

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Аксёнов Александр Викторович
Должность: Декан химического факультета
Дата подписания: 17.06.2024 17:41:00
Уникальный программный ключ:
073635787274402487435acab3ab854864148641

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**

«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета

д-р хим. наук, проф.

Аксенов А.В.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Квантовая химия

Направление подготовки	04.03.01 Химия
Направленность (профиль)	Органическая и медицинская химия
Год начала обучения	2026
Форма обучения	очная
Реализуется в семестре	6

Введение

1. Назначение Фонд оценочных средств предназначен для проверки освоения студентами универсальных и общепрофессиональных компетенций в соответствии с требованиями образовательной программы согласно ФГОС по направлению подготовки 04.03.01. Химия.

2. ФОС является приложением к программе дисциплины (модуля) «Квантовая химия» (модуль: Физическая и коллоидная химия).

3. Разработчик Тимченко Вячеслав Петрович, канд. хим. наук, доцент кафедры физической химии

4. Проведена экспертиза ФОС.

Члены экспертной группы:

Председатель Аксенов Николай Александрович, д-р хим. наук, проф.,
зав. кафедрой органической химии

Члены комиссии: Уклеина И.Ю., канд. хим. наук, доцент кафедры аналитической химии

Гришин И.Ю. канд. хим. наук, доцент кафедры органической химии.

Представитель организации-работодателя директор ЗАО «Люкс» Адоньев А.И.

Экспертное заключение рекомендовать фонд оценочных средств по дисциплине «Квантовая химия» к использованию в учебном процессе.

5. Срок действия ФОС определяется сроком реализации образовательной программы.

1. Описание критериев оценивания компетенции на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Компетенция (ии), индикатор (ы)	Уровни сформированности компетенци(ий),			
	Минимальный уровень не достигнут (Неудовлетворите льно) 2 балла	Минимальный уровень (удовлетворительн о) 3 балла	Средний уровень (хорошо) 4 балла	Высокий уровень (отлично) 5 баллов
Компетенция: УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни				
Результаты обучения по дисциплине (модулю): Индикатор: УК-6 ИД-1 Устанавливает личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности	Не устанавливает личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности	Ограниченно устанавливает личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности	В достаточной степени устанавливает личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности	В полной мере устанавливает личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности
УК-6 ИД-2 Реализует и корректирует стратегию личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств, личностных возможностей,	Не реализует и не корректирует стратегию личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств, личностных	Ограниченно реализует и корректирует стратегию личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств, личностных	В достаточной степени реализует и корректирует стратегию личностного и профессионального	В полной мере реализует и корректирует стратегию личностного и профессионального

этапов карьерного роста, временной перспективы раз-вития деятельности и требований рынка труда	возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда	возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда	нального развития, с учетом условий, средств, личностны х возможнос тей, этапов карьерного роста, временной перспекти вы развития деятельнос ти и требовани й рынка труда	развития, с учетом условий, средств, личностн ых возможно стей, этапов карьерног о роста, временно й перспекти вы развития деятельно сти и требовани й рынка труда
УК-6 ИД-3 Критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональ ной деятельности	Не оценивает критически эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональ ной деятельности	Ограниченно критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональ ной деятельности	В достаточн ой степени критическ и оценивает эффективн ость использова ния времени и других ресурсов при решении поставлен ных задач в избранной сфере профессио нальной деятельнос ти	В полной мере критическ и оценивает эффектив ность использов ания времени и других ресурсов при решении поставлен ных задач в избранной сфере професси ональной деятельно сти
Компетенция: ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений				
Результаты обучения по дисциплине: <i>Индикатор:</i> ИД-1 ОПК-1. Систематизирует	Не систематизирует и не анализирует результаты химических экспериментов,	Ограниченно систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов,	В достаточной степени систематизиру ет и анализирует результаты	В полной мере систематизи рует и анализирует результаты

и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
<i>Индикатор:</i> ИД-2 ОПК-1. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Не предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Ограниченно предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	В достаточной степени предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	В полной мере предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии
<i>Индикатор:</i> ИД-3 ОПК-1. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Не формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Ограниченно формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	В достаточной степени формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	В полной мере формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности
Компетенция: ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники				

Результаты обучения по дисциплине: <i>Индикатор:</i> ИД-1 ОПК-3. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Не применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Ограниченно применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	В достаточной степени применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	В полной мере применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности
<i>Индикатор:</i> ИД-2 ОПК-3. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Не использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Ограниченно использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	В достаточной степени использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	В полной мере использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

2. Критерии оценивания компетенций*

Оценка «отлично» выставляется студенту, если

- он показал глубокое, прочное и аргументированное освоение программного учебного материала, при этом поставленные вопросы базового и продвинутого уровня раскрыты последовательно, четко и логически стройно, в полном исчерпывающем объеме, основные категории, понятия и термины учебного курса формулировались правильно, не допущено при ответе ошибок;

- он продемонстрировал высокое умение применять полученные знания и навыки на практике через решение конкретных задач базового и продвинутого уровня, свободно без затруднений справился с поставленными задачами, показав владение разносторонними приемами и навыками их выполнения, не допустил ошибок и неточностей;

Оценка «хорошо» выставляется студенту, если

- он показал твердое знание программного учебного материала, при этом поставленный вопрос раскрыт грамотно и по существу, в достаточно полном объеме, основные категории, понятия и термины учебного курса формулировались правильно, допущены при ответе отдельные неточности или одна ошибка;

- он продемонстрировал умение применять полученные знания на практике через решение конкретной задачи базового уровня, справился с поставленной задачей, показав

владение необходимыми приемами и навыками ее выполнения, при этом допустил не более одной ошибки;

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если

- он показал знание только основной части учебного материала без его частных деталей, при этом поставленный вопрос раскрыт с нарушением логической последовательности, не в полном объеме; были допущены неточные формулировки основных категорий, понятий и терминов учебного курса, а также ошибки (не более двух) или ряд незначительных неточностей, не исказивших существенно суть ответа;

- он продемонстрировал посредственное умение применять полученные знания на практике через решение конкретной задачи базового уровня, с трудом справился с поставленной задачей, при этом допустил не более двух ошибок;

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если

- он не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки (более двух), значительно исказившие его суть. Оценка неудовлетворительно выставляется также, если отсутствует ответ на вопрос, либо студент отказался его сдавать.

- он не продемонстрировал умение применять полученные знания на практике через решение конкретной задачи базового уровня, не справился с поставленной задачей или допустил при ее решении три и более серьезные ошибки.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕРКИ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ

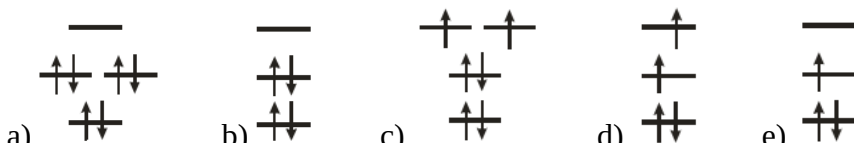
Номер задания	Правильный ответ	Содержание вопроса	Компетенция
1.	a)	Какое из представленных ниже выражений определяет длину волны де Бройля λ для нерелятивистской частицы массой m, обладающей кинетической энергией ε? h – постоянная Планка a) $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}}$ b) $\lambda = \frac{h}{2m\varepsilon}$ c) $\lambda = \frac{h}{\sqrt{m\varepsilon}}$ d) $\lambda = \frac{h}{m\varepsilon}$ e) $\lambda = \frac{h}{(2m\varepsilon)^2}$	УК-6
2.	c)	Согласно соотношению неопределенностей Гейзенберга не могут быть одновременно точно определены ... a) координата и масса микрочастицы b) масса и импульс микрочастицы c) координата и соответствующая проекция импульса микрочастицы d) различные координаты микрочастицы	УК-6
3.	b)	Условие нормировки волновой функции электрона в одномерной потенциальной яме шириной a имеет вид a) $\int_0^a \Psi^2(x) dx = 0$ b) $\int_0^a \Psi^2(x) dx = 1$ c) $\int_0^a \Psi(x) dx = 1$	УК-6
4.	c)	Какой из ниже перечисленных операторов, действующих в линейном пространстве дифференцируемых функций одной переменной, не является линейным? a) умножения на функцию $f(x)$ b) дифференцирования c) возведения в квадрат	УК-6

		d) никакой из перечисленных	
5.	e)	Какая функция получится в результате действия оператора дифференцирования d/dx на функцию $x\cos 2x$? a) $\cos 2x$ b) $-2\sin 2x$ c) $x\cos 2x - 2\sin 2x$ d) $\cos 2x + 2x\sin 2x$ e) $\cos 2x - 2x\sin 2x$	УК-6
6.		Любой способ описания молекулярной систем, кроме декартовой системы, если он в любой момент эволюции системы позволяет взаимно однозначно выразить декартовы координаты всех атомов называется ...	УК-6
7.		Представление волновой функции многоэлектронной системы в виде детерминанта Слейтера способом спаривания, когда каждому электрону соответствует своя пространственная орбиталь, называют ...	УК-6
8.		Представление волновой функции многоэлектронной системы в виде детерминанта Слейтера способом спаривания, когда каждая орбиталь описывает пару электронов с противоположным спином, называют ...	УК-6
9.		Подход к решению уравнения Шредингера при котором спинные переменные отделяются от пространственных переменных и учитываются за счет представления волновой функции в виде детерминанта Слейтера называется ...	УК-6
10.		Приближение позволяющее существенно упростить решение уравнений Хартри-Фока согласно которому, одноэлектронные орбитали раскладываются по конечному числу одноэлектронных базисных функций, центрированных на ядрах атомов, называется ...	УК-6
11.		Методы ... – это неэмпирические методы, в которых волновая функция представляется в виде не одного, а комбинации из нескольких или многих слейтеровских детерминантов.	УК-6
12.		В основе теории ... лежит отказ от использования волновой функции для описания системы и использование для этой цели функции электронной плотности.	УК-6
13.		Основным уравнением в теории функционала плотности является уравнение ...	УК-6

14.		Приближение согласно которого электронная энергия зависит только от функции электронной плотности называется ...	УК-6
15.		Приближение включающее зависимость энергии от электронной плотности и ее градиента называется ...	УК-6
16.		Гибридные функционалы, в которых функционалом являются не только выражения потенциальной энергии взаимодействия внутри электронной плотности, но и выражения для кинетической энергии электронов, называются ...	УК-6
17.		Решение сложного многоэлектронного уравнения Шредингера полуэмпирическими методами, в отличие от неэмпирических, достигается за счет того, что часть вычисляемых величин заменяется на числовые параметры, калибруемые по ...	УК-6
18.		Базисные функции, в которых радиальная часть функции является экспонентой или линейной комбинацией экспонент от радиальной переменной называются ...	УК-6
19.		Базисные функции, в которых радиальная часть функции является гауссовой функцией от расстояния, а угловая часть описывается либо сферической гармоникой (чистые сферические гауссовы функции), либо полиномом от декартовых координат (декартовы гауссовы функции) называются ...	УК-6
20.		Базисы в которых атомные орбитали представляются несколькими функциями таким образом, что орбиталь оказывается как-бы разбита на несколько частей, называются ...	УК-6
21.	b)	Действие оператора проекции импульса $\hat{p}_y$ на произвольную функцию $\Psi(y)$ в координатном представлении определяется соотношением: a) $\hat{p}_y \Psi = -\hbar^2 \frac{d^2 \Psi}{dy^2}$ b) $\hat{p}_y \Psi = -i\hbar \frac{d\Psi}{dy}$ c) $\hat{p}_y \Psi = p_y \Psi$ d) $\hat{p}_y \Psi = y\Psi$	ОПК-1
22.	a)	Коммутатор операторов координаты и проекции импульса $[\hat{x}, \hat{p}_y]$ равен ... a) 0	ОПК-1

		b) $\hat{p}_y$ c) $i\hbar$ d) $\hat{x}$ e) $-\hbar^2$	
23.	b)	Собственные функции любого оператора физической величины... a) ортогональны b) комплексно сопряжены по отношению друг к другу c) действительны d) отличаются числовым множителем	ОПК-1
24.	c)	Чему равны собственные значения оператора проекции импульса на ось y ? a) любому целому числу b) любому целому положительному числу c) любому действительному числу d) любому положительному действительному числу	ОПК-1
25.		Описание атомных координат в виде n записей (для каждого атома i в данной n -атомной системе) $N_i r_{ia} \alpha_{iabc} \theta_{iabc} N_a N_b N_c$, где N_i – тип атома i (в виде атомного номера, имени химического элемента или в виде какой-либо комбинации, аналогично $NXYZ$ -координатам, описанным выше); $r_{ia} \alpha_{iabc} \theta_{iabc}$ – межатомное расстояние, валентный и торсионный углы, образуемые данным атомом с атомами a, b, c называемыми опорными атомами называется ...	ОПК-1
26.		Любой способ описания молекулярной систем, кроме декартовой системы, если он в любой момент эволюции системы позволяет взаимно однозначно выразить декартовы координаты всех атомов называется ...	ОПК-1
27.		Представление волновой функции многоэлектронной системы в виде детерминанта Слейтера способом спаривания, когда каждому электрону соответствует своя пространственная орбиталь, называют ...	ОПК-1
28.		Представление волновой функции многоэлектронной системы в виде детерминанта Слейтера способом спаривания, когда каждая орбиталь описывает пару электронов с противоположным спином, называют ...	ОПК-1
29.		Подход к решению уравнения Шредингера при котором спинорные переменные отделяются от пространственных переменных и учитываются	ОПК-1

		за счет представления волновой функции в виде детерминанта Слейтера называется ...	
30.		Приближение позволяющее существенно упростить решение уравнений Хартри-Фока согласно которому, одноэлектронные орбитали раскладываются по конечному числу одноэлектронных базисных функций, центрированных на ядрах атомов, называется ...	ОПК-1
31.		Методы ... – это неэмпирические методы, в которых волновая функция представляется в виде не одного, а комбинации из нескольких или многих слейтеровских детерминантов.	ОПК-1
32.		В основе теории ... лежит отказ от использования волновой функции для описания системы и использование для этой цели функции электронной плотности.	ОПК-1
33.		Основным уравнением в теории функционала плотности является уравнение ...	ОПК-1
34.		Приближение согласно которого электронная энергия зависит только от функции электронной плотности называется ...	ОПК-1
35.		Приближение включающее зависимость энергии от электронной плотности и ее градиента называется ...	ОПК-1
36.		Гибридные функционалы, в которых функционалом являются не только выражения потенциальной энергии взаимодействия внутри электронной плотности, но и выражения для кинетической энергии электронов, называются ...	ОПК-1
37.	c)	Какое из представленных ниже уравнений является временным уравнением Шрёдингера для волновой функции Ψ частицы? $\hat{H}$ оператор гамильтона. a) $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$ b) $i\hbar \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \hat{H} \Psi$ c) $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$ d) $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \hat{H} \Psi$	ОПК-3
38.	c)	Гамильтониан некоторой квантовой системы не зависит от времени.	ОПК-3

		Собственные функции $\varphi_n(x)$ и собственные значения E_n этого гамильтониана известны. Какое из нижеприведённых выражений определяет волновую функцию стационарного состояния системы $\Psi(x, t)$? a) $\Psi(x, t) = \varphi_n(x)$ b) $\Psi(x, t) = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$ c) $\Psi(x, t) = \varphi_n(x)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$ d) $\Psi(x, t) = E_n e^{-i\frac{\varphi_n(x)t}{\hbar}}$	
39.	c)	Ядро сложного атома является бозоном, если... a) число протонов в ядре больше числа нейтронов b) оно составлено из нечетного числа фермионов c) оно составлено из четного числа фермионов	ОПК-3
40.		Установите соответствие: 1) молекула с нулевым полным спином и невырожденными орбиталями 2) молекула с вырожденными, но полностью заполненными орбиталями 3) радикал 4) возбужденное синглетное состояние молекулы 5) триплетный бирадикал, с вырожденной верхней занятой орбиталью 	ОПК-3
41.		Базисные наборы, в которых базисные функции являются комбинациями гармонических функций и которые используются в расчетах систем с трансляционной симметрией (кристаллов, поверхностей, полимеров) называются ...	ОПК-3
42.		Приближение согласно которого электронная энергия зависит только от функции электронной плотности называется ...	ОПК-3
43.		Приближение включающее зависимость энергии от электронной	ОПК-3

		плотности и ее градиента называется ...	
44.		Гибридные функционалы, в которых функционалом являются не только выражения потенциальной энергии взаимодействия внутри электронной плотности, но и выражения для кинетической энергии электронов, называются ...	ОПК-3
45.		Решение сложного многоэлектронного уравнения Шредингера полуэмпирическими методами, в отличие от неэмпирических, достигается за счет того, что часть вычисляемых величин заменяется на числовые параметры, калибруемые по ...	ОПК-3
46.		Базисные функции, в которых радиальная часть функции является экспонентой или линейной комбинацией экспонент от радиальной переменной называются ...	ОПК-3
47.		Базисные функции, в которых радиальная часть функции является гауссовой функцией от расстояния, а угловая часть описывается либо сферической гармоникой (чистые сферические гауссовы функции), либо полиномом от декартовых координат (декартовы гауссовы функции) называются ...	ОПК-3
48.		Базисы в которых атомные орбитали представляются несколькими функциями таким образом, что орбиталь оказывается как-бы разбита на несколько частей, называются ...	ОПК-3
49.		Приближение позволяющее существенно упростить решение уравнений Хартри-Фока согласно которому, одноэлектронные орбитали раскладываются по конечному числу одноэлектронных базисных функций, центрированных на ядрах атомов, называется ...	ОПК-3
50.		Методы ... – это неэмпирические методы, в которых волновая функция представляется в виде не одного, а комбинации из нескольких или многих слейтеровских детерминантов.	ОПК-3
51.		В основе теории ... лежит отказ от использования волновой функции для описания системы и использование для этой цели функции электронной плотности.	ОПК-3
52.		Основным уравнением в теории функционала плотности является уравнение ...	ОПК-3

