

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
Квантовая химия

**Код модуля**  
1161428(1)

**Модуль**  
Современные теоретические представления  
химии и аттестации материалов

**Екатеринбург**

Оценочные материалы составлены автором(ами):

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия, имя, отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Сафронов Александр Петрович	доктор физико-математических наук, профессор	профессор	департамент фундаментальной и прикладной химии

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

**Авторы:**

- Сафронов Александр Петрович, профессор, департамент фундаментальной и прикладной химии

**1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Квантовая химия**

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Лабораторные занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Экзамен	
4.	Текущая аттестация	Домашняя работа	3
		Отчет по лабораторным работам	2

**2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Квантовая химия**

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ОПК-2 -Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты	Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований	Домашняя работа № 1 Домашняя работа № 2 Домашняя работа № 3 Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам № 1 Отчет по лабораторным работам № 2 Экзамен

<p>ОПК-3 -Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения  З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области  У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p>	<p>Домашняя работа № 1  Домашняя работа № 2  Домашняя работа № 3  Лабораторные занятия  Лекции  Отчет по лабораторным работам № 1  Отчет по лабораторным работам № 2  Экзамен</p>
<p>ОПК-1 -Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе  З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях  У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p>	<p>Домашняя работа № 1  Домашняя работа № 2  Домашняя работа № 3  Лабораторные занятия  Лекции  Отчет по лабораторным работам № 1  Отчет по лабораторным работам № 2  Экзамен</p>

### **3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)**

#### **3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине**

**1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.6**

Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>домашняя работа №1</i>	1,8	30
<i>домашняя работа №2</i>	1,10	30
<i>домашняя работа №3</i>	1,12	40
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.4</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.6</b>		
<b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – не предусмотрено</b>		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– не предусмотрено</b>		
<b>Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям–нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– не предусмотрено</b>		
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –0.4</b>		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>отчет по лабораторным работам №1</i>	1,6	30
<i>отчет по лабораторным работам №2</i>	1,14	50
<i>работа на занятиях</i>	1,15	20
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -1</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено</b>		
<b>4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено</b>		
Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено</b>		
<b>Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено</b>		

### 3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– <b>не предусмотрено</b>		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – <b>не предусмотрено</b>		

#### 4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

##### Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

##### Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)		
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов	Шкала оценивания

	<b>обучения (выполненное оценочное задание)</b>	<b>Традиционная характеристика уровня</b>		<b>Качественная характеристика уровня</b>
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно но (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

## **5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ**

### **5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля**

#### **5.1.1. Лекции**

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

#### **5.1.2. Лабораторные занятия**

Примерный перечень тем

1. Определение группы симметрии молекул
2. Определение числа нормальных колебаний молекулы

LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля**

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

## **Базовый**

#### **5.2.1. Домашняя работа № 1**

Примерный перечень тем

1. Метод молекулярной механики

Примерные задания

С помощью программы PCModel рассчитать мольный объем циклогексана.

С помощью программы PCModel рассчитать заряды на атомах полярных групп C=O, O-H молекулы щавелевой кислоты.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.2. Домашняя работа № 2

Примерный перечень тем

1. Полуэмпирические квантово-химические расчеты

Примерные задания

С помощью программы HyperChem рассчитать расстояние между атомами кислорода в молекуле этилацетата, оптимизированной методом PM3.

С помощью программы HyperChem рассчитать энергию молекулы бутадиена, оптимизированной по методу PM3 (ккал/моль).

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.3. Домашняя работа № 3

Примерный перечень тем

1. Моделирование химических реакций

Примерные задания

С помощью программы MORAC рассчитать энергию начального состояния реакции SN2 замещения CH<sub>3</sub>Cl+F<sup>-</sup> (ккал/моль).

С помощью программы MORAC рассчитать расстояние Cl-C в переходном состоянии реакции SN2 замещения CH<sub>3</sub>Cl+F<sup>-</sup> (ккал/моль).

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.4. Отчет по лабораторным работам № 1

Примерный перечень тем

1. Теория симметрии молекул

Примерные задания

Для молекулы п-дихлорбензола определить группу симметрии.

Для молекулы трихлорбензола рассчитать характеры полного представления операций симметрии.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.5. Отчет по лабораторным работам № 2

Примерный перечень тем

1. Молекулярное моделирование

Примерные задания

Для молекулы фенола рассчитать энергию по методу CNDO (ккал/моль).

Для молекулы пиридина рассчитать энергию ВЗМО по методу PM3 (эВ).

LMS-платформа – не предусмотрена

## 5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

### 5.3.1. Экзамен

Список примерных вопросов

1. Классификация элементов и операций симметрии молекул. Понятие точечной группы симметрии. Определение группы симметрии для конкретных молекул. Примеры.

2. Записать многоэлектронную волновую функцию для приведенной электронной конфигурации молекулы.

LMS-платформа – не предусмотрена

#### **5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности**

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.