

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич

Должность: Ректор

Дата подписания: 10.07.2026 10:57:37

Уникальный программный ключ:

04c19ed8b0981506c077a486b9a6788b8322323



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

Челябинск 2025 г.

	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

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»)
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

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

	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

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.

	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

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:

	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

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**.

*04.04.01, Физико-химические процессы в современных технологиях, Химия, Теория и практика
расчета колебаний молекул, 2025, очная*

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 аналитической и физической 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