

Документ подписан простой электронной подписью Информация о владельце: ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич Должность: Ректор Дата подписания: 19.09.2025 10:48:02 Уникальный программный ключ: 04c19ed8bfb98f3b6cb77a486b9a8788b8322525	МИНОБРАЗОВАНИЯ 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" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Химия материалов 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)

Химия материалов

Присваиваемая квалификация (степень)

Химик. Преподаватель химии.

Форма обучения

очная

Челябинск 2025 г.

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия Химия материалов Квантовая химия
2025г очная форма обучения

Фонд оценочных средств дисциплины (модуля) одобрен и рекомендован:

Проректор по учебной работе утверждено 24.02.25 А.А. Саламатов

Ученым советом химического факультета

Протокол заседания № 6 от 14.02.2025

Председатель Ученого совета
химического факультета

согласовано

В. А. Бурмистров

Заседанием кафедры химической технологии и вычислительной химии

Протокол заседания № 6 от 28.01.2025

Заведующий кафедрой _____ согласовано _____ О. И. Кропачева

Автор (составитель) А.В. Белик

Структура рабочей программы соответствует приказу ректора ФГБОУ ВО «ЧелГУ» от «13» апреля 2021 г. № 247-1



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

Фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» по направлению подготовки
04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия, ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 3 из 10

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Направление подготовки: *04.05.01 Фундаментальная и
прикладная химия*

Дисциплина: *Квантовая химия*

Семестр изучения: 8

Формы промежуточной аттестации: *экзамен.*

Система оценивания: *оценивание результатов осуществляется по 5-
балльной системе.*

2. ПЕРЕЧЕНЬ ФОРМИРУЕМЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ

2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной

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

Коды компетенции (по ФГОС)	Содержание компетенций согласно ФГОС	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОПК-1	способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Знать: – основные этапы развития квантовой химии; Уметь: – анализировать получаемую информацию, выделять главное и второстепенное; Владеть: – навыками работы с учебной и научной литературой; – навыками работы с программным обеспечением.
ПК-3	владением системой фундаментальных химических понятий;	Знать: – систему фундаментальных понятий квантовой химии; Уметь: – самостоятельно строить процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения профессиональной деятельности; Владеть: – методиками получения новых знаний.

 МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Химический факультет Кафедра химической технологии и вычислительной химии			
Фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия, ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 4 из 10	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

3. СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

3.1 Виды оценочных средств

№ п/п	Код компетенции/ планируемые результаты обучения	Контролируемые темы	Наименование оценочного средства для текущего контроля	Наименование оценочного средства на промежуточной аттестации/№ задания
1	ОПК-1. Знать историю возникновения и развития основных понятий квантовой химии, авторов тех или иных идей и основоположников дисциплины. ПК-3. Уметь пользоваться определениями и законами дисциплины.	Введение в квантовую химию.	Реферат, тест	Экзаменационный билет, вопросы № 1-3.
2	ПК-3. Знать принципы расчетно-теоретических методов. ОПК-1. Уметь производить и выполнять простейшие расчеты с использованием данных методов.	Исторически первые методы рассмотрения молекулярных систем.	Реферат, тест	Экзаменационный билет, вопросы № 4-14, 26, 41-43.
3	ПК-3. Знать принципы расчетно-теоретических методов. ОПК-1. Уметь производить и выполнять простейшие расчеты с использованием данных методов.	Всевалентные полуэмпирические методы квантовой химии	Реферат, тест	Экзаменационный билет, вопросы № 15- 25, 38-40
4	ПК-3. Знать принципы расчетно-теоретических методов. ОПК-1. Уметь производить и выполнять простейшие расчеты с использованием данных методов;	«Abinitio» методы	Реферат, тест	Экзаменационный билет, вопросы № 27-30, 38-40
5	ОПК-1. Уметь самостоятельно строить	Методы теории функционала	Реферат, тест	Экзаменационный билет, вопросы №

 МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Химический факультет Кафедра химической технологии и вычислительной химии			
Фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия, ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 5 из 10	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

	процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения квантово-механических расчетов.	плотности (DFT)		31–33, 38-40
6	ОПК-1. Иметь представление о реакционной способности органических соединений и критерии ее оценки. Владеть техникой выполнения расчетов с помощью ПК.	Теория реакционной способности органических соединений	Реферат, тест	Экзаменационный билет, вопросы № 34-37, 44
7	ПК-3. Знать принципы квантово-химических методов и исходные концепции в их основе. ОПК-1. Владеть техникой выполнения расчетов с помощью ПК.	Молекулярная динамика и химическая кинетика	Реферат, тест	Экзаменационный билет, вопросы № 45–47

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. Дать основные цели и задачи квантовой химии (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Сформулировать цели и задачи. Дать развернутую характеристику.

2. Описать историю развития идей квантовой химии (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Разбить на временные этапы. Сформулировать понятия. Дать собственную оценку.

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

План ответа: Составить необходимый список зарубежных и отечественных ученых. Дать краткую характеристику их заслуг.

4. Основное содержание метода ВС (ОПК-1, ПК-3)

	МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Химический факультет Кафедра химической технологии и вычислительной химии
Фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия, ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	
Версия документа - 1	стр. 6 из 10 Первый экземпляр _____ КОПИЯ № _____

План ответа: Сформулировать цели и задачи метода. Дать характеристику авторам метода. Его значение.

5. Основное содержание метода МО (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Сформулировать цели и задачи метода. Дать характеристику авторам метода. Его значение.

6. Метод Молекулярных Орбиталей Хюккеля (МОХ) (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Сформулировать цели и задачи метода. Дать характеристику автора метода. Его значение метода в квантовой химии.

7. Расчет циклопропенильной системы в рамках МОХ (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Записать уравнение. Произвести решение. Сделать выводы.

8. Молекула бутадиена в рамках МОХ (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Записать уравнение. Произвести решение. Сделать выводы.

9. Расчет молекулы циклобутадиена в рамках МОХ. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Записать уравнение. Произвести решение. Сделать выводы.

10. Расчет молекулы бензола в рамках МОХ (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Записать уравнение. Произвести решение. Сделать выводы.

11. Правило Хюккеля. Альтернантные системы (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Сформулировать правило. Дать нужные определения. Сделать обобщения и выводы.

12. Вычисление коэффициентов в несвязывающих МО (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать нужные определения. Определиться с объектами исследования. Сделать расчеты, обобщения и выводы.

13. Применение метода Хюккеля к расчету соединений, содержащих гетероатомы (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Привести один из приемов такого подхода. На конкретном примере произвести расчеты.

14. Пути усовершенствования метода МОХ (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Сформулировать три основных подхода.

15. ЕНТ (Extend Huckel Theory) или метод Гофмана (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Записать основное уравнение. Формулы для вычисления интегралов. Области применения и эффективность.

16. Метод Паризера – Парра - Попла (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Записать основное уравнение метода. Формулы для вычисления интегралов. Области применения и эффективность.

17. Всевалентные полуэмпирические квантово-химические методы. Общие положения. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Сформулировать общие положения и требования к всевалентным методам.

18. Приближение CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap) (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Записать основное уравнение. Формулы для вычисления интегралов. Области применения и эффективность.

19. Параметризация CNDO/2 (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Записать основные формулы и приближения метода.

20. Метод CNDO/S. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: С какой целью создан метод, привести основные формулы.

	МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Химический факультет Кафедра химической технологии и вычислительной химии
Фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия, ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	
Версия документа - 1	стр. 7 из 10 Первый экземпляр _____ КОПИЯ № _____

21. Параметризации CNDO/SW, CNDO/BW и CNDO/FK. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Сформулировать причины создания приближений, их специфику и полученные результаты.

22. INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap). (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Основные положения метода и формулы.

23. MINDO (MINDO/3) . (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Основные положения метода и формулы. Авторство и с какой целью метод был создан.

24. Приближение NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap). (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Основные положения метода и формулы.

25. Современные вычислительные пакеты, включающие приближения PM3 , MNDO, ZINDO и др. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Перечислить пакеты программ, их особенности и недостатки.

26. Что представляет собой анализ заселенностей по Малликену? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Сформулировать положение и записать формулу.

27. Какие расчеты называются неэмпирическими? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Области применения.

28. В чем заключаются достоинства полуэмпирических методов по сравнению с неэмпирическими ? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Перечислить достоинства методов.

29. В чем специфика неограниченного метода Хартри-Фока (unrestricted HF (UHF))? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Отметить особенности.

30. В чем специфика ограниченного метода Хартри-Фока (restricted HF (RHF))? (ОПК-1, ПК-3).

План ответа: дать определение. Отметить особенности.

31. Методы теории функционала плотности. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Рассмотреть историю вопроса. Особенности подхода. Основное содержание. Роль в современной химии.

32. В чем заключаются преимущества метода DFT по сравнению с неэмпирическими? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Отметить все достоинства и недостатки.

33. Что представляет собой корреляционно-согласованный базисный набор в методе DFT? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Рассмотреть историю вопроса и достигнутые результаты.

34. Понятие поверхности потенциальной энергии (ППЭ) (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Значение для химии.

35. Привести пример ППЭ. Дать обоснованные комментарии. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Рассмотреть на простейшем примере.

36. Какая точка на ППЭ называется седловой ? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение ППЭ и рассмотреть все ее особенности.

37. Определить понятие «координата реакции». (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Привести примеры.

38. Как сформировать исходный файл для расчетов в рамках программы GAMESS ? (ОПК-1, ПК-3)

 МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Химический факультет Кафедра химической технологии и вычислительной химии			
Фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия, ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 8 из 10	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

План ответа: Дать определение. Привести примеры.

39. Как сформировать исходный файл для расчетов в рамках программы GAUSSIAN ? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Привести примеры.

40. Как осуществить расчет частот и форм нормальных колебаний в рамках программы GAUSSIAN? (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Привести примеры.

41. Перициклические реакции. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Привести примеры.

42. Электроциклические реакции. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Привести примеры.

43. Сигматропные перегруппировки. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Привести примеры.

44. Качественная теория реакционной способности (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Определение РС, основные положения, области применения.

45. Молекулярная динамика и химическая кинетика. (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать определение. Привести примеры.

46. Атомы в молекулах. (Взгляды В.М. Татевского, Р.Бейдера и др.) (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Обозначить проблему. Показать пути ее решения.

47. Современные направления развития квантово-химических исследований (ОПК-1, ПК-3)

План ответа: Дать краткую характеристику достигнутым результатам и отметить перспективные пути развития по мнению современных ученых в области квантовой химии.

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. 4.1.

4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

4.2.1. Критерии оценивания ответа на экзамене



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

Фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия, ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 9 из 10

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

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 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.	Обучающийся 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.	Обучающийся 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.	Обучающийся не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, владеет информацией об отдельных приемах саморегуляции, но не умеет реализовывать их в конкретных ситуациях.

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

	МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Химический факультет Кафедра химической технологии и вычислительной химии
Фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» по направлению подготовки 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия, ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	
Версия документа - 1	стр. 10 из 10

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 квантовой химии;
 - знание методов квантовой химии;
 - знание алгоритмов расчета и популярных программ квантовой химии;
 - умение применять знания к конкретным задачам;
 - способность критически оценивать информацию о состоянии и проблемах квантовой химии;
 - умение выражать свою точку зрения на проблему;
 - проявление самостоятельности в решении ряда задач.
2. Средний уровень соответствует оценке «Хорошо» и предполагает:
 - владение понятийным аппаратом квантовой химии;
 - знание истории формирования дисциплины;
 - знание методов квантовой химии;
 - умение применять знания к конкретным задачам;
 - студент способен к самостоятельному поиску информации по проблемам квантовой химии и ее структурированию.
3. Базовый уровень соответствует оценке «Удовлетворительно» и предполагает:
 - знание методов квантовой химии;
 - умение применять знания к конкретным задачам;
 - удовлетворительное владение методами расчета.
4. Недостаточный уровень (бессистемные разрозненные знания, затруднения в написании формул, отсутствие базового уровня) соответствует оценке «Неудовлетворительно».