

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
Квантовая химия

**Код модуля**  
1158176(1)

**Модуль**  
Современные теории и модели описания  
вещества

**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	Контрольная работа	2
		Домашняя работа	3

**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 предьявление 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 № 2 Домашняя работа № 3 Домашняя работа №1 Контрольная работа № 2 Контрольная работа №1 Лабораторные занятия Лекции 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 № 2  Домашняя работа № 3  Домашняя работа №1  Контрольная работа № 2  Контрольная работа №1  Лабораторные занятия  Лекции  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-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление  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 целей подходов и методов</p>	<p>Домашняя работа № 2  Домашняя работа № 3  Домашняя работа №1  Контрольная работа № 2  Контрольная работа №1  Лабораторные занятия  Лекции  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**

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.60</b>		
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 – 0.40</b>		
Промежуточная аттестация по лекциям – <b>экзамен</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.60</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>		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – <b>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 – 0.40</b>		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>Контрольная работа №1</i>	1,6	30
<i>Контрольная работа №2</i>	1,14	50
<i>Работа на занятиях</i>	1,15	20
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – 1.00</b>		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – <b>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>		
Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям – <b>нет</b>		

**Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено**

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

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

<b>Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)</b>				
<b>№ п/п</b>	<b>Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)</b>	<b>Шкала оценивания</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 (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. Контрольная работа №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

### 5.2.2. Контрольная работа № 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

### 5.2.3. Домашняя работа №1

Примерный перечень тем

1. Метод молекулярной механики

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

### 5.2.4. 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

### 5.2.5. Домашняя работа № 3

Примерный перечень тем

1. Моделирование химических реакций

Примерные задания

С помощью программы MOPAC рассчитать энергию начального состояния реакции SN2 замещения  $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{F}^-$  (ккал/моль)

С помощью программы MOPAC рассчитать расстояние Cl–C в переходном состоянии реакции SN2 замещения  $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{F}^-$  (ккал/моль)

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.