

Приложение 1

МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Институт прикладной математики и компьютерных наук

УТВЕРЖДАЮ

Директор института прикладной  
математики и компьютерных наук  
А.В. Замятин

« 16 » \_\_\_\_\_ 2022 г.

Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине  
(Оценочные средства по дисциплине)

**Основы молекулярной спектроскопии**

по направлению подготовки

**01.04.02 Прикладная математика и информатика**

Направленность (профиль) подготовки:

**Интеллектуальный анализ больших данных**

Томск–2022

ОС составил:

д-р. физ.-мат. наук, доцент,  
зав. кафедрой оптики и спектроскопии

В.Н. Черепанов

д-р. физ.-мат. наук, доцент,  
профессор кафедры оптики и спектроскопии

А.В. Никитин

PhD,  
доцент кафедры оптики и спектроскопии

Е.В. Карловец

Рецензент:  
д-р. физ.-мат. наук, доцент,  
профессор кафедры оптики и спектроскопии

О.Н. Чайковская

Оценочные средства одобрены на заседании учебно-методической комиссии  
института прикладной математики и компьютерных наук (УМК ИПМКН).

Протокол от 12.05.2022 г. № 4

Председатель УМК ИПМКН,  
д-р техн. наук, профессор

С.П. Сущенко

**Оценочные средства (ОС)** являются элементом системы оценивания сформированности компетенций у обучающихся в целом или на определенном этапе ее формирования.

ОС разрабатывается в соответствии с рабочей программой (РП) дисциплины.

### 1. Компетенции и результаты обучения, формируемые в результате освоения дисциплины

Компетенция	Индикатор компетенции	Код и наименование результатов обучения (планируемые результаты обучения, характеризующие этапы формирования компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
			Отлично	Хорошо	Удовлетворительно	Неудовлетворительно
ПК-4. Способен использовать специализированные знания из разделов химии, биологии для проведения исследований в области биоинформатики, биомедицины и смежных дисциплин.	ИПК-4.1. Применяет методы биологии и биоинформатики для получения новых знаний.	ОР-4.1.1: Знать: основные задачи, существующие в настоящее время в физике атомов и молекул, основы математического аппарата, лежащего в основе построения моделей изучаемых атомов и молекул	Имеет сформированное представление об основных задачах, существующих в настоящее время в физике атомов и молекул, об основах математического аппарата, лежащего в основе построения моделей изучаемых атомов и молекул.	Имеет общее представление об основных задачах, существующих в настоящее время в физике атомов и молекул, об основах математического аппарата, лежащего в основе построения моделей изучаемых атомов и молекул.	Имеет слабое представление об основных задачах, существующих в настоящее время в физике атомов и молекул, об основах математического аппарата, лежащего в основе построения моделей изучаемых атомов и молекул.	Не имеет представления об основных задачах, существующих в настоящее время в физике атомов и молекул, об основах математического аппарата, лежащего в основе построения моделей изучаемых атомов и молекул.

	<p>ИПК-4.2. Находит и использует информацию, накопленную в базах данных по структуре геномов, белков и другой биологической информации.</p>	<p>ОР-4.2.1: Уметь: самостоятельно применять основные принципы и методы квантовой теории к исследованию квантовых систем</p>	<p>Умеет правильно применять основные принципы и методы квантовой теории к исследованию квантовых систем.</p>	<p>Умеет правильно применять основные принципы и методы квантовой теории к исследованию квантовых систем.</p>	<p>В целом успешное, но не систематически осуществляемое умение применять основные принципы и методы квантовой теории к исследованию квантовых систем.</p>	<p>Не умеет применять основные принципы и методы квантовой теории к исследованию квантовых систем.</p>
	<p>ИПК-4.3. Владеет основными биоинформатическими средствами анализа геномной, структурной и иной биологической информации.</p>	<p>ОР-4.3.1: Владеть: методами решения задач, рассматриваемых современной атомной и молекулярной физикой.</p>	<p>Умеет правильно применять методы решения задач, рассматриваемых современной атомной и молекулярной физикой.</p>	<p>Умеет правильно применять методы решения задач, рассматриваемых современной атомной и молекулярной физикой.</p>	<p>В целом успешное, но не систематически осуществляемое умение применять методы решения задач, рассматриваемых современной атомной и молекулярной физикой.</p>	<p>Не умеет применять методы решения задач, рассматриваемых современной атомной и молекулярной физикой.</p>

## 2. Этапы формирования компетенций и виды оценочных средств

№	Этапы формирования компетенций (разделы дисциплины)	Код и наименование результатов обучения	Вид оценочного средства (тесты, задания, кейсы, вопросы и др.)
1.	Раздел 1. Введение в спектроскопию	ОР-1.1.1	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
2.	Раздел 2. Основы атомной спектроскопии	ОР-1.1.1, ОР-1.2.2, ОР-1.3.3	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
3.	Раздел 3. Вращательные спектры молекул	ОР-1.1.1, ОР-1.2.2, ОР-1.3.3	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
4.	Раздел 4. Колебательные спектры молекул	ОР-1.1.1, ОР-1.2.2, ОР-1.3.3	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
5.	Раздел 5. Спектроскопия двухатомных молекул	ОР-1.1.1, ОР-1.2.2, ОР-1.3.3	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации
6	Раздел 6. Спектроскопия многоатомных молекул	ОР-1.1.1, ОР-1.2.2, ОР-1.3.3	Вопросы для текущего контроля, вопросы для проведения промежуточной аттестации

## 3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки образовательных результатов обучения

3.1. Типовые задания для проведения текущего контроля успеваемости по дисциплине

3.2. Типовые задания для проведения промежуточной аттестации по дисциплине

1. Переход от декартовых координат к внутренним (без учета вращения), замена переменных. Единицы измерения для кинетической и потенциальной энергии.
2. Колебания многоатомных молекул, виды движения в молекуле.
3. Вращение жесткого волчка, вращательные уровни.
4. Качественный анализ спектров сложных молекул.
5. Ядерные статистические веса и статистические суммы.
6. Вариационный метод решения стационарного уравнения Шредингера.
7. Колебательно-вращательный Гамильтониан в нормальных координатах.
8. Нормальные координаты, переход от смещений к нормальным координатам.
9. Ортогональные координаты (координаты Радо). Внутренние координаты и задание

геометрии в квантовой химии.

10. Интенсивность линий поглощения, дипольный момент.
11. Условия Экарта, кинетическая энергия в линеаризованных координатах (G матрица).
12. 6C, 9C, 12C символы, вычисление матричных элементов оператора дипольного момента.
13. Оператор кинетической энергии во внутренних полярных координатах.
14. Особенности различных типов молекул: Линейные молекулы, Симметричные волчки, Сферические волчки, Асимметричные волчки.
15. Методы решения уравнения Шредингера.
16. Колебания многоатомных молекул, виды движения в молекуле.
17. Получение Гамильтониана Уотсона: получение уравнения

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + \dots, \text{ где}$$

$$\begin{matrix} \boxed{J_x^2} & \boxed{J_y^2} & \boxed{J_z^2} \\ \boxed{J_x J_y} & \boxed{J_x J_z} & \boxed{J_y J_z} \\ \boxed{J_x} & \boxed{J_y} & \boxed{J_z} \end{matrix}$$

18. Особенности различных типов молекул: Линейные молекулы, Симметричные волчки, Сферические волчки, Асимметричные волчки.
19. Особенности различных типов молекул: Линейные молекулы, Симметричные волчки, Сферические волчки, Асимметричные волчки.
20. Симметризованные координаты.
21. Вращение жесткого волчка, получение матричных элементов.

#### **4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания образовательных результатов обучения**

4.1. Методические материалы для оценки текущего контроля успеваемости по дисциплине.

Оценка текущего контроля проводится на основе оценки компетенций, соответствующих текущему разделу дисциплины, согласно таблице раздела 1.

4.2. Методические материалы для проведения промежуточной аттестации по дисциплине.

Оценка промежуточной аттестации для дисциплины «Теоретические основы молекулярной спектроскопии» основываются на бальной системе.

Максимальная сумма баллов по дисциплине составляет 100 баллов, из них – 50 баллов по результатам промежуточной аттестации и 50 баллов по результатам итоговой аттестации (зачет, экзамен). Промежуточная аттестация предполагает оценку результатов выполнения практических работ (50 баллов). Соответствие с классической пятибалльной шкалой: 55-69 соответствует оценке «3», 70-89 – «4», 90-100 – «5».