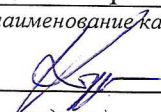


Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Кузько Андрей Евгеньевич  
Должность: Заведующий кафедрой  
Дата подписания: 03.09.2022 11:34:48  
Уникальный программный ключ:  
72581f52caba063db3331b3cc54ec107395c8caf

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий кафедрой  
нанотехнологий, микроэлектроники,  
общей и прикладной физики  
*(наименование кафедры полностью)*

  
А.Е. Кузько  
*(подпись)*

«16» февраля 2022 г.

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

Расчетные методы в квантовой химии  
*(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. Редактор молекул Avogadro. Интерфейс и приемы работы

1. Основное окно программы.
2. Инструмент рисования.
3. Инструмент выделения.
4. Инструмент навигация.
5. Инструмент установления центральной связи.
6. Инструмент манипуляции.
7. Инструмент автоматического вращения.
8. Инструмент автоматической оптимизации.
9. Инструмент для измерения.
10. Проектирование нанотрубок.
11. Построение пептида.
12. Моделирование кристаллов.

### 2. Разделение электронного и ядерного движений в молекулах

1. Стационарное уравнение Шрёдингера, определяющие состояние молекулы в молекулярной системе.
2. Оператор Гамильтона молекулы.
3. Оператор Гамильтона, содержащий дифференцирование только по электронным координатам.
4. Приближение Борна-Оппенгеймера.
5. Электронная энергия.
6. Электронные волновые функции.

### 3. Метод молекулярных орбита-лей. Метод Хартри-Фока. Метод Хартри-Фока-Ругана

1. Атомные и молекулярные орбитали.
2. Метод Хартри-Фока для атомов.
3. Детерминант Слейтера.
4. Уравнения Ругана.
5. Метод Хартри-Фока-Ругана.
6. Процедура самосогласования.
7. Метод МО ЛКАО.

### 4. Наборы базисных функции

1. Молекулярные орбитали как разложение в ряд по атом-ным орбиталям.
2. Слэтеровский тип АО.
3. Гаусовский тип АО.
4. Контрактированные (сгруппированные) базисные функ-ции.
5. Минимальный базисный набор.
6. Расширенные базисные наборы.

## **5. Электронная плотность, по-рядки связей, заряды на атомах, поляризуемость**

1. Результирующая плотность вероятности нахождения электрона.
2. Анализ заселенностей по Малликену.
3. «Заряд на атоме».
4. Расчет поляризуемости молекулы.

## **6. Молекула водорода**

1. Электронный гамильтониан молекулы водорода.
2. Волновая функция основного состояния молекулы водо-рода.
3. Алгоритм расчета энергии основного состояния молекулы водорода.

## **7. Теория функционала плотности. Программный пакет для расчётов в рамках метода функционала плотности ABINIT.**

1. Основная лемма Хоэнберга-Кона, лежащая в основе методов функционала плотности.
2. Вариационный принцип Хоэнберга-Кона.
3. Уравнения Кона-Шэма.
4. Приближение локальной плотности.
5. Квазилокальное приближение.
6. Гибридные функционалы.
7. Работа в программном пакете ABINIT.

## **8. Ядерный магнитный резонанс**

1. Определение структуры молекулы с помощью ЯМР.
2. Алгоритм расчета ЯМР.

***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

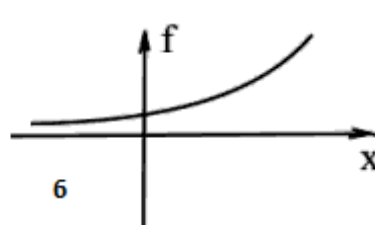
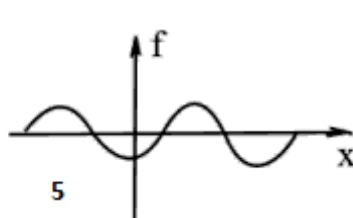
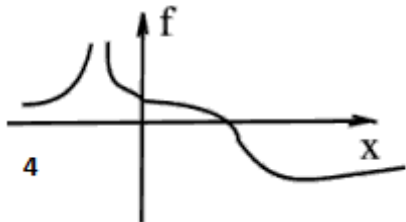
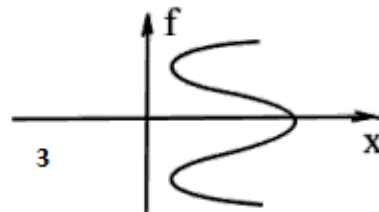
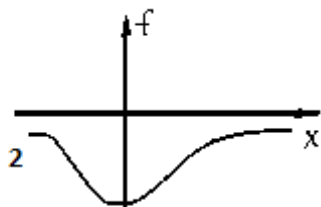
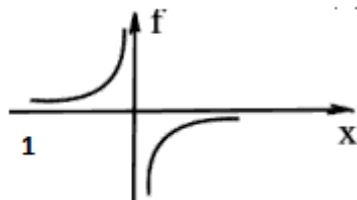
7 Какое равенство для линейного оператора  $A$  верно?

- $Aaf = aAf$
- $Af_1f_2 = Af_1 + Af_2$
- $A(f_1 + f_2) = Af_1Af_2$

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  $A_2$  ?

- $A_1 A_2 f = A_2 A_1 f$
- $A_1 f_1 + A_2 f_2 = A_1 A_2 f_1 f_2$
- $A_1 f_1 A_2 f_2 = A_1 f_2 A_2 f_1$

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>А</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

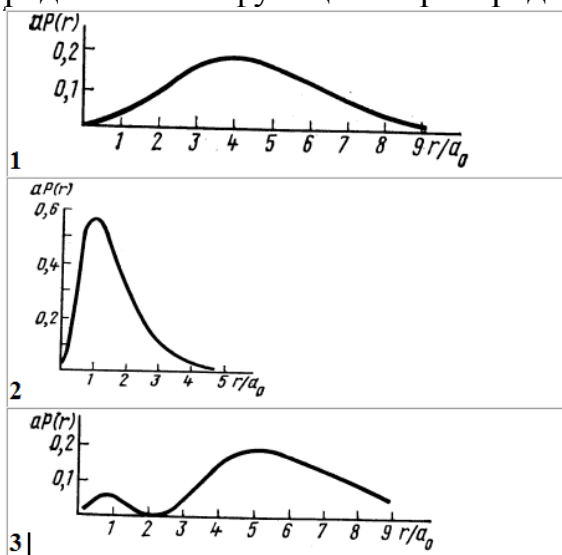
22 Что минимизируется при решении квантово-механической задачи вариационным методом?

- 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?

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

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  $E = \sum e_i$ , где  $e_i = e_j$  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 <u>Слейтера</u>
<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>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> $\varphi_1(\uparrow) \varphi_2(\uparrow)$	<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)	$2(E_{\text{HCAO}} - E_{\text{VCAO}})$
2)	$\frac{1}{2}(E_{\text{HCAO}} - E_{\text{VCAO}})$
3)	$2(E_{\text{HCAO}} + E_{\text{VCAO}})$
4)	$\frac{1}{2}(E_{\text{HCAO}} + E_{\text{VCAO}})$

- 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?

- HCAO
- HCAO
- VCAO
- VCAO

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?
- HХФ; UHF
  - RHF
  - HF
  - NO
  - CIS
- 74 Как обозначаются методы конфигурационного взаимодействия?
- CI; KB-2; CISD
  - МКССП
  - UHF
- 75 Что относится методам функционала плотности?
- B3LYP; DFT
  - CISD
  - MP2
  - PM3
- 76 Как обозначается ограниченный метод Хартри-Фока ?
- OХФ; RHF
  - B3LYP
  - MP2
  - МКССП
- 77 Как обозначается теория возмущений Меллера-Плессе ?
- MP2
  - OХФ
  - B3LYP
  - RHF
  - МКССП
- 78 Как обозначаются методы Хартри-Фока?
- HХ; ФHF; UHF; RHF
  - CIS
- 79 Как обозначается многоконфигурационный метод самосогласованного поля?
- MCSCF; МКССП
  - B3LYP
  - MP2
  - OХФ
- 80 Какие из перечисленных методов являются полуэмпирическими?

- MINDO/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)	$FC = SCE$

- 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*

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

*Компетентностно-ориентированная задача № 2*

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

*Компетентностно-ориентированная задача № 3*

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 № 4*

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

*Компетентностно-ориентированная задача № 5*

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

*Компетентностно-ориентированная задача № 6*

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

**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

<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 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.