

Документ подписан простой электронной подписью Информация о владельце: ФИО: Таскаев Сергей Васильевич Должность: Ректор	МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)	
Дата подписания: 15.09.2025 10:43:11 Уникальный программный ключ: 04c19ed8bfb98f5bbcb77a48bb9a878808522525	Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) «Квантовая химия» по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 1

Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

Квантовая химия

Направление подготовки (специальность)
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)
Органическая и биоорганическая химия

Присваиваемая квалификация
Химик. Преподаватель химии

Форма обучения
Очная

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
 - 3.2.1. Вопросы к экзамену по дисциплине
 - 3.2.2. Темы рефератов
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: *04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»*

Направленность (профиль) *Органическая и биоорганическая химия*

Дисциплина: *Квантовая химия*

Семестр изучения: *8*

Формы промежуточной аттестации: *экзамен.*

Система оценивания: *оценивание результатов осуществляется в рамках 5-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-1-2. Умеет использовать знания в области химических наук применительно к конкретной области химии;	Знает базовые понятия и законы физики и математики применительно к химическим объектам; иметь представление о принципах расчетно-теоретических методов изучения химических объектов; Умеет обрабатывать и интерпретировать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ; Владеет навыками анализа, интерпретации и обобщения результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности



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. Знает базовые понятия и законы физики и математики применительно к химическим объектам; имеет представление о принципах расчетно-теоретических методов изучения химических объектов;	Введение в квантовую химию. Цели, задачи, определения. Математический аппарат и физические принципы	Реферат	Теоретические вопросы к экзамену № 1 -6
2	ОПК-1 Умеет обрабатывать и интерпретировать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ;	Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем. История вопроса. Методы ВС и МО. Метод Хюккеля. Практические приложения метода. Интерпретация результатов и их значение. Метод ППП.	Реферат	Теоретические вопросы к экзамену № 5-25
3	ОПК-1 Обладает теоретическими знаниями в области химических наук, ориентируется в причинно-следственных связях между ними; Имеет навыки анализа, интерпретации и обобщения результатов практических и теоретических исследований.	Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии. CNDO, INDO, MINDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO и др. Их особенности, варианты параметризаций, возможности применений и программные продукты.	Реферат	Теоретические вопросы к экзамену № 4-26
4	ОПК-1. Умеет обрабатывать и интерпретировать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ;	«ab initio» методы. Особенности, специфика и практические результаты. Программные продукты.	Реферат	Теоретические вопросы к экзамену № 27 – 30, 38 - 40
5	ОПК-1. Знает базовые понятия и законы физики и математики применительно к химическим объектам; имеет представление о принципах расчетно-теоретических методов изучения химических	Методы теории функционала плотности (DFT). История вопроса. Проблемы учета корреляции. Виды функционалов	Реферат	Теоретические вопросы к экзамену № 31-33, 38-40



	объектов;			
6	ОПК-1. Владеет навыками анализа, интерпретации и обобщения результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности;	Теория реакционной способности органических соединений. Классические представления. Роль методов квантовой химии. Индексы реакционной способности. Построение ППЭ	Реферат	Теоретические вопросы к экзамену № 41-47
7	ОПК-1-3. Владеет навыками анализа, интерпретации и обобщения результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Молекулярная динамика и химическая кинетика. История вопроса. Методы исследования. Бимолекулярные газовые химические реакции. Расчет констант скоростей реакций. Получаемые результаты. Пути развития.	Реферат	Вопросы к экзамену № 31-47

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

3.2. Содержание оценочных средств

3.2.1. Вопросы к экзамену по дисциплине

1. Основные цели и задачи квантовой химии (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать цели и задачи.

2. Описать историю развития идей квантовой химии (ОПК-1)

План ответа: Проследить историю вопроса. Дать развернутую характеристику их этапов.

3. Ученые, которые внесли наиболее значимый вклад в развитие квантовой химии и их заслуги (ОПК-1)

План ответа: Проследить историю вопроса. Дать краткую характеристику ученых и их заслуги.

4. Основное содержание метода ВС (ОПК-1))

План ответа: Сформулировать цели и задачи. Дать краткую характеристику авторам метода. Раскрыть его содержание.

5. Основное содержание метода МО (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать цели и задачи. Дать краткую характеристику авторам метода. Раскрыть его содержание.

6. Метод Молекулярных Орбиталей Хюккеля (МОХ) (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать цели и задачи. Дать краткую характеристику автору метода. Раскрыть его содержание.

7. Расчет циклопропенильной системы в рамках МОХ (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать цели и задачи. Провести расчет.. Раскрыть его содержание и значение.



8. Молекула бутадиена в рамках МОХ (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать цели и задачи. Провести расчет.. Раскрыть его содержание и значение.

9. Расчет молекулы циклобутадиена в рамках МОХ (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать цели и задачи. Провести расчет.. Раскрыть его содержание и значение.

10. Расчет молекулы бензола в рамках МОХ (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать цели и задачи. Провести расчет.. Раскрыть его содержание и значение.

11. Правило Хюккеля. Альтернантные системы (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать правило и дать основные определения. Провести расчеты. Раскрыть его содержание и значение.

12. Вычисление коэффициентов в несвязывающих МО (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Провести расчеты. Раскрыть содержание метода и его значение.

13. Применение метода Хюккеля к расчету соединений, содержащих гетероатомы. (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Провести расчеты. Раскрыть содержание метода и его значение.

14. Пути усовершенствования метода МОХ (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Провести расчеты. Раскрыть содержание метода и его значение.

15. ЭНТ (Extend Huckel Theory) или метод Гофмана (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

16. Метод Паризера-Парра-Попла (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Провести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

17. Всевалентные полуэмпирические квантово-химические методы. Общие положения (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

18. Приближение CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap) (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

19. Параметризация CNDO/2 (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

20. Метод CNDO/S (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

21. Параметризации CNDO/SW, CNDO/BW и CNDO/FK (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

22. INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap) (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание



метода и его значение.

23. MINDO (MINDO/3) (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

24. Приближение NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap) (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

25. Современные вычислительные пакеты, включающие приближения PM3, MNDO, ZINDO и др. (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

26. Что представляет собой анализ заселенностей по Малликену? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

27. Какие расчеты называются неэмпирическими? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

28. В чем заключаются достоинства полуэмпирических методов по сравнению с неэмпирическими? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Провести анализ. Раскрыть содержание методов и их значение.

29. В чем специфика неограниченного метода Хартри-Фока (unrestrictedHF (UHF))? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

30. В чем специфика ограниченного метода Хартри-Фока (restrictedHF (RHF))? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

31. Методы теории функционала плотности (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

32. В чем заключаются преимущества метода DFT по сравнению с неэмпирическими? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести основополагающие доводы. Раскрыть содержание подхода.

33. Что представляет собой корреляционно-согласованный базисный набор в методе DFT? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести формулы. Раскрыть содержание метода и его значение.

34. Понятие поверхности потенциальной энергии (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Дать базовые определения. Раскрыть содержание метода и его значение.

35. Привести пример ППЭ. Дать обоснованные комментарии (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести пример ППЭ. Дать обоснованные комментарии.



36. Какая точка на ППЭ называется седловой? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

37. Определить понятие «координата реакции» (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Дать обоснованные комментарии (ОПК-1)

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

План ответа: Сформулировать задачу. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

39. Как сформировать исходный файл для расчетов в рамках программы GAUSSIAN ? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

40. Как осуществить расчет частот и форм нормальных колебаний в рамках программы GAUSSIAN? (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

41. Перициклические реакции (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

42. Электроциклические реакции. (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Дать определения. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

43. Сигматропные перегруппировки (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Дать определения. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

44. Качественная теория реакционной способности (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Дать определения. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

45. Молекулярная динамика и химическая кинетика.(ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Дать определения. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

46. Атомы в молекулах. (Взгляды В.М.Татевского, Р.Бейдера и др.) (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Дать определения. Привести пример. Дать обоснованные комментарии.

47. Современные направления развития квантовохимических исследований (ОПК-1)

План ответа: Сформулировать задачу. Дать определения. Привести примеры. Дать обоснованные комментарии.

3.2.2. 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.

4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации

Экзамен проводится в письменной форме по билетам, каждый из которых содержит 2 вопроса. На подготовку письменного ответа отводится не более 45 мин. Критерии оценивания представлены в табл. 4.2.1.

4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

4.2.1. Критерии оценивания ответа на экзамене

Отлично	Хорошо	Удовлетворительно	Неудовлетворительно
Высокий уровень освоения проверяемых компетенций	Средний уровень освоения проверяемых компетенций	Базовый уровень освоения проверяемых компетенций	Недостаточный уровень освоения проверяемых компетенций
Обучающийся дает развернутый и	Обучающийся дает развернутый от-	Обучающийся знает ком с материалом;	Обучающийся не знает основных поло-



полный логически выстроенный ответ, допускающий отдельные неточности в изложении материала; демонстрирует владение понятийным аппаратом и содержанием учебного материала, умение связать теорию с практикой, иллюстрировать ответ примерами, фактами, аргументировать свою точку зрения; делает обоснованные выводы;	вет на вопрос, демонстрирует владение понятийным аппаратом; аргументирует свою точку зрения; в ответе допускает незначительные ошибки и неточности, которые исправляются студентом после указания на них;	дает ответ на вопрос в общих чертах, в ответе допускает фактические ошибки и неточности, которые не могут быть исправлены студентом; имеются недостатки по полноте и содержанию ответа;	жений вопроса, не ориентируется в основных понятиях, излагает материал с трудом, с грубыми фактическими ошибками, либо отказывается от ответов на вопросы или содержание ответа не соответствует поставленному вопросу.
--	---	---	---

Особенности проведения процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья обозначены в рабочей программе дисциплины (модуля).

4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций

Уровни сформированности компетенций определяются следующим образом:

Уровни сформированности компетенций определяются следующим образом:

1. Высокий уровень сформированности компетенций соответствует оценке «Отлично» и предполагает:
 - знание истории формирования и развития дисциплины;
 - владение понятиями и терминами химии;
 - знание традиционных методов химии;
 - умение применять знания к конкретным задачам;
 - способность критически оценивать информацию о состоянии и проблемах дисциплины;



- умение выразить свою точку зрения на проблему;
 - проявление самостоятельности в решении ряда задач.
2. Средний уровень соответствует оценке «Хорошо» и предполагает:
- владение понятийным аппаратом химии;
 - знание истории формирования дисциплины;
 - умение применять знания к конкретным проблемам;
 - студент способен самостоятельно давать ответы на теоретические вопросы дисциплины.
3. Базовый уровень соответствует оценке «Удовлетворительно» и предполагает:
- знание основных этапов становления и развития химии;
 - умение применять знания к конкретным задачам;
 - удовлетворительное владение понятийным аппаратом дисциплины.
4. Недостаточный уровень (бессистемные разрозненные знания, затруднения в написании формул, отсутствие базового уровня) соответствует оценке «Неудовлетворительно».