

МИНОБРНАУКИ России
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ
заведующий кафедрой

Биотехнологии, химии и

стандартизации

(наименование кафедры)

М.Г. Сульман

(Ф.И.О. зав. кафедрой)

«__» _____ 20__ г.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

Промежуточной аттестации в форме зачета

(промежуточной аттестации: экзамен, зачет, курсовая работа или курсовой проект; практики: с указанием вида и типа практики; государственного итогового экзамена)

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Наименование дисциплины (для промежуточной аттестации)

направление подготовки 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) – Медицинская и фармацевтическая химия

Типы задач – научно-исследовательский

Разработаны в соответствии с:

Рабочей программой дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия»

утвержденной Проректором по УВР от «__» _____ 20__ г.

Разработчик(и): к.х.н., доцент, А.В. Быков

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 1

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Корреляция электронов и способы её учёта.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Эффект Яна-Тэллера и структура молекул.

3. Задание для проверки уровня УМЕТЬ – 0 или 1 балл:

Определите химическую жесткость двухатомной молекулы если она обладает следующими характеристиками: энергия ВЗМО -14.0 эВ, энергия НВМО -1.05 эВ, дипольный момент $0.04 \cdot 10^{-29}$ Кл.м, длина химической связи 1.13 Å. Энергия образования молекулы -110.5 кДж/моль, силовая константа связи 18.6.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО
КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 2**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Вариационный принцип решения уравнения Шредингера.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите суперпозиционную ошибку базисного набора. Методы устранения.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Определите энергию, необходимую для конформационного перехода транс-1-фтор-2-хлорэтан в цис-1-фтор-2-хлорэтан

Рассчитанная зависимость энергии молекулы от диэдрального угла:

θ	Энергия, E _h	Θ	Энергия, E _h
0	-638.40537117	200	-638.41368812
20	-638.40750567	220	-638.41105305
40	-638.41188675	240	-638.40988323
60	-638.41475449	260	-638.41155566
80	-638.41425556	280	-638.41423097
100	-638.41159289	300	-638.41477116
120	-638.40989627	320	-638.41194075
140	-638.41103513	340	-638.40755329
160	-638.41366620	360	-638.40537118
180	-638.41500396		

1 E_h = 27.2113834 эВ, 1 эВ = 23.0605 ккал/моль

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 3

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Стационарное и нестационарное уравнение Шредингера.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Деформационная электронная плотность.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Для некоторой молекулы (точечная группа C_1) рассчитаны частоты нормальных колебаний. Определите характер токи на ПЭ для рассчитанной геометрии молекулы. Почему первые шесть нормальных частот равны нулю?

№	см ⁻¹	№	см ⁻¹	№	см ⁻¹
1	0.00	9	518.80	17	1246.29
2	0.00	10	723.16	18	1365.23
3	0.00	11	771.53	19	1421.74
4	0.00	12	938.07	20	1451.58
5	0.00	13	1025.78	21	2947.86
6	0.00	14	1112.87	22	2998.61
7	-206.50	15	1176.80	23	3004.99
8	216.65	16	1236.50	24	3071.24

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО
КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 4**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Орбитальное уравнение. Радиальная часть волновой функции.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Для некоторой молекулы (точечная группа $C_{\infty v}$) рассчитаны частоты нормальных колебаний. Определите характер токи на ПЭ для рассчитанной геометрии молекулы. Почему первые пять нормальных частот равны нулю?

№	см ⁻¹	№	см ⁻¹	№	см ⁻¹
1	0.00	9	518.80	17	1246.29
2	0.00	10	723.16	18	1365.23
3	0.00	11	771.53	19	1421.74
4	0.00	12	938.07	20	1451.58
5	0.00	13	1025.78	21	2947.86
6	201.00	14	1112.87	22	2998.61
7	206.50	15	1176.80	23	3004.99
8	216.65	16	1236.50	24	3071.24

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО
КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 5**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Функция Гамильтона и ее физический смысл.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Орбитальное уравнение. Угловая часть волновой функции.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ – 0 или 1 балл:

Определите энергии ВЗМО и НВМО молекулы.

Заселенность	Энергия орбитали, эВ	Заселенность	Энергия орбитали, эВ
2	-190,536	2	-10,41
2	-190,192	2	-10,0584
2	-190,189	2	-8,1627
2	-29,3255	2	-7,8977
2	-21,1869	2	-6,9428
2	-18,1631	2	-6,776
2	-15,1931	0	-0,4812
2	-12,4385	0	0,7482
2	-12,2678	0	1,3828
2	-11,6114		

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 6

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Интерференция орбиталей.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Метод Хартри-Фока. Функция Хартри и оператор Фока. Достоинства и недостатки метода.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

Определите химическую жесткость двухатомной молекулы если она обладает следующими характеристиками: энергия ВЗМО -3.0 эВ, энергия НВМО -1.5 эВ, дипольный момент 0.12.10⁻²⁹ Кл.м, длина химической связи 1.42 Å. Энергия образования молекулы -35 кДж/моль, силовая константа связи 21.3.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 7

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Приближение Борна-Оппенгеймера.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Метод Кона-Шема. Обменно-корреляционные функционалы.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
**Рассчитайте поляризуемость молекулы зная, что:
 $\alpha_{xx} = -2.85322$, $\alpha_{yy} = -4.94577$, $\alpha_{zz} = -1.22351$**

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО
КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 8**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Метод самосогласованного поля.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Теорема Вириала.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Приведите детерминант Слейтора для гелия.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 9

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Принцип неопределенности Гейзенберга.
2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Теория возмущений Мёллера-Плессета.
3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Приведите гамильтониан для электрона в атоме водорода.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

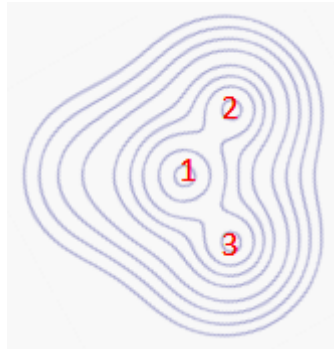
Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 10

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Точность полуэмпирических квантово-механических расчетов.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите аналитические базисные функции. СОГТ.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Для многоатомной молекулы сечение полной электронной плотности в плоскости ядер 1, 2 и 3 представлено на рисунке. Между какими из атомов (1,2,3) существует химическая связь? Ответ обоснуйте.



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

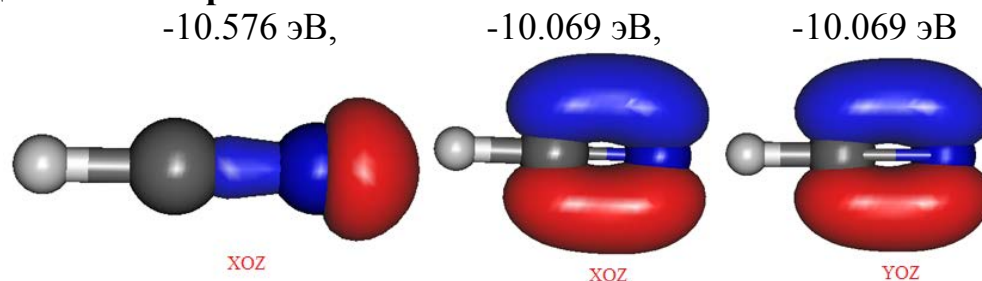
Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 11

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите корреляционно-согласованные базисные наборы.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Метод связанных кластеров.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
**Три самых высоких по энергии занятых орбитали молекулы цианистого
водорода имеют энергии:**



Определите тип симметрии каждой МО и степень вырождения ВЗМО

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

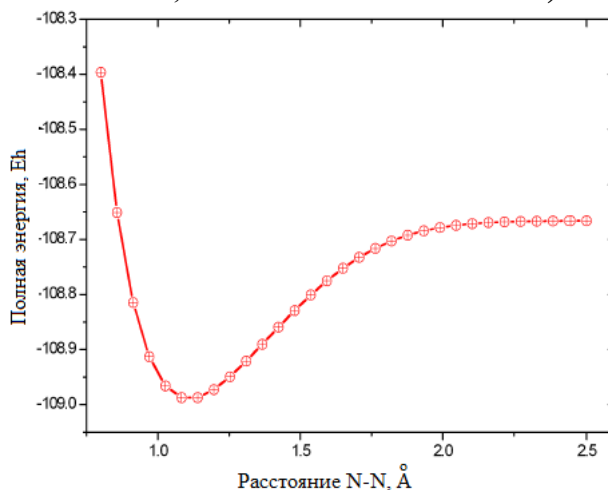
Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 12

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Опишите молекулярные базисные наборы Попла.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Метод валентных схем.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Для молекулы азота определите энергию диссоциации и равновесное расстояние (1 Eh = 27.2113834 эВ, 1 эВ = 23.0605 ккал/моль):



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

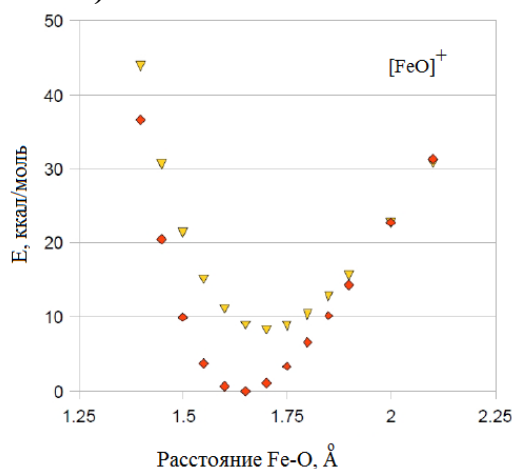
Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 13

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Эффект Яна-Тэллера и структура молекул.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Минимальный и расширенный атомный базисный набор.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Для иона $[\text{FeO}]^+$ определите основное и возбужденное состояния (квартет – ромб, секстет - треугольник):



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

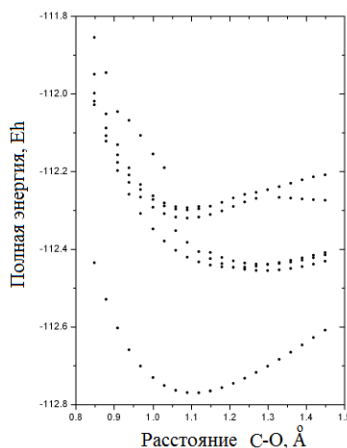
Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 14

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Операторы основных физических величин.

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:
Одноэлектронные волновые функции в бесконечных периодических кристаллах.

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:
Для молекулы CO определите основное и равновесное межатомное расстояние в основном состоянии:



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 15

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

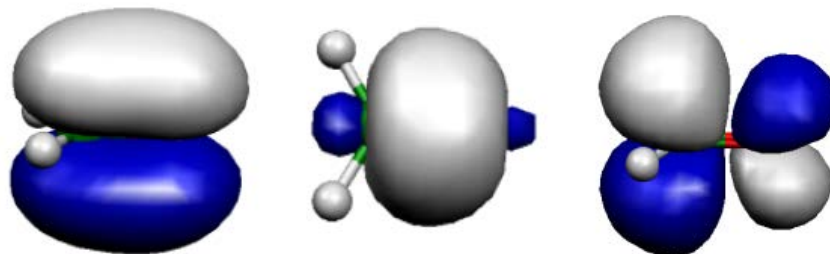
**Понятие оператора в квантовой химии. Эрмитов оператор. Его свойства.
Спектр собственных значений и их физический смысл.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

Методы расчета волновых функций в кристаллах

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» - 0 или 1 балл:

Для молекулы формальдегида сделайте отнесение орбиталей по типу:



Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман