

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**
Квантовая химия

Код модуля
1161450(1)

Модуль
Современные 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	Домашняя работа	3
		Отчет по лабораторным работам	2

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 предъявление 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 Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам № 1 Отчет по лабораторным работам № 2 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 Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам № 1 Отчет по лабораторным работам № 2 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 Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам № 1 Отчет по лабораторным работам № 2 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 – 0.6		
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 – 0.4		
Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.6		
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 – 0.4		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>отчет по лабораторным работам 1</i>	1,6	30
<i>отчет по лабораторным работам 2</i>	1,14	50
<i>работа на занятиях</i>	1,15	20
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – 1		
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. 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

5.2.2. 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

5.2.3. Домашняя работа № 3

Примерный перечень тем

1. Моделирование химических реакций

Примерные задания

С помощью программы MOPAC рассчитать энергию начального состояния реакции SN2 замещения CH₃Cl+F⁻ (ккал/моль)

С помощью программы MOPAC рассчитать расстояние Cl-C в переходном состоянии реакции SN2 замещения CH₃Cl+F⁻ (ккал/моль)

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.4. Отчет по лабораторным работам № 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

5.2.5. Отчет по лабораторным работам № 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

5.3. 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.