

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Гаскаев Сергей Валерьевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 15.09.2025 10:37:41
Уникальный программный ключ:
04c19ed8b0981566c677a486b9a6788b8322319

	МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) «Квантовая химия»	стр. 1
по направлению подготовки (специальности) 04.03.01 "Химия", направленности (профилю) Аналитическая химия и химическая экспертиза ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	

**Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации
по дисциплине (модулю)
Квантовая химия**

**Направление подготовки (специальность)
04.03.01 – Химия**

**Направленность (профиль)
Аналитическая химия и химическая экспертиза**

**Присваиваемая квалификация (степень)
Бакалавр**

**Форма обучения
Очная**

Год(ы) набора 2025

Челябинск 2025 г.



Содержание

1. Паспорт фонда оценочных средств
2. Перечень формируемых компетенций
 - 2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной
3. Содержание оценочных средств по дисциплине
 - 3.1. Виды оценочных средств
 - 3.2. Содержание оценочных средств
4. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации
 - 4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации
 - 4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств
 - 4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций



1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Направление подготовки: 04.03.01 «Химия»

Направленность (профиль) Аналитическая химия и химическая экспертиза

Дисциплина: Квантовая химия

Семестр (семестры) изучения: 8.

Форма (формы) промежуточной аттестации: 8 семестр – зачет, экзамен.

2. ПЕРЕЧЕНЬ ФОРМИРУЕМЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ

2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной

Изучение дисциплины «Квантовая химия» направлено на формирование следующих компетенций:

Коды компетенции согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Содержание компетенций согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Индикаторы достижения компетенции согласно ОПОП	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
1	2	3	4
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1-2 Обладает базовыми знаниями в области химических наук	Знает базовые понятия и законы химических наук; Умеет применять понятия и законы химических наук для решения задач профессиональной деятельности; Владеет навыками применения знаний в области химических наук для анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, наблюдений, измерений.



3. СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

3.1 Виды оценочных средств

№ п/п	Код компетенции/ планируемые результаты обучения	Контролируемые темы/ разделы	Наименование оценочного средства для текущего контроля	Наименование оценочного средства на промежуточной аттестации/№ задания
1	ОПК-1	Введение в квантовую химию	Темы рефератов Вопросы для тестов	Вопросы к экзамену
2	ОПК-1	Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем	Темы рефератов Вопросы для тестов	Вопросы к экзамену
3	ОПК-1	Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии	Темы рефератов Вопросы для тестов	Вопросы к экзамену
4	ОПК-1	«abinitio» методы	Темы рефератов Вопросы для тестов	Вопросы к экзамену
5	ОПК-1	Методы теории функционала плотности(DFT)	Темы рефератов Вопросы для тестов	Вопросы к экзамену
6	ОПК-1	Теория реакционной способности органических соединений	Темы рефератов Вопросы для тестов	Вопросы к экзамену
7	ОПК-1	Молекулярная динамика и химическая кинетика	Темы рефератов Вопросы для тестов	Темы рефератов
8	ОПК-1	Иная контактная работа	Темы рефератов Вопросы для тестов	Вопросы к экзамену



Типовые задания, критерии и показатели оценивания в рамках текущего контроля представлены в рабочей программе по дисциплине. Полные комплекты оценочных средств и контрольно-измерительных материалов хранятся на кафедре.

3.2 Содержание оценочных средств

Примерные темы рефератов:

1. Цели, задачи дисциплины «квантовая химия» и ожидаемые результаты.
2. Известные квантовые химики 20 века.
3. Известные квантовые химики 21 века.
4. Квантовые химики США.
5. Квантовые химики Британии.
6. Квантовые химики Германии.
7. Квантовые химики СССР.
8. Знамениты квантовые химики АН.
9. Знаменитые квантовые химики ВУЗов.
10. Современные достижения квантовой химии.
11. Исторические предпосылки для возникновения квантовой химии.
12. Какие задачи может решать квантовая химия?
13. Что является фундаментом квантовой химии?
14. Какие новые задачи стоят перед квантовой химией?
15. Перспективные пути развития квантовой химии?
16. Адронная химия.
17. Философские проблемы квантовой химии.
18. Преподавание квантовой химии у нас и за рубежом. В чем отличия?
19. Насколько важны практические расчеты в изучении квантовой химии?
20. Квантовая биохимия. В чем суть?
21. Квантовые химики ИОХа.
22. Квантовые химики ИНЕОСа.
23. Квантовые химики университета Дружбы Народов.
24. Квантовые химики Иркутска.
25. Квантовые химики Казани.

Примерные вопросы для тестов

Тема 1. Введение в квантовую химию.

1. Сформулировать основные цели и задачи квантовой химии.
2. Ученые, которые внесли наиболее значимый вклад в развитие науки и их заслуги.
3. Как выглядит соотношение Леонарда Эйлера (1707-1783), полученное им в 1748 году ?



4. Смысл адиабатического приближения?
 5. Существенный недостаток метода самосогласованного поля (ССП)?
- Тема 3. Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии.
1. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием.
 2. Параметризация CNDO/2 .
 3. Разделение энергии по Фишеру и Кольмару.
 4. Параметризация CNDO/S .
 5. Параметризация MINDO/ 3.

Примерные вопросы к экзамену:

1. Дать основные цели и задачи квантовой химии.
2. Описать историю развития идей квантовой химии.
3. Ученые, которые внесли наиболее значимый вклад в развитие квантовой химии и их заслуги.
4. Основное содержание метода ВС.
5. Основное содержание метода МО.
6. Метод Молекулярных Орбиталей Хюккеля (МОХ).
7. Расчет циклопропенильной системы в рамках МОХ.
8. Молекула бутадиена в рамках МОХ.
9. Расчет молекулы циклобутадиена в рамках МОХ.
10. Расчет молекулы бензола в рамках МОХ.
11. Правило Хюккеля. Альтернантные системы.
12. Вычисление коэффициентов в несвязывающих МО.
13. Применение метода Хюккеля к расчету соединений, содержащих гетероатомы.
14. Пути усовершенствования метода МОХ.
15. ЕНТ (Extend Huckel Theory) или метод Гофмана.
16. Метод Паризера-Парра-Попла.
17. Всевалентные полуэмпирические квантовохимические методы. Общие положения.
18. Приближение CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap)
19. Параметризация CNDO/2.
20. Метод CNDO/S.
21. Параметризации CNDO/SW, CNDO/BW и CNDO/FK.
22. INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap).
23. MINDO (MINDO/3) .
24. Приближение NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap).
25. Современные вычислительные пакеты, включающие приближения PM3 , MNDO, ZINDO и др.
26. Что представляет собой анализ заселенностей по Малликену?
27. Какие расчеты называются неэмпирическими?
28. В чем заключаются достоинства полуэмпирических методов по сравнению с



неэмпирическими ?

29. В чем специфика неограниченного метода Хартри-Фока (unrestrictedHF (UHF))?

30. В чем специфика ограниченного метода Хартри-Фока (restrictedHF (RHF))?

31. Методы теории функционала плотности.

32. В чем заключаются преимущества метода DFT по сравнению с неэмпирическими?

33. Что представляет собой корреляционно-согласованный базисный набор в методе DFT?

34. Понятие поверхности потенциальной энергии.

35. Привести пример ППЭ. Дать обоснованные комментарии.

36. Какая точка на ППЭ называется седловой ?

37. Определить понятие «координата реакции».

38. Как сформировать исходный файл для расчетов в рамках программы GAMESS ?

39. Как сформировать исходный файл для расчетов в рамках программы GAUSSIAN ?

40. Как осуществить расчет частот и форм нормальных колебаний в рамках программы GAUSSIAN?

41. Перициклические реакции.

42. Электроциклические реакции.

43. Сигматропные перегруппировки.

44. Качественная теория реакционной способности.

45. Молекулярная динамика и химическая кинетика.

46. Атомы в молекулах. (Взгляды В.М.Татевского, Р.Бейдера и др.)

47. Современные направления развития квантовохимических исследований.

ная диаграмма.



4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации

Критерием успешности освоения учебного материала является экспертная оценка преподавателя, учитывающая регулярность посещения обязательных учебных занятий, знаний теоретического раздела программы по дисциплине, отчеты по лабораторным работам и практическим занятиям.

Качество усвоения знаний завершается зачетом и экзаменом.

Для получения зачета необходимо выполнить доклады, правильно ответить на тестовые вопросы.

Экзамен проводится в присутствии преподавателя и предполагает развернутый, полный ответ на два теоретических вопроса. Вопросы составляются с учётом материала, пройденного как на лекционных занятиях, так и на практических занятиях. Время, отводимое на выполнение итоговой работы 60 минут. Экзамен ориентирован на выявление уровня сформированности знаний, умений и навыков, составляющих основу профессиональных компетенций, обеспечиваемых учебной дисциплиной.

4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

4.2.1. Критерии оценивания экзамена

Критерии оценивания ответа на экзамене:

"Отлично" - студент показал глубокое знание учебно-программного материала. Исчерпывающе, последовательно, грамотно и логически стройно его изложил. Смог самостоятельно сделать необходимые обобщения и выводы. В соответствии с картой компетенций демонстрирует обоснованный выбор приемов саморегуляции при выполнении деятельности в условиях неопределенности;

"Хорошо" - студент знает учебно-программный материал, грамотно и по существу излагает его, не допускает существенных неточностей в ответе на вопрос. Может правильно применить теоретические положения и владеет необходимыми навыками при выполнении практических задач. Демонстрирует возможность и обоснованность реализации приемов саморегуляции при выполнении деятельности в конкретных заданных условиях;

"Удовлетворительно" - студент освоил основной материал, но не знает отдельных деталей, допускает неточности, владеет



отдельными приемами саморегуляции, но допускает существенные ошибки при их реализации, не учитывая конкретные

условия и свои возможности при принятии решений;

"Неудовлетворительно" - студент не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки,

владеет информацией об отдельных приемах саморегуляции, но не умеет реализовывать их в конкретных ситуациях. Итоговая оценка ставится по сумме баллов:

"отлично" - 22-24 балла.

"хорошо" - 19- 21 балл

"удовлетворительно" - 15- 18 баллов

"неудовлетворительно" - менее 15 баллов.

Критерии оценивания зачета

Зачтено	Не зачтено
Обучающийся обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по специальности, справился с выполнением заданий, предусмотренных программой дисциплины.	Обучающийся обнаружил значительные пробелы в знаниях основного учебно-программного материала, допустил принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий и не способен продолжить обучение или приступить по окончании университета к профессиональной деятельности без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.



4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций

При подведении итогов учитываются результаты текущей аттестации.

Уровни сформированности компетенций определяется следующим образом:

1. Высокий уровень сформированности компетенций соответствует оценке отлично:
 - предполагает формирование компетенций на высоком уровне, готовность к самостоятельной профессиональной деятельности: формируются навыки планирования и проведения химического анализа, навыки систематизации теоретических, расчетных и экспериментальных данных для решения профессиональных задач.
 - студент способен аргументировать собственную точку зрения по решению профессиональных вопросов, критически оценивать информацию, формулировать собственные выводы.
2. Средний уровень соответствует оценке хорошо:
 - предполагает формирование компетенций на более высоком уровне: формируется комплексное знание планирования и проведения химического анализа, умение сбора, анализа и обработки данных, необходимых для решения профессиональных задач;
 - студент способен давать развернутые ответы на теоретические вопросы дисциплины на уровне не ниже оценки «удовлетворительно».
3. Базовый уровень соответствует оценке удовлетворительно:



- предполагает формирование компетенций на начальном уровне: знание основных положений планирования и проведение химического анализа;
- студент способен отвечать на теоретические вопросы дисциплины вопросы. Количество правильных ответов – не менее 50%.

4. Низкий уровень соответствует оценке неудовлетворительно.

