

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Аксёнов Александр Викторович
Должность: Декан химического факультета
Дата подписания: 19.06.2024
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.х.н., профессор

Аксенов А.В.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Квантовая химия

Направление подготовки
Направленность (профиль)
Год начала обучения
Форма обучения
Реализуется в семестре

04.03.01 Химия
Неорганическая и аналитическая химия
2026
очная
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 ВО 04.03.01 Химия.

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

3. Разработчик Тимченко Вячеслав Петрович, доцент кафедры неорганической и физической химии

4. Проведена экспертиза ФОС.

Члены экспертной группы:

Председатель Аксенова И.В., зав. кафедрой физической химии, д.х.н.

Члены комиссии: Тимченко В.П., доцент кафедры физической химии, к.х.н.;
Гвозденко А.А., старший преподаватель кафедры физической 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 (Неудовлетворительно) 2 балла	Минимальный уровень (удовлетворительно) 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	Студент имеет фрагментарные знания основного материала, допускает грубые ошибки в формулировках, отсутствует последовательность в изложении программного материала.	Студент имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала,	Студент твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос,	Студент глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, использует в ответе материал монографической литературы, правильно обосновывает принятое решение.
УК-6 ИД-2 Реализует и корректирует стратегию личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств,	Неуверенность и большие затруднения при выполнении практических заданий	Студент испытывает затруднения при выполнении практических заданий, неверно использует способы и методы	Студент правильно применяет теоретические положения при решении практических заданий,	Студент умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и

личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда				другими видами применения знаний.
УК-6 ИД-3 Критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач в избранной сфере профессиональной деятельности	Отсутствие навыков проведения типовых вычислений, связанных с проведением квантово-химических расчетов	Навыки имеются, но используются неверно	Владеет необходимым и навыками и приемами	Студент владеет разносторонними навыками и приемами выполнения практических задач.
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 и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Фрагментарное знание подходов и методов получения результатов в экспериментальных исследованиях.	Частичное освоение подходов и методов получения результатов в экспериментальных исследованиях. Знает методы исследования материалов, но не соотносит их с конкретными свойствами. Имеет представления о влиянии структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями и излучениями, но при изложении допускает фактические	Полностью знает подходы и методы получения результатов в экспериментальных исследованиях. Знает методы исследования свойств материалов. Имеет представления о влиянии структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями и излучениями	Полностью знает подходы и методы получения результатов в экспериментальных исследованиях, методы исследования свойств материалов. Имеет четкое представление о влиянии структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями и

		ошибки и неточности		излучениями
<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	Слабо умеет применять знания о подходах и методах получения результатов в теоретических и экспериментальных исследованиях.	Применяет фундаментальные знания законов физики конденсированного состояния при решении элементарных задач. Не может выбрать необходимый метод исследования свойств материалов. Выполняет базовые исследования и материалов в коллективе под руководством. Понимает необходимость учета размерных эффектов свойств материалов.	Применяет знания о подходах и методах получения результатов в теоретических и экспериментальных исследованиях, не допуская существенных неточностей. Использует в исследованиях методы исследования и анализа свойств материалов. Выполнять комплексные исследования и испытания при изучении материалов под руководством. Использует на практике современные представления о влиянии структуры на свойства материалов различной природы, их взаимодействии с окружающей средой	Применяет знания о подходах и методах получения результатов в теоретических и экспериментальных исследованиях. Использует в исследованиях методы исследования и анализа свойств материалов. Самостоятельно выполняет комплексные исследования и испытания при изучении материалов и изделий. Использует на практике современные представления о влиянии структуры на свойства материалов различной природы, их взаимодействии с окружающей средой, полями и излучениями.

<i>Индикатор:</i> ИД-3 ОПК-1. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Слабо владеет физическими методами исследования и анализа свойств материалов, физических процессах, протекающих в них при обработке и модификации	Владеет некоторыми физическими методами исследования и анализа свойств материалов, но может работать только в коллективе под руководством.	Под руководством использует методы исследования и анализа свойств материалов при комплексных исследованиях. Имеет навыки практической оценки размерных эффектов некоторых свойств материалов	Владеет физическими методами исследования и анализа свойств материалов, может выполнять исследования самостоятельно. Имеет навыки практической оценки размерных эффектов некоторых свойств материалов, их взаимодействия с окружающей средой, полями и излучениями
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	Студент имеет фрагментарные знания основного материала, допускает грубые ошибки в формулировках, отсутствует последовательность в изложении программного материала.	Студент имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.	Студент твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос,	Студент глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, использует в ответе материал

				монографической литературы, правильно обосновывает принятое решение.
<i>Индикатор:</i> ИД-2 ОПК-3. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Неуверенность и большие затруднения при выполнении практических заданий	Студент испытывает затруднения при выполнении практических заданий, неверно использует способы и методы	Студент правильно применяет теоретические положения при решении практических заданий,	Студент умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕРКИ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ

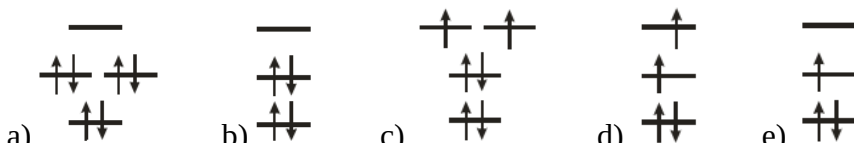
Номер задания	Правильный ответ	Содержание вопроса	Компетенция
1.	a)	Какое из представленных ниже выражений определяет длину волны де Бройля λ для нерелятивистской частицы массой m, обладающей кинетической энергией ε? h – постоянная Планка a) $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}}$ b) $\lambda = \frac{h}{2m\varepsilon}$ 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

2. Описание шкалы оценивания

Текущее контрольное мероприятие считается сданным, если студент получил за него не менее 60% от установленного для этого контроля максимального балла. Балл, выставаемый студенту за текущее контрольное мероприятие, сданное студентом в установленные графиком контрольных мероприятий сроки, определяется следующим образом:

<i>Уровень выполнения контрольного задания</i>	<i>Балл (в % от максимального балла за контрольное задание)</i>
<i>Отличный</i>	<i>100</i>
<i>Хороший</i>	<i>80</i>
<i>Удовлетворительный</i>	<i>60</i>
<i>Неудовлетворительный</i>	<i>0</i>

Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация в форме зачета с оценкой

Процедура зачета (зачета с оценкой) как отдельное контрольное мероприятие не проводится, оценивание знаний обучающегося происходит по результатам текущего контроля.

Зачет выставляется по результатам работы в семестре, при сдаче всех контрольных точек, предусмотренных текущим контролем успеваемости. Оценка формируется, как средняя арифметическая оценок за текущие контрольные мероприятия.

3. 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.

**** в соответствии с результатами освоения дисциплины и видами заданий***