

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

ХИМИКО-БИОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра химии

СОГЛАСОВАН

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель образовательной программы

И.о. декана химико-биологического

_____ профессор Саламов А.М.

факультета _____ М.К.Дакиева

« 22 » _____ мая _____ 2024 г.

« 23 » _____ мая _____ 2024 г.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

по дисциплине

«КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

Направление подготовки/специальность: 04.03.01 Химия

Уровень образования: бакалавриат

Фонд оценочных средств

разработала _____ Арчакова Р.Д., профессор, к.т.н.

Утвержден на заседании кафедры химии

протокол заседания № 10 от « 21 » мая 2024 г.

Зав. кафедрой _____ А.М.Саламов

Магас, 2024

1. ПЕРЕЧЕНЬ КОМПЕТЕНЦИЙ, ФОРМИРУЕМЫХ ДИСЦИПЛИНОЙ

Код компетенции	Наименование компетенции	Индикатор достижения компетенции	В результате освоения дисциплины обучающийся должен:
<i>Универсальные компетенции и индикаторы их достижения</i>			
УК-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие;	Знать: - понятие и классификация систем;
		УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи;	- структуру и закономерности функционирования систем; - особенности системного подхода в научном познании;
		УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов;	- понятие о системе, её целях, задачах и общих принципах; - основные технологии поиска и сбора информации;
		УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения;	- форматы представления информации в компьютере; - правила использования средств связи; - информационно-поисковые системы и базы данных; - технологию осуществления поиска информации;
		УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки.	- технологию систематизации полученной информации; - способы статистической обработки данных, представленных в различных измерительных шкалах и анализ полученных результатов; - виды и формы работы с педагогической и научной литературой; - требования к оформлению библиографии (списка литературы). Уметь: - работать с информацией, представленной в различной

			<p>форме;</p> <ul style="list-style-type: none"> - обрабатывать данные средствами стандартного программного обеспечения; - синтезировать информацию, представленную в различных источниках; - - выбирать источники информации, адекватные поставленным задачам и соответствующие научному мировоззрению; - осуществлять поиск информации; - интерпретировать и ранжировать информацию, требуемую для решения поставленной задачи. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - персональным компьютером и поисковыми сервисами; - методиками аналитико-синтетической обработки информации из различных информационно-поисковых систем (предметизация, аннотирование, реферирование).
Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения			
ПК-1	Способен проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты.	<p>ПК-1.1. Демонстрирует знания основных методов обработки химической информации и требований к отчетам и проектам; назначения наиболее распространенных средств автоматизации информационной деятельности; назначения и функции операционных систем;</p> <p>ПК-1.2. Использует современные методы для решения химических задач, работает с базами данных в компьютерных сетях; использует полученные знания для обработки химической информации и составления отчетов и проек-</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основные методов обработки химической информации и требований к отчетам и проектам; - назначения наиболее распространенных средств автоматизации информационной деятельности; - назначения и функции операционных систем. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - использовать современные методы для решения химических задач; - работать с базами данных в компьютерных сетях; - использовать полученные знания для обработки химической информации и составления отчетов и проектов; - использовать базовые знания в

		<p>тов; использует базовые знания в области естественных наук при решении задач химического профиля;</p> <p>ПК- 1.3. Владеет навыками использования приобретенных знаний и умений в практической деятельности и повседневной жизни; навыками эффективной организации индивидуального информационного пространства: эффективного применения информационных образовательных ресурсов в учебной деятельности, создания баз данных, применения методов математического моделирования для решения профессиональных задач; методами статистической обработки результатов экспериментальных исследований.</p>	<p>области естественных наук при решении задач химического профиля.</p> <p>Владеть:</p> <p>навыками использования приобретенных знаний и умений в практической деятельности и повседневной жизни; - навыками эффективной организации индивидуального информационного пространства: эффективного применения информационных образовательных ресурсов в учебной деятельности, создания баз данных, применения методов математического моделирования для решения профессиональных задач; - методами статистической обработки результатов экспериментальных исследований.</p>
--	--	---	---

2. ОЦЕНИВАНИЕ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАНИЙ

4-балльная шкала (уровень освоения)	Показатели	Критерии
Отлично (повышенный уровень)	1. Полнота выполнения практического задания; 2. Своевременность выполнения задания; 3. Последовательность и рациональность выполнения задания;	Студентом задание решено самостоятельно. При этом составлен правильный алгоритм решения задания, в логических рассуждениях, в выборе формул и решении нет ошибок, получен верный ответ, задание решено рациональным способом.
Хорошо (базовый уровень)	4. Самостоятельность решения; 5. и т.д.	Студентом задание решено с подсказкой преподавателя. При этом составлен правильный алгоритм решения задания, в логическом рассуждении и решении нет существенных ошибок; правильно сделан выбор формул для решения; есть объяснение решения, но задание решено

		нерациональным способом или допущено не более двух несущественных ошибок, получен верный ответ.
Удовлетворительно (пороговый уровень)		Студентом задание решено с подсказками преподавателя. При этом задание понято правильно, в логическом рассуждении нет существенных ошибок, но допущены существенные ошибки в выборе формул или в математических расчетах; задание решено не полностью или в общем виде.
Неудовлетворительно (уровень не сформирован)		Студентом задание не решено.

3. СООТВЕТСТВИЕ ИЗУЧАЕМЫХ РАЗДЕЛОВ, ИЗУЧАЕМЫХ РАЗДЕЛОВ, РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ И ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины)	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
1.	Становление квантовой механики и ее основные положения.	УК-1, ПК-1	собеседование контрольная работа
2.	Квантово-механическое описание одно-электронных атомов.	УК-1, ПК-1	собеседование контрольная работа
3.	Квантово-механическое описание много-электронных атомов.	УК-1, ПК-1	собеседование контрольная работа
4.	Квантовая теория образования химической связи и химических реакций.	УК-1, ПК-1	собеседование контрольная работа

5.	Квантово-механическое описание различных молекулярных и кристаллических систем.	УК-1, ПК-1	собеседование контрольная работа
----	---	------------	-------------------------------------

4. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Примерные вопросы для собеседования

Вариант 1

1. Основные этапы развития квантовой теории. Квантовая химия как основа современной химической науки.
2. Жесткий ротатор. Модель свободного электрона.
3. Решение уравнения Шредингера для точно решаемых задач.
4. Теория возмущений. Вариационная теорема.
5. Гелиоподобная задача. L-S связь. Определители Слетера.
6. Приближение Борна-Оппенгеймера. Подход Бейдера.
7. Уравнения метода ХФ. Базисные функции Слэтера и Гаусса. Метод МО ЛКАО
8. Корреляционные диаграммы двухатомных молекул. Активные формы кислорода.
9. МО малых многоатомных молекул (NH_3 , H_2O).
10. Диаграмма Уолша для молекулы метана. Расчет молекулы бутадиена-1,3 по методу Хюккеля.

Вариант 2

1. Основные направления развития квантовой химии. Методы компьютерной квантовой химии.
2. Энергетический спектр простейших систем: частицы в прямоугольном потенциальном ящике, гармонического осциллятора и жесткого ротатора.
3. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии. s- и p-орбитали. p-электронное приближение.
4. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридные орбиталии гибридизация.
5. Теория кристаллического поля.
6. Расщепление d- и f-уровней в полях различной симметрии.
5. Химическая связь в комплексных соединениях на основании локализованных орбиталей.
6. Атом водорода с точки зрения теории Бора.
7. Основные характеристики химической связи.
8. Методы исследования структурных свойств молекул и кристаллических соединений.
9. Поясните, что собой представляют конформации молекул и приведите примеры молекул с конформационной изомерией.
10. Каковы основные составляющие и основные типы межмолекулярных взаимодействий?

Вариант 3

1. Операторы квантовой механики. Постулаты квантовой механики.
2. Точно решаемые квантово-механические задачи.
3. Водородоподобный атом. Основы теории групп
4. Угловой момент. Приближенные методы квантовой механики.
5. Спектры и электронные оболочки атомов.
6. МО двухатомных и многоатомных молекул.
7. Метод валентных связей для двухатомных молекул.
8. Электронное строение сопряженных молекул.
9. Метод корреляционных диаграмм Уолша.
10. Концепция локализованных МО. Гибридизация.

Примеры заданий контрольных работ

Вариант 1

1. Каковы основные типы кристаллических решеток?
2. Каковы основные типы дефектов в реальных кристаллах?
3. Сформулируйте правила Гиллеспи- Найхольма.
4. Для частиц BF_3 , NH_3 , IF_3 , NH_4^+ , SeO_2 , –изобразите структурные формулы, определите число связывающих и неподеленных электронных пар, стерическое число и геометрию частиц.
5. Структуры внешнего и предвнешнего электронных слоев атомов элементов следующие: $3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$; $4s^2 4p^6 4d^5 5s^1$; $5s^2 5p^6 5d^4 6s^2$. Назовите эти элементы.
6. Фотон γ -излучения с энергией $1,024 \cdot 10^6$ эВ может образовать пару частиц: электрон и позитрон. Какова масса позитрона?
7. Вычислить энергию и массу, соответствующие фотону, характеризующемуся длиной волны 589 нм.
8. Покажите, какие орбитали и как участвуют в образовании связей в соединении $\text{K}(\text{NH}_3)$.

Вариант 2

1. Как вы считаете, справедливо ли утверждение: если в молекуле AB_n связи полярные, то и сама молекула будет полярной? Ответ подтвердите на примере следующих молекул: BeF_2 , BF_3 , CH_4 , NH_3 , SF_6 , H_2O , CO_2 и SO_2 .
2. По методу МО сравните кратность и энергию связей в ряду частиц: O_2^+ , O_2 , O , O_2^{2-} .
3. Сравните кратность, энергию связей и магнитные свойства частиц: CO^+ , CO^- и CO .
4. Определите геометрическое строение комплексных ионов.
5. Какого типа гибридные орбитали комплексообразователя участвуют в образовании связей с лигандами: $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ - диамагнитный; $[\text{PdCl}_4]^{2-}$ - диамагнитный; $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$; $[\text{AuCl}_4]^-$ - диамагнитный; $[\text{NiF}_4]^-$ - парамагнитный.
6. На основе теории кристаллического поля установите, будут ли диамагнитными или парамагнитными комплексы, в которых лиганды создают сильное поле: $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$; слабое поле: $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$.
7. Какую геометрическую форму имеет ион IO_3^- ?
8. Составьте схему образования частиц BF_4 и NH_4^+ . Укажите валентность и степень окисления атомов бора и азота.

Критерии оценки ответа студента при выполнении контрольной работы

Оценка	Требования к знаниям
отлично	приведены полные правильные решения, ответы грамотно аргументированы
хорошо	допущены незначительные погрешности при ответах на вопросы, аргументация была не полной
удовлетворительно	в ответах на некоторые вопросы допущены грубые ошибки, часть выводов не аргументирована или аргументирована неправильно
неудовлетворительно	ответы на 50 и более % вопросов ошибочны, большинство выводов не аргументированы или аргументированы неправильно

Примерные контрольные вопросы к экзамену

1. Вариационный принцип и решение уравнения Шредингера.
2. Приближение независимых частиц.
3. Метод самосогласованного поля.
4. Приближение центрального поля.
5. Атомные орбитали и их характеристики.
6. Антисимметричность электронной волновой функции.
7. Детерминант Слейтера.
8. Метод Хартри-Фока.
9. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.
10. Квантовохимическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока.
11. Электронные конфигурации атомов с точки зрения квантовой химии.
12. Приближение Борна-Оппенгеймера.
13. Метод Хартри-Фока для молекул.
14. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана.
15. Ограничения метода Хартри-Фока.
16. Электронная корреляция.
17. Метод конфигурационного взаимодействия.
18. Теорема Бриллюэна.
19. Теория возмущений.
20. Метод валентных связей.
21. Точность учета электронной корреляции.
22. Расчет энергии диссоциации химических связей.
23. Иерархия методов квантовой химии.
24. Неэмпирическая квантовая химия.
25. Типы аналитических базисных функций.
26. Номенклатура базисных наборов.
27. Минимальный базисный набор.
28. Расширенные базисные наборы.
29. Поляризационные и диффузные функции.

30. Атомные базисные наборы.
31. Базисные наборы Попла.
32. Роль базисных функций в описании свойств молекул.
33. Полуэмпирические методы: MINDO, AM1, PM3.
34. Разделение σ - и π -электронов. π -электронное приближение.
35. Метод Парризера-Попла-Парра.
36. Метод МО Хюккеля. Расширенный метод Хюккеля.
37. Расчеты свойств молекул.
38. Точность квантовохимических расчетов химических свойств молекул.
39. Орбитальная картина химической связи.
40. Конструктивная и деструктивная интерференция орбиталей.
41. Молекулярные орбитали и их симметричная классификация.
42. Электронные конфигурации двухатомных молекул.
43. Анализ заселенностей орбиталей по Милликену. Понятие о зарядах и порядках связей.
44. Пространственное распределение электронной плотности.
45. Деформационная электронная плотность.
46. Топологическая теория химической связи.
47. Электростатический аспект описания химической связи. Теорема Гельмана-Фейнмана.
48. Особенности распределения электронной плотности в двухатомных молекулах.
49. Локализация и гибридизация орбиталей.
50. Орбитальное и топологическое обоснование модели отталкивания электронных пар Гиллеспи. Строение многоатомных молекул.
51. Специфика описания химической связи в координационных соединениях.
52. Теория кристаллического поля.
53. Теория поля лигандов.
54. Комплексы сильного и слабого поля. Магнитные свойства комплексов.
55. Эффект Яна-Теллера.
56. Методы расчета энергии межмолекулярного взаимодействия.
57. Оценка ван-дер-ваальсовых атомных радиусов.
58. Специфические невалентные взаимодействия.
59. Водородная связь.
60. Молекулярные комплексы.
61. Квантовохимическое описание химических реакций в газовой фазе. Связь с химической термодинамикой и кинетикой.
62. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) химической реакции.
63. Путь химической реакции, координата реакции.
64. Переходное состояние или активированный комплекс.
65. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции.
66. Особые точки равновесных и переходных состояний.
67. Правило Вудворда-Хоффмана и его применение для оценки реакционной способности органических соединений.
68. Методы описания химических реакций: теория возмущений, метод координаты реакции, метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи.

Примеры экзаменационных билетов

Экзаменационный билет № 1

По дисциплине **«Квантовая химия»**

1. Вариационный принцип и решение уравнения Шредингера.
2. Минимальный базисный набор.
3. Правило Вудворда-Хоффмана и его применение для оценки реакционной способности органических соединений.

Билет рассмотрен и утвержден на заседании кафедры _____

Зав. кафедрой, профессор

А.М.Саламов

Экзаменационный билет № 2

По дисциплине «Коллоидная химия»

1. Приближение независимых частиц.
2. Расширенные базисные наборы.
3. Методы описания химических реакций: теория возмущений, метод координаты реакции, метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи.

Билет рассмотрен и утвержден на заседании кафедры _____

Зав. кафедрой, профессор

А.М.Саламов

Критерии оценки ответа на экзамене

4-балльная шкала (уровень освоения)	Показатели	Критерии
Отлично (повышенный уровень)	1. Полнота изложения теоретического материала; 2. Полнота и правильность решения практического задания; 3. Правильность и/или аргументированность изложения (последовательность действий);	Студентом дан полный, в логической последовательности развернутый ответ на поставленный вопрос, где он продемонстрировал знания предмета в полном объеме учебной программы, достаточно глубоко осмысливает дисциплину, самостоятельно, и исчерпывающе отвечает на дополнительные вопросы, приводит собственные примеры по проблематике поставленного вопроса, решил предложенные практические задания без ошибок.
Хорошо (базовый уровень)	4. Самостоятельность ответа; 5. Культура речи;	Студентом дан развернутый ответ на поставленный вопрос, где студент демонстрирует знания, приобретенные на

	б. и т.д.	лекционных и семинарских занятиях, а также полученные посредством изучения обязательных учебных материалов по курсу, дает аргументированные ответы, приводит примеры, в ответе присутствует свободное владение монологической речью, логичность и последовательность ответа. Однако допускается неточность в ответе. Решил предложенные практические задания с небольшими неточностями.
Удовлетворительно (пороговый уровень)		Студентом дан ответ, свидетельствующий в основном о знании процессов изучаемой дисциплины, отличающийся недостаточной глубиной и полнотой раскрытия темы, знанием основных вопросов теории, слабо сформированными навыками анализа явлений, процессов, недостаточным умением давать аргументированные ответы и приводить примеры, недостаточно свободным владением монологической речью, логичностью и последовательностью ответа. Допускается несколько ошибок в содержании ответа и решении практических заданий.
Неудовлетворительно (уровень не сформирован)		Студентом дан ответ, который содержит ряд серьезных неточностей, обнаруживающий незнание процессов изучаемой предметной области, отличающийся неглубоким раскрытием темы, незнанием основных вопросов теории, несформированными навыками анализа явлений, процессов, неумением давать аргументированные ответы, слабым владением монологической речью, отсутствием логичности и последовательности. Выводы поверхностны. Решение практических заданий не выполнено. Т.е студент не способен ответить на вопросы даже при дополнительных наводящих вопросах преподавателя.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Квантовая химия» направлена на формирование компетенций: УК-1, ПК-1.

Промежуточная аттестация предполагает экзамен.

Приступая к изучению дисциплины, необходимо в первую очередь ознакомиться с содержанием рабочей программы дисциплины (РПД).

Лекции имеют целью дать систематизированные основы научных знаний.

При изучении и проработке теоретического материала необходимо:

- повторить законспектированный на лекционном занятии материал и дополнить его с учетом рекомендованной по данной теме литературы;
- при самостоятельном изучении теоретической темы сделать конспект, используя рекомендованные в РПД литературные источники и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»
- при подготовке к промежуточной аттестации по модулю использовать материалы фонда оценочных средств.

Практические занятия проводятся с целью углубления и закрепления знаний, полученных на лекциях и в процессе самостоятельной работы над нормативными документами, учебной и научной литературой.

При подготовке к практическому занятию необходимо:

- изучить, повторить теоретический материал по заданной теме;
- при выполнении домашних расчетных заданий, изучить, повторить типовые задания, выполняемые в аудитории.

Рекомендации по работе с научной и учебной литературой

Работа с учебной и научной литературой является главной формой самостоятельной работы и необходима при подготовке к устному опросу на семинарских занятиях, к модульным контрольным работам, опросу, зачету. Она включает проработку лекционного материала – изучение рекомендованных источников и литературы по тематике лекций. Конспект лекции должен содержать реферативную запись основных вопросов лекции, предложенных преподавателем схем (при их демонстрации), основных источников и литературы по темам, выводы по каждому вопросу. Конспект должен быть выполнен в отдельной тетради по предмету. Он должен быть аккуратным, хорошо читаемым, не содержать не относящуюся к теме информацию или рисунки.

Конспекты научной литературы при самостоятельной подготовке к занятиям должны быть выполнены также аккуратно, содержать ответы на каждый поставленный в теме вопрос, иметь ссылку на источник информации с обязательным указанием автора, названия и года издания используемой научной литературы. Конспект может быть опорным (содержать лишь основные ключевые позиции), но при этом позволяющим дать полный ответ по вопросу, может быть подробным. Объем конспекта определяется самим обучающимся.

В процессе работы с учебной и научной литературой обучающийся может:

- делать записи по ходу чтения в виде простого или развернутого плана (создавать перечень основных вопросов, рассмотренных в источнике);
- составлять тезисы (цитирование наиболее важных мест статьи или монографии, короткое изложение основных мыслей автора);
- готовить аннотации (краткое обобщение основных вопросов работы);
- создавать конспекты (развернутые тезисы).