

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 15.09.2025 10:40:53
Уникальный программный ключ:
04c19ed8b0981506cb77a48bb9a6788b8322323



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)

Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)
«Теория и практика расчета колебаний молекул»,
по направлению подготовки (специальности) 04.04.01 "Химия",
направленности (профилю) Физико-химические процессы в современных технологиях ФГБОУ ВО
«ЧелГУ»

стр. 1

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

Теория и практика расчета колебаний молекул

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

**Направленность (профиль)
Физико-химические процессы в современных технологиях**

**Присваиваемая квалификация (степень)
Магистр**

**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: 04.04.01 «Химия»

Направленность (профиль) Физико-химические процессы в современных технологиях

Дисциплина: Теория и практика расчета колебаний молекул

Семестр (семестры) изучения: 3.

Форма (формы) промежуточной аттестации: 3 семестр – зачет, экзамен.

2. ПЕРЕЧЕНЬ ФОРМИРУЕМЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ

2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной

Изучение дисциплины «Теория и практика расчета колебаний молекул» 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
ПК-1	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.	Знает теоретические основы колебательной спектроскопии; методы и технологию проведения расчетов Умеет: проводить конкретные расчеты на ПК Владеет навыками работы с учебной литературой; навыками работы с программным обеспечением



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	ПК-1/Умеет интерпретировать результаты экспериментов, расчетно-теоретических работ.	Введение. Основные положения	Темы рефератов	Вопросы к экзамену.
2	ПК-1/Умеет интерпретировать результаты экспериментов, расчетно-теоретических работ.	Колебательная спектроскопия	Темы рефератов	Вопросы к экзамену.
3	ПК-1/Умеет интерпретировать результаты экспериментов, расчетно-теоретических работ.	Современная колебательная спектроскопия	Темы рефератов	Вопросы к экзамену.
4	ПК-1/Умеет интерпретировать результаты экспериментов, расчетно-теоретических работ.	Развитие расчетных методов в ЧелГУ	Темы рефератов	Вопросы к экзамену.
5	ПК-1/Умеет интерпретировать результаты экспериментов, расчетно-теоретических работ.	Контактная работа	Темы рефератов	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. Природа ИК- и КР-спектров, их роль в химии.
2. Физическая модель, лежащая в основе колебательной спектроскопии.
3. Способы решения векового уравнения.
4. Естественные координаты.
5. Координаты $X\delta_0$.
6. Возможности полуэмпирических методов квантовой химии в расчетах силовых полей молекул.
7. Возможности неэмпирических методов квантовой химии в расчетах силовых полей молекул.
8. Возможности DFT методов квантовой химии в расчетах силовых полей молекул.
9. Прямая и обратная спектральные задачи.
10. Современные пути решения колебательной задачи в химии.
11. Программное обеспечение, реализующее методы колебательной спектроскопии.

Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации

Примерные вопросы экзаменационных билетов:

1. Указать основные цели и задачи дисциплины.
2. Описать историю развития идей вычислительной колебательной спектроскопии.
3. Ученые, которые внесли наиболее значимый вклад в развитие теории колебаний молекул .
4. Естественные координаты.
5. Координаты $X\delta_0$.
6. Методы квантовой химии в расчетах силовых полей молекул.
7. Способы построения программного обеспечения в решении задач колебательной спектроскопии.
8. Прямая и обратная спектральные задачи.
9. Современные пути решения колебательной задачи в химии.
10. Научные школы в России.
11. Обсудить достоинства и недостатки ряда алгоритмов, используемых в



задачах расчета колебательных спектров

многоатомных молекул.

12. Полуэмпирические модели расчета колебательных спектров

многоатомных молекул.

13. Учет ангармоничности колебаний в расчетах.

14. Расчет интенсивности в колебательных спектрах.

15. Современные направления развития колебательной спектроскопии.



4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

4.1 Порядок проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета в один этап.

Студент письменно отвечает на один вопрос в билете, которые не предполагают вариантов ответа, правильный ответ требуется написать самостоятельно. Время выполнения – 60 минут.

4.2 Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

Критерии оценки реферата

Оценка "Отлично" - коммуникативная задача полностью выполнена с учетом цели высказывания и адресата. В работе присутствуют: введение-постановка проблемы, основная часть, логичный вывод (выражение мнения/сбалансированное суждение).

Оценка "Хорошо" - коммуникативная задача выполнена с учетом цели высказывания и адресата, но не все аспекты содержания раскрыты полностью и (или) отсутствует постановка проблемы/вывод.

Оценка "Удовлетворительно" - коммуникативная задача выполнена частично, тема раскрыта не полностью и (или) объем высказывания менее 30 % от заданного.

Оценка "Неудовлетворительно" - коммуникативная задача не выполнена, тема не раскрыта и (или) объем менее 50% от заданного.

Критерии оценивания ответа на экзамене:

Промежуточная аттестация завершается экзаменом, на котором у студента проверяется степень сформированности компетенций, усвоение теоретических знаний и умение их применять в практической деятельности.

В соответствии с этими критериями ответ студента оценивается следующим образом:

«Отлично» - студент глубоко и полно владеет содержанием учебного материала и понятийным аппаратом; умеет связывать теорию с практикой, иллюстрировать примерами, фактами, данными научных исследований; осуществляет меж предметные связи, предложения, выводы; умеет обосновывать свои суждения и профессионально-личностную позицию по излагаемому вопросу. Ответ носит самостоятельный характер или допущенные ошибки исправляются студентом после дополнительных вопросов преподавателя.

«Хорошо» - студент владеет содержанием учебного материала и



понятийным аппаратом; умеет связывать теорию с практикой, иллюстрировать примерами, фактами, данными научных исследований; умеет обосновывать свои суждения по излагаемому вопросу.

«Удовлетворительно» - студент знает содержание учебного материала, умеет связывать теорию с практикой, иллюстрировать примерами, фактами, данными научных исследований; умеет обосновывать свои суждения по излагаемому вопросу.

«Неудовлетворительно» - студент имеет разрозненные, бессистемные знания; не умеет выделять главное и второстепенное. Допускает ошибки в определении понятий, формулировке теоретических положений, искажающих их смысл; не ориентируется в программно-методических, исследовательских материалах, беспорядочно и неуверенно излагает материал; не умеет соединять теоретическое положение с практикой.

4.3 Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций

При подведении итогов учитываются результаты ответа по двум вопросам. Общая оценка выставляется, как среднее арифметическое. Особенности в проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья обозначены в рабочей программе дисциплины (модуля).

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 составления информационных обзоров по синтезу и свойствам функциональных материалов, навыки систематизации данных, необходимых для решения химических задач
- студент способен аргументировать собственную точку зрения по дискуссионным вопросам дисциплины, решать ситуационные задачи, критически оценивать информацию о состоянии и проблемах развития исследований в области функциональных материалов, формулировать собственные выводы.

2. Средний уровень соответствует оценке **хорошо:**

- предполагает формирование компетенций на более высоком уровне:



формируется комплексное знание особенностей применения и понимания химических законов, умение сбора, анализа и обработки данных, необходимых в дальнейшей профессиональной деятельности для решения ситуаций в процессе аудиторских проверок;

- 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 свойств функциональных материалов и их применение;
- студент способен отвечать на дополнительные вопросы по основным разделам курса.

4. Низкий уровень соответствует оценке **неудовлетворительно**.

