

Компонент 04.03.01 Химия

Б1.О.27

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Дисциплины
(модуля)

Квантовая химия

Разработчик:

Воронько Н.Г.

ФИО

доцент кафедры химии

должность

доктор хим. наук, доцент

ученая степень,
звание

Утверждено на заседании кафедры

химии

наименование кафедры

протокол № 6 от 06.02.2024 г.

Заведующий кафедрой _____

_____ Т. А. Дякина _____

Мурманск
2024

1. Критерии и средства оценивания компетенций и индикаторов их достижения, формируемых дисциплиной (модулем)

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора(ов) достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине (модулю)			Оценочные средства текущего контроля	Оценочные средства промежуточной аттестации
		<i>Знать</i>	<i>Уметь</i>	<i>Владеть</i>		
ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ИД-1оПК-3 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности. ИД-2оПК-3 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.	физико-химические основы, необходимые для решения профессиональных задач в области квантовой химии вещества; понятийный аппарат квантовой химии и его связь с системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии	использовать физико-химические для решения типовых профессиональных задач по основным разделам квантовой химии; решать модельные задачи квантовой химии и анализировать их решения в терминах атомно-молекулярной структуры вещества	навыками решения типовых задач по основным разделам квантовой химии; формами и методами научного познания при формулировании и решении профессиональных задач в области квантовой химии	Комплект заданий для выполнения и защиты практических работ	Результаты текущего контроля
ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные	ИД-1оПК-4 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности. ИД-2оПК-4 Обрабатывает данные с	физико-химические основы, необходимые для решения профессиональных задач в области квантовой химии вещества; понятийный аппарат квантовой химии и его	использовать физико-химические для решения типовых профессиональных задач по основным разделам квантовой химии; решать модельные задачи квантовой химии и анализировать их	навыками решения типовых задач по основным разделам квантовой химии; формами и методами научного познания при формулировании и решении профессиональных задач в	Комплект заданий для выполнения и защиты практических работ	Результаты текущего контроля

результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик. ИД-3опк-4 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.	связь с системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии	решения в терминах атомно-молекулярной структуры вещества	области квантовой химии		
ОПК-5. Сопособен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ИД-1опк-5 Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля. ИД-2опк-5 Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности.	физико-химические основы, необходимые для решения профессиональных задач в области квантовой химии вещества; понятийный аппарат квантовой химии и его связь с системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии	использовать физико-химические для решения типовых профессиональных задач по основным разделам квантовой химии; решать модельные задачи квантовой химии и анализировать их решения в терминах атомно-молекулярной структуры вещества	навыками решения типовых задач по основным разделам квантовой химии; формами и методами научного познания при формулировании и решении профессиональных задач в области квантовой химии	Комплект заданий для выполнения и защиты практических работ	Результаты текущего контроля

2. Оценка уровня сформированности компетенций (индикаторов их достижения)

Показатели оценивания компетенций (индикаторов их достижения)	Шкала и критерии оценки уровня сформированности компетенций (индикаторов их достижения)			
	Ниже порогового («неудовлетворительно»)	Пороговый («удовлетворительно»)	Продвинутый («хорошо»)	Высокий («отлично»)
Полнота знаний	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допущены не грубые ошибки.	Уровень знаний в объёме, соответствующем программе подготовки. Допущены некоторые погрешности.	Уровень знаний в объёме, соответствующем программе подготовки.
Наличие умений	При выполнении стандартных заданий не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки.	Продемонстрированы основные умения. Выполнены типовые задания с не грубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объёме (отсутствуют пояснения, неполные выводы)	Продемонстрированы все основные умения. Выполнены все основные задания с некоторыми погрешностями. Выполнены все задания в полном объёме, но некоторые с недочётами.	Продемонстрированы все основные умения. Выполнены все основные и дополнительные задания без ошибок и погрешностей. Задания выполнены в полном объёме без недочётов.
Наличие навыков (владение опытом)	При выполнении стандартных заданий не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.	Имеется минимальный набор навыков для выполнения стандартных заданий с некоторыми недочётами.	Продемонстрированы базовые навыки при выполнении стандартных заданий с некоторыми недочётами.	Продемонстрированы все основные умения. Выполнены все основные и дополнительные задания без ошибок и погрешностей. Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач.
Характеристика сформированности компетенции	Компетенции фактически не сформированы. Имеющихся знаний, умений, навыков недостаточно для решения практических (профессиональных) задач. Зачетное количество баллов не набрано согласно установленному диапазону	Сформированность компетенций соответствует минимальным требованиям. Имеющихся знаний, умений, навыков в целом достаточно для решения практических (профессиональных) задач. Набрано зачетное количество баллов согласно установленному диапазону	Сформированность компетенций в целом соответствует требованиям. Имеющихся знаний, умений, навыков достаточно для решения стандартных профессиональных задач. Набрано зачетное количество баллов согласно установленному диапазону	Сформированность компетенций полностью соответствует требованиям. Имеющихся знаний, умений, навыков в полной мере достаточно для решения сложных, в том числе нестандартных, профессиональных задач. Набрано зачетное количество баллов согласно установленному диапазону

3. Критерии и шкала оценивания заданий текущего контроля

3.1 Критерии и шкала оценивания практических работ

Перечень практических работ, описание порядка выполнения и защиты работы, требования к результатам работы, структуре и содержанию отчета и т.п. представлены в методических материалах по освоению дисциплины (модуля) и в электронном курсе в ЭИОС МАУ.

Оценка	Критерии оценивания
<i>Отлично</i>	Задание выполнено полностью и правильно. Отчет по практической работе, задания по практической работе выполнены качественно в соответствии с требованиями. Полнота ответов на вопросы преподавателя при защите работы.
<i>Хорошо</i>	Задание выполнено полностью, но нет достаточного обоснования или при верном решении допущена незначительная ошибка, не влияющая на правильную последовательность рассуждений. Все требования, предъявляемые к работе, выполнены.
<i>Удовлетворительно</i>	Задания выполнены частично с ошибками. Демонстрирует средний уровень выполнения задания на практическую работу. Большинство требований, предъявляемых к заданию, выполнены.
<i>Неудовлетворительно</i>	Задание выполнено со значительным количеством ошибок на низком уровне. Многие требования, предъявляемые к заданию, не выполнены. Задание не выполнено.

Примерный перечень вопросов, задаваемых при собеседовании по практическим работам по дисциплине «Квантовая химия»:

№	Вопрос	Формируемые компетенции
1.	Экспериментальные предпосылки возникновения квантовой механики. Принцип неопределенности Гейзенберга	ОПК-3 ОПК-4 ОПК-5
2.	Постулаты квантовой механики	
3.	Временное уравнение Шрёдингера	
4.	Стационарное уравнение Шрёдингера	
5.	Уравнение Шрёдингера на основании уравнения гармонической плоской волны де Бройля	
6.	Полярные координаты. Операторы момента импульса в сферических координатах	
7.	Уравнение Шрёдингера в полярных координатах, разделение переменных r, θ, φ	
8.	Уравнения Шрёдингера с позиции закона сохранения энергии и операторов квантовой механики	
9.	Частица в одномерном прямоугольном потенциальном ящике	
10.	Понятие операторов квантовой механики. Операторы, отвечающие основным физическим величинам	
11.	Оператор Гамильтона для атома водорода, гелия, многоэлектронных атомов	
12.	Многоэлектронные атомы, приближение независимых частиц	
13.	Метод Хартри–Фока, фокиан, кулоновский и обменный интегралы	
14.	Вариационный принцип Ритца	
15.	Физический смысл квантовых чисел	
16.	Полуэмпирические методы расчета	

17.	Ортонормированный базис для квантово-химических расчетов	
18.	Квантово-химические расчеты молекулярных систем. Адиабатическое приближение	
19.	Общая схема квантово-химических расчетов методом самосогласованного поля	
20.	Периодическая система Менделеева с позиций квантовой химии	
21.	Спин электрона	
22.	Уравнения Рутана	
23.	Задача об атоме водорода	
24.	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Схема расчета	
25.	Метод самосогласованного поля	
26.	Принцип Паули. Определители Слэйтера	
27.	Полуэмпирические методы квантовой химии. Основные положения, требования, предъявляемые к ним и необходимость использования	

4. Задания диагностической работы для оценки результатов обучения по дисциплине (модулю) в рамках внутренней независимой оценки качества образования

ФОС содержит задания для оценивания знаний, умений и навыков, демонстрирующих уровень сформированности компетенций и индикаторов их достижения в процессе освоения дисциплины (модуля).

Комплект заданий разработан таким образом, чтобы осуществить процедуру оценки каждой компетенции, формируемых дисциплиной (модулем), у обучающегося в письменной форме.

Содержание комплекта заданий включает: *тестовые задания, практико-ориентированные задания.*

Перечень заданий для тестирования:

Код и наименование компетенции

ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

- 1) Постулаты квантовой механики. Что это такое и определения всех шести постулатов.
- 2) Операторы квантовой механики (координаты, импульса, Лапласа, кинетической энергии, потенциальной энергии, гамильтониан).
- 3) Связь координат x, y, z частицы со сферическими координатами.
- 4) Оператор Лапласа в сферических координатах.
- 5) Стационарное уравнение Шрёдингера.
- 6) Три случая применения стационарного уравнения Шрёдингера. Назвать и указать, где энергетический спектр непрерывный, где дискретный.
- 7) Вариационный принцип Ритца, идея, +/-.
- 8) Теория возмущений, идея, +/-
- 9) Оператор Гамильтона для атома водорода

Код и наименование компетенции

ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

- 1) Вариационный принцип Ритца, идея, +/-.
- 2) Теория возмущений, идея, +/-
- 3) Метод ССП, идея, схема. Отличие метода Хартри от метода Хартри–Фока.
- 4) Метод Борна–Оппенгеймера – идея.
- 5) Метод валентных связей.
- 6) Оператор Гамильтона для атома водорода, гелия, многоэлектронных атомов.
- 7) Физический смысл квантовых чисел.
- 8) Спин. Что это? Оператор спина и проекции спина.
- 9) Терм атома. Мультиплетность.
- 10) Нормальный триплет Зеемана. Эффект Пашена–Бака.

Код и наименование компетенции

ОПК-5. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

- 1) Для чего нужны полуэмпирические методы квантовой химии?
- 2) Требования к полуэмпирическим методам.
- 3) Основные положения метода НДП (нулевого дифференциального перекрывания).
- 4) Основные положения метода молекулярных орбиталей Хюккеля.
- 5) Отличия методов CNDO и INDO.
- 6) Метод Фроста на примере бензола.