

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**
Квантовая химия

Код модуля
1143538(1)

Модуль
Современные физико-математические теории и
модели описания вещества

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

| № п/п | Фамилия, имя, отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|-------------------------------|--|------------------|--|
| 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 № 1 Домашняя работа № 2 Домашняя работа № 3 Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 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 № 1 Домашняя работа № 2 Домашняя работа № 3 Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 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 № 1 Домашняя работа № 2 Домашняя работа № 3 Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 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

| | | |
|---|---------------------------------|------------------------------|
| 1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.60 | | |
| 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 |
| Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.40 | | |
| Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.60 | | |
| 2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – не предусмотрено | | |
| Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях | Сроки – семестр, учебная неделя | Максимальная оценка в баллах |
| | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено | | |
| Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – нет | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено | | |
| 3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – 0.40 | | |
| 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 |
| Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – 1.00 | | |
| Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – нет | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено | | |
| 4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий – не предусмотрено | | |
| Текущая аттестация на онлайн-занятиях | Сроки – семестр, учебная неделя | Максимальная оценка в баллах |
| | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено | | |
| Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям – нет | | |

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 |
|---|---------------------------------|------------------------------|
| Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено | | |
| Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено | | |

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 обучения (выполненное оценочное задание) | Шкала оценивания | | |
| | | Традиционная характеристика уровня | | Качественная характеристика уровня |
| 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 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

5.2.4. 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 MORAC рассчитать энергию начального состояния реакции SN2 замещения CH₃Cl+F⁻ (ккал/моль)

С помощью программы MORAC рассчитать расстояние Cl-C в переходном состоянии реакции SN2 замещения CH₃Cl+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.