

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 10.09.2026 10:01:04
Уникальный программный ключ:
04c19ed8bfb98f3b6cb77a486b9a8788b8922525



МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет Химический
Кафедра химической технологии и вычислительной химии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю) Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 1 из 11	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

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

Квантовая химия

Направление подготовки (специальность)
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)
Фундаментальная и прикладная химия

Присваиваемая квалификация
Химик. Преподаватель химии

Форма обучения
очная

Год набора 2026

Челябинск 2026г.



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет Химический
Кафедра химической технологии и вычислительной химии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия»
по направлению подготовки *04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»* направленности (профилю)
Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 2 из 11

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

***04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Фундаментальная и прикладная химия
Квантовая химия***

***год набора 2026
очная форма обучения***

Проректор по учебной работе

утверждено 27.02.26

А.А. Саламатов

Ученым советом химического факультета

Протокол заседания № 6 от 26.02.2026

Председатель Ученого совета
химического факультета

согласовано

В. А. Бурмистров

Заседанием кафедры химической технологии и вычислительной химии

Протокол заседания № 6 от 24.02.2026

Заведующий кафедрой

согласовано

О.И. Кропачева

Автор (составитель)

А.В. Белик

***Структура фондов оценочных средств соответствует приказу ректора ФГБОУ ВО «ЧелГУ»
от 27 сентября 2022 №573-1***

	МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Факультет Химический Кафедра химической технологии и вычислительной химии		
Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия» по направлению подготовки <u>04.05.01</u> «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю) Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 3 из 11	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

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

 МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Факультет Химический Кафедра химической технологии и вычислительной химии			
Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю) Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 4 из 11	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Направление подготовки: 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Направленность (профиль) Фундаментальная и прикладная химия

Дисциплина: *Квантовая химия*

Семестр изучения: 8.

Формы промежуточной аттестации: *экзамен.*

Система оценивания: *оценивание результатов осуществляется в рамках 5-ти балльной системы.*

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, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	ОПК-1-1. Обладает теоретическими знаниями в области химических наук, ориентируется в причинно-следственных связях между ними; ОПК-1-2. Умеет использовать знания в области химических наук применительно к конкретной области химии; ОПК-1-3. Имеет навыки интерпретации и обобщения результатов практических и теоретических исследований.	Знать: - основные этапы развития квантовой механики; - систему фундаментальных понятий квантовой механики; - квантовый дуализм и квантовую запутанность. Уметь: - анализировать получаемую информацию, выделять главное и второстепенное; - самостоятельно строить процесс овладения информацией; - планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе моделей; Владеть: - методикой получения но-



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет Химический
Кафедра химической технологии и вычислительной химии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия»
по направлению подготовки *04.05.01* «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю)
Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 5 из 11

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

вых знаний;
- техникой научного по-
знания;
- технологиями организа-
ции процесса самообразо-
вания.

 МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Факультет Химический Кафедра химической технологии и вычислительной химии			
Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю) Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 6 из 11	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

3. СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

3.1 Виды оценочных средств

Код, наименование компетенции согласно ФГОС	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине	Контролируемые темы/разделы	Семестр	Номер задания	Наименование оценочного средства
ОПК-1	Уметь анализировать получаемую информацию, выделять главное и второстепенное; самостоятельно строить процесс овладения информацией;	Введение в квантовую химию. Цели, задачи, определения. Математический аппарат и физические принципы.	8	Тема 1 1-5	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом) или тест (задания закрытого типа)
ОПК-1	Иметь базовые понятия и законы физики и математики применительно к химическим объектам; иметь представление о принципах расчетно-теоретических методов изучения химических объектов;	Тема № 2. Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем.	8	Тема 2 1-5	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом) или тест (задания закрытого типа)
ОПК-1	Уметь обрабатывать и интерпретировать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ;	Тема № 3. Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии	8	Тема 3 1-5	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом) или тест (задания закрытого типа)
.ОПК-1	Уметь обрабатывать и интерпретировать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ;	Тема № 4. «ab initio» методы.	8	Тема 4 1-5	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом) или тест (задания закрытого типа)
.ОПК-1	Уметь обрабатывать и интерпретировать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ;	Тема № 5. Методы теории функционала плотности(DFT).	8	Тема 5 1-5	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом) или тест (задания закрытого типа)
.ОПК-1	Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов практических и теоретических	Тема № 6 Теория реакционной способности органических соединений	8	Тема 6 1-5	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом) или тест



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет Химический
Кафедра химической технологии и вычислительной химии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия»
по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю)
Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 7 из 11

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

	исследований.				(задания закрытого типа)
--	---------------	--	--	--	--------------------------

3.2 Содержание оценочных средств

3.2.1. Вопросы к экзамену (вариант теста) по дисциплине

№ темы	Формулировка вопроса	Варианты ответов
1	<i>Введение в квантовую химию.</i> 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)?	1. Квантовая химия - область теоретической химии, изучающая строение и химические превращения атомов, молекул, др. многоатомных систем на основе квантовой механики. 2. Полинг, Гельман, Сыркин, Попл, Парр, Паризер, Дьюар, Хоффман, Кон, , Минкин и др. 3. $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i \sin\varphi$ 4. Разделить электронное и ядерное движения. 5. Волновые функции представлены численно
2	<i>Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем.</i> 1. Представить метод ВС. 2. Представить метод МО. 3. Простой метод Хюккеля (МОХ). 4. Метод ППП. 5. Перечислить несколько всевалентных полуэмпирических методов.	1. В основу метода положена концепция идеального спаривания. Это значит, что химическая связь образуется в результате спаривания спинов двух электронов. Цель метода – построить молекулярные волновые функции, которые бы описывали все возможные химические связи, как результат спаривания спинов двух электронов. 2. МО – одноэлектронная многоцентровая волновая функция. Получается также в результате решения уравнения Шредингера. 3. Рассматриваются только пи-электроны. Все упрощения доведены до предела. ... 4. Метод Парра-Паризера-Попла рассматривает только пи-электроны. Нашел на раннем этапе развития свое широкое применение в теоре-



		тической органической химии. 5. Метод Гоффмана, CNDO/2, MINDO/3, PM3
3	<i>Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии.</i> 1. Полное пренебрежение дифференциальным перекрытием. 2. Параметризация CNDO/2. 3. Разделение энергии по Фишеру и Кольмару. 4. Параметризация CNDO/S. 5. Параметризация MINDO/3.	1. $\langle \mu\nu \lambda\nu \rangle = \langle \mu\mu \lambda\lambda \rangle \delta_{\mu\nu} \delta_{\lambda\sigma}$ $\langle \mu\mu \lambda\lambda \rangle = \gamma_{AB}$ $\chi_{\mu} \in A; \chi_{\lambda} \in B$ γ_{AB} – кулоновский интеграл. 2. $\beta_{AB}^0 = (1/2)k(\beta_A^0 + \beta_B^0) \cdot V_{AB} = Z_{\text{ост. B}} \gamma_{AB}$. 3. $E_{AB} = E_{AB}^R + E_{AB}^V + E_{AB}^J + E_{AB}^K + E_{AB}^N$ $\gamma_{AB} = \frac{7.1957}{R_{AB}} \left\{ \left(1 + \left(\frac{d_A - d_B}{2R_{AB}} \right)^2 \right)^{-1/2} + \right.$ $\left. + \left(1 + \left(\frac{d_A + d_B}{2R_{AB}} \right)^2 \right)^{-1/2} \right\}$ 4. $\gamma_{AB} = f_1(R_{AB})$ $\beta_{\mu\nu} = S_{\mu\nu} (I_{\mu} + I_{\nu}) f_2(R_{AB})$ 5. $E_{AB}^N = Z_A Z_B [\gamma_{AB} + (R_{AB}^{-1} - \gamma_{AB}) f_3(R_{AB})]$
4	<i>«ab initio» методы.</i> 1. Основное уравнение в матричной форме. 2. Формула для вычисления полной электронной энергии. 3. Орбитальная и полная заселенность по Малликену. 4. В каком виде представляется МО? 5. Наиболее популярные программные продукты.	$\sum_{\nu} c_{\nu} (F_{\mu\nu} - \varepsilon_i S_{\mu\nu}) = 0 \quad \text{где}$ $S_{\mu\nu}$ – интегралы перекрытия 1. $F_{\mu\nu}$ – элементы матрицы Фока. $E_{\text{эо}} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} P_{\mu\nu} (H_{\mu\nu} + F_{\mu\nu})$ или $E_{\text{эо}} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} P_{\mu\nu} (2H_{\mu\nu} + G_{\mu\nu})$ 2. $P_{\mu\nu} = 2 \sum_{i=1}^{\text{зан}} c_{i\mu} c_{i\nu} S_{\mu\nu}$ 3. $P_{AB} = 2 \sum_{i=1}^{\text{зан}} \sum_{\mu \in A}^M \sum_{\nu \in B}^M c_{i\mu} c_{i\nu} S_{\mu\nu}$ 4. В виде линейной комбинации атомных орбиталей. 5. HyperChemistry, GAUSSIAN, GAMESS ...
5	<i>Методы теории функционала плотности (DFT).</i> 1. Доказательство какой теоремы положило начало теории функци-	1. Теоремы Хюэнберга и Кона 2. Цель метода – построить молекулярные волновые функции, которые бы описывали все воз-

 МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Факультет Химический Кафедра химической технологии и вычислительной химии			
Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю) Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 9 из 11	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

	онала плотности? 2. Общее выражение для полной энергии в методе ДФТ? 3. Основная суть приближения локальной плотности (LDA). 4. Основная суть обобщенного градиентного приближения (GGA). 5. Часто используемые функционалы.	возможные химические связи, как результат спаривания спинов электронных пар. 3. E_{xc} зависит только от плотности в данной точке... 4. Учитывается изменение плотности при переходе к соседним точкам. 5. B86, B88, PW86, PW91, LYP ...
6	<i>Теория реакционной способности органических соединений</i> 1. Что важно знать о поверхности потенциальной энергии? 2. Что представляет собой матрица Гессе? 3. Координата реакции s ? 4. Кто впервые сформулировал теорию активированного (переходного) состояния? 5. Роль Кенити Фукуи в разработке теории протекания химических реакций.	1. Информацию о стационарных точках и седловых точках. 2. Матрица вторых частных производных 3. Это длина дуги опорной кривой, которая отсчитывается от седловой точки. 4. Вигнер, Поляни, Эйринг и Эванс. 5. Получил уравнение, названное его именем.

4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация проводится в письменной форме по билетам или в форме теста. В билете (тесте) сформулированы вопросы по каждому из 6 разделов дисциплины. Время подготовки ответа 45 минут. Дополнительное оборудование и материалы на экзамене не предусмотрены.

4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

4.2.1 Критерии оценивания вопроса билета (теста)

Максимальный балл за ответ на один вопрос — 10 баллов.

Отлично 9-10 баллов	Хорошо 7-8 баллов	Удовлетворительно 5-6 баллов	Неудовлетворительно 0-4 балла
Высокий уровень освоения	Средний уровень освоения	Базовый уровень освоения	Недостаточный уровень освоения



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет Химический
Кафедра химической технологии и вычислительной химии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия»
по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю)
Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1	стр. 10 из 11	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	---------------	------------------------	---------------

проверяемых компетенций	проверяемых компетенций	проверяемых компетенций	проверяемых компетенций
Обучающийся уверенно владеет материалом, умеет анализировать проблему и аргументированно изложить свою точку зрения, владеет достаточным для высказывания лексическим запасом, грамотно изъясняется с использованием точных терминов и названий. Обучающийся практически не допускает ошибок.	Обучающийся ориентируется в материале, умеет анализировать проблему и аргументированно изложить свою точку зрения, владеет достаточным для высказывания лексическим запасом, грамотно изъясняется с использованием точных терминов и названий. Обучающийся допускает незначительные ошибки.	Обучающийся в общих чертах знаком с материалом, владеет достаточным для высказывания лексическим запасом. Обучающийся допускает фактические и языковые ошибки, не оперирует лексическим запасом по теме.	Обучающийся не знает основных положений вопроса, не ориентируется в основных понятиях, излагает материал с трудом, с грубыми фактическими и языковыми ошибками, либо отказывается от ответов на вопросы.

Баллы за ответы суммируются, итоговая оценка выставляется согласно таблице:

Оценка	Отлично	Хорошо	Удовлетворительно	Неудовлетворительно/незачтено
Баллы	45-50 баллов	35-44 баллов	21-34 баллов	0-20 баллов
Уровень освоения проверяемых компетенций	высокий	средний	базовый	недостаточный

4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций

Уровни сформированности компетенций определяется следующим образом:

1. Высокий уровень сформированности компетенций соответствует оценке «отлично»:

	МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Факультет Химический Кафедра химической технологии и вычислительной химии		
	Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Квантовая химия» по направлению подготовки <i>04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»</i> направленности (профилю) Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»		
	Версия документа - 1	стр. 11 из 11	Первый экземпляр _____ КОПИЯ № _____

- предполагает формирование компетенций на более высоком уровне, готовность к самостоятельной профессиональной деятельности: формируются навыки составления информационных обзоров по темам, навыки систематизации данных, необходимых для решения конкретных задач;

- студент способен аргументировать собственную точку зрения по дискуссионным вопросам дисциплины, решать ситуационные задачи, критически оценивать информацию о состоянии и проблемах развития науки, формулировать собственные выводы.

2. Средний уровень соответствует оценке «хорошо»:

- предполагает формирование компетенций на высоком уровне: формируется комплексное знание особенностей применения и понимания предмета, умение сбора, анализа и обработки данных;

- студент способен давать развернутые ответы на теоретические вопросы дисциплины, аргументировать свою точку зрения.

3. Базовый уровень соответствует оценке «удовлетворительно»:

- предполагает формирование компетенций на начальном уровне: знание основных положений науки;

- студент способен отвечать на вопросы в письменной форме. Количество правильных ответов – не менее 50%.

4. Низкий уровень соответствует оценке «неудовлетворительно»: разрозненные бессистемные знания, допускаются грубые ошибки в понятиях и определениях.