоконфигурационное приближение?
- конфигурационного взаимодействия; МКССП
  - RHF
  - MP2
  - AM1

**Шкала оценивания результатов тестирования:** в соответствии с действующей в университете балльно-рейтинговой системой оценивание результатов промежуточной аттестации обучающихся осуществляется в рамках 100-балльной шкалы, при этом максимальный балл по промежуточной аттестации обучающихся по очной форме обучения составляет 36 баллов, по очно-заочной и заочной формам обучения – 60 баллов (установлено положением П 02.016).

Максимальный балл за тестирование представляет собой разность двух чисел: максимального балла по промежуточной аттестации для данной формы обучения (36 или 60) и максимального балла за решение компетентностно-ориентированной задачи (6).

Балл, полученный обучающимся за тестирование, суммируется с баллом, выставленным ему за решение компетентностно-ориентированной задачи.

Общий балл по промежуточной аттестации суммируется с баллами, полученными обучающимся по результатам текущего контроля успеваемости в течение семестра; сумма баллов переводится в оценку по 5-балльной шкале следующим образом:

Соответствие 100-балльной и 5-балльной шкал

<i>Сумма баллов по 100-балльной шкале</i>	<i>Оценка по 5-балльной шкале</i>
100-85	отлично
84-70	хорошо
69-50	удовлетворительно
49 и менее	неудовлетворительно

***Критерии оценивания результатов тестирования:***

Каждый вопрос (задание) в тестовой форме оценивается по дихотомической шкале: выполнено – **2 балла**, не выполнено – **0 баллов**.

## ***2.2 КОМПЕТЕНТНОСТНО-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ ЗАДАЧИ***

*Компетентностно-ориентированная задача № 1*

Запишите наиболее общий вид волновой функции, описывающий электрон в поле протона. Почему угловая часть этой функции зависит от квантовых чисел  $l$  и  $m$ ? Почему радиальная часть данной функции зависит от  $n$  и  $l$ ?

*Компетентностно-ориентированная задача № 2*

Найдите среднее расстояние  $1S$ -электрона в атоме водорода от ядра.

*Компетентностно-ориентированная задача № 3*

Найти частоту перехода электрона в атоме водорода между уровнями  $1S \rightarrow 2P$ .

*Компетентностно-ориентированная задача № 4*

Нарисовать молекулы сернистой кислоты, фосфата алюминия (соль), аммония (основание). Оптимизировать молекулярную геометрию, измерив – тепловой эффект образования одного моля вещества. Измерить расстояние  $l$  между 4 любыми атомами и двугранный угол между ними. Измерить угол между тремя любыми атомами.

*Компетентностно-ориентированная задача № 5*

Построить молекулы пептидов: ацетилаланин, глицинцистеинвалин, глутатион. Оптимизировать геометрию. Отцентрировать всю конструкцию.

*Компетентностно-ориентированная задача № 6*

Спроектируйте двуслойную нанотрубку длиной 10 ангстрем. Диаметр внутренней нанотрубки равен 4,3 ангстрем, диаметр внешней – 6,5 ангстрем. Оптимизируйте её форму.

*Компетентностно-ориентированная задача № 7*

Спроектируйте пластину из атомов Ti и модифицируйте ее путем введения примеси Al.

*Компетентностно-ориентированная задача № 8*

Постройте угловую часть волновой функции в сферических координатах в wxMaxima для  $l=2, m=0$ .

*Компетентностно-ориентированная задача № 9*

Постройте радиальную часть волновой функции в сферических координатах в wxMaxima  $n=0, l=0$ .

**Шкала оценивания решения компетентностно-ориентированной задачи:** в соответствии с действующей в университете балльно-рейтинговой системой оценивание результатов промежуточной аттестации обучающихся осуществляется в рамках 100-балльной шкалы, при этом максимальный балл по промежуточной аттестации обучающихся по очной форме обучения составляет 36 баллов, по очно-заочной и заочной формам обучения – 60 (установлено положением П 02.016).

Максимальное количество баллов за решение компетентностно-ориентированной задачи – 6 баллов.

Балл, полученный обучающимся за решение компетентностно-ориентированной задачи, суммируется с баллом, выставленным ему по результатам тестирования.

Общий балл промежуточной аттестации суммируется с баллами, полученными обучающимся по результатам текущего контроля успеваемости в течение семестра; сумма баллов переводится в оценку по 5-балльной шкале следующим образом:

Соответствие 100-балльной и 5-балльной шкал

Сумма баллов по 100-балльной шкале	Оценка по 5-балльной шкале
100-85	отлично

84-70	хорошо
69-50	удовлетворительно
49 и менее	неудовлетворительно

***Критерии оценивания решения компетентностно-ориентированной задачи:***

**6-5 баллов** выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует глубокое понимание обучающимся предложенной проблемы и разностороннее ее рассмотрение; свободно конструируемая работа представляет собой логичное, ясное и при этом краткое, точное описание хода решения задачи (последовательности (или выполнения) необходимых трудовых действий) и формулировку доказанного, правильного вывода (ответа); при этом обучающимся предложено несколько вариантов решения или оригинальное, нестандартное решение (или наиболее эффективное, или наиболее рациональное, или оптимальное, или единственно правильное решение); задача решена в установленное преподавателем время или с опережением времени.

**4-3 балла** выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует понимание обучающимся предложенной проблемы; задача решена типовым способом в установленное преподавателем время; имеют место общие фразы и (или) несущественные недочеты в описании хода решения и (или) вывода (ответа).

**2-1 балла** выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует поверхностное понимание обучающимся предложенной проблемы; осуществлена попытка шаблонного решения задачи, но при ее решении допущены ошибки и (или) превышено установленное преподавателем время.

**0 баллов** выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует непонимание обучающимся предложенной проблемы, и (или) значительное место занимают общие фразы и голословные рассуждения, и (или) задача не решена.