

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ  
ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ЛГПУ»)

Факультет естественных наук  
Кафедра химии и биохимии

УТВЕРЖДАЮ

Врио декана факультета  
естественных наук

М.В. Воронов  
«04» декабря 2013 г.



Приложение к рабочей программе учебной дисциплины

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ  
для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации  
обучающихся по дисциплине

Строение молекул и основы квантовой химии

По направлению подготовки 04.03.01 Химия  
Профиль подготовки Медицинская и фармацевтическая химия  
Квалификация выпускника бакалавр  
Форма обучения очная  
Курс 2

Разработчик  
доцент кафедры химии и биохимии  
ФГБОУ ВО «ЛГПУ»

Тихий А.А.  
Заведующий кафедрой  
химии и биохимии

 В.Д. Дяченко

Протокол  
от «04» декабря 2013 г. № 6

Луганск, 2013

## 1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### 1.1. Область применения

Фонд оценочных средств (ФОС) – неотъемлемая часть рабочей программы дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» и предназначен для контроля и оценки образовательных достижений студентов, освоивших программу дисциплины.

### 1.2. Цели и задачи фонда оценочных средств

Цель ФОС – установить соответствие уровня подготовки обучающегося требованиям ФГОС ВО бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 «Химия» (Медицинская и фармацевтическая химия), утвержденным приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 17 июля 2017 г. № 671 (с изменениями и дополнениями).

### 1.3. Перечень компетенций, формируемых в процессе освоения основной образовательной программы

Процесс освоения дисциплины направлен на овладение следующими компетенциями:

Код по ФГОС ВО	Индикатор достижения
Универсальные	
Общепрофессиональные	
ОПК-3 ОПК-4	ОПК-3.1 ОПК-3.2  ОПК-4.1 ОПК-4.2 ОПК-4.3
Профессиональные	

### 1.4. Этапы формирования компетенций и средства оценивания уровня их сформированности

Этапы формирования компетенций	Компетенции	Контрольно-оценочные средства / способ оценивания
Тема 1. Введение. Доказательство сложного строения атома. Понятия вещество, материя, атом, химический элемент, молекула. Атомные спектры. Виды спектров. Факты, подтверждающие	ОПК-3 ОПК-4	Устный опрос, работа на лабораторных занятиях, выполнение контрольной работы

наличие дискретных уровней энергии электронов. Квантовая модель атома Н. Бора.		
<b>Тема 2.</b> Волновые свойства электрона. Двойственная природа света. Закон взаимосвязи массы и энергии. Волны де Бройля. Корпускулярно-волновые свойства микрочастиц. Дуализм электрона. Принцип неопределенности Гейзенберга. Расчет минимальной энергии электрона. Сравнение с теорией Н. Бора. Уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Требования, предъявляемые к волновой функции.	ОПК-3 ОПК-4	Устный опрос, работа на лабораторных занятиях, выполнение контрольной работы
<b>Тема 3.</b> Частные случаи решения уравнения Шредингера. Решение уравнения Шредингера для одномерного потенциального ящика. Расчет вероятности нахождения частицы и ее энергии. Трехмерный потенциальный ящик. Квантовые числа. Вырожденные уровни энергии. Вращательный момент импульса. Одномерный ротатор.	ОПК-3 ОПК-4	Устный опрос, работа на лабораторных занятиях, выполнение контрольной работы
<b>Тема 4.</b> Периодический закон и Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Основные характеристики химической связи: длина, направленность, прочность. Валентные углы. Расчет средней энергии связи. Физические методы определения структуры молекул: электронография, рентгеноструктурный анализ, радиоспектроскопия. Современная формулировка периодического закона. Периодические изменения радиуса атома, энергии ионизации, сродства к электрону, электроотрицательности. Объяснение периодического закона с точки зрения строения атома. <i>s</i> , <i>p</i> , <i>d</i> , <i>f</i> -элементы. Научное значение периодического закона. Открытия новых элементов. Устойчивость элементов. История развития представлений о химической связи и валентности: гравитационная, электрохимическая, электровалентная, ковалентная.	ОПК-3 ОПК-4	Устный опрос, работа на лабораторных занятиях, выполнение контрольной работы
<b>Тема 5.</b> Основные типы химической связи. Энергия ионной связи, энергия кристаллической решетки. Поляризация и поляризуемость ионов. Квантово-химическое объяснение ковалентной	ОПК-3 ОПК-4	Устный опрос, работа на лабораторных занятиях, выполнение контрольной работы

связи. Метод валентных связей. Решение уравнения Шредингера с использованием приближенных функций. Ионная и ковалентная связь.		
<b>Тема 6.</b> Метод молекулярных орбиталей. Метод линейной комбинации атомных орбиталей. Выражение для волновых функций простейших молекул. Условия комбинирования АО с образованием МО. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие МО. Энергия МО. Порядок расположения МО по энергии. Электронные формулы и энергетические диаграммы гомонуклеарных и гетеронуклеарных молекул элементов первого и второго периодов. Диамагнетизм, парамагнетизм, порядок связи. Сравнение методов валентных связей и МО.	ОПК-3 ОПК-4	Устный опрос, работа на лабораторных занятиях, выполнение контрольной работы
<b>Тема 7.</b> Строение вещества в конденсированном состоянии. Особенности кристаллического состояния. Типы кристаллических решеток: атомные, молекулярные, ионные, металлические. Металлы и полупроводники. Собственная и примесная проводимость. Растворы электролитов: сольватация, гидратация, теплота гидратации, кристаллогидраты. Особенности наносостояния вещества. Агрегатное состояние. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь, силы Ван-дер-Ваальса.	ОПК-3 ОПК-4	Устный опрос, работа на лабораторных занятиях, выполнение контрольной работы
КСР	ОПК-3 ОПК-4	Устный опрос, работа на лабораторных занятиях, выполнение контрольной работы
Промежуточная аттестация	ОПК-3 ОПК-4	Экзамен

### 1.5. Описание показателей формирования компетенций

Код компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели)
	Универсальные
	Общепрофессиональные
ОПК-3 ОПК-4	<p><b>знать:</b> принципы образования молекулярных систем, роль представлений о строении вещества как теоретического фундамента современной химии;</p> <p><b>уметь:</b> Предложить способы и принципиальные схемы получения вещества с заранее заданными свойствами, предсказывать свойства</p>

	вещества исходя из его химического и структурного строения; <b>владеть:</b> основами квантово-химического описания свойств вещества, принципами использования теоретических и расчетных методов квантовой химии для решения практических задач.
<b>Профессиональные</b>	

### 1.6. Критерии оценивания компетенций на разных этапах их формирования

Вид текущей учебной работы	Количество баллов
<b>2 семестр</b>	
Ответы на практических занятиях	50
КСР	10
Экзамен	40
<b>Итого за семестр:</b>	<b>100</b>

### Накопительная система оценивания по 100-балльной шкале

Четырехбалльная система оценивания экзамена	100-балльная шкала	Буквенная шкала, соответствующая 100-балльной шкале	Система оценивания зачета
Отлично	90–100	<b>А</b> – отлично – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному	Зачтено
Хорошо	83–89	<b>В</b> – очень хорошо – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения большинства из них оценено числом баллов, близким к максимальному	
Хорошо	75–82	<b>С</b> – хорошо – теоретическое содержание курса освоено полностью; некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения ни одного из них не оценено минимальным числом баллов, некоторые виды заданий выполнены с ошибками	
Удовлетворительно	63–74	<b>Д</b> – удовлетворительно – теоретическое содержание дисциплины освоено частично, но	

		пробелы не носят существенного характера; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы; большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий выполнено, некоторые из выполненных заданий, содержат ошибки	
Удовлетворительно	<b>50–62</b>	<b>Е</b> – посредственно – теоретическое содержание курса освоено частично; некоторые практические навыки работы не сформированы, многие предусмотренные программой обучения учебные задания не выполнены либо качество выполнения некоторых из них оценено числом баллов, близким к минимальному	
Неудовлетворительно	<b>21–49</b>	<b>FX</b> – неудовлетворительно – теоретическое содержание курса освоено частично; необходимые практические навыки работы не сформированы; большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий не выполнено либо качество их выполнения оценено числом баллов, близким к минимальному; при дополнительной самостоятельной работе над материалом курса возможно повышение качества выполнения учебных заданий	Не зачтено
Неудовлетворительно	<b>0–20</b>	<b>F</b> – неудовлетворительно – теоретическое содержание курса не освоено; необходимые практические навыки работы не сформированы; все выполненные учебные задания содержат грубые ошибки, дополнительная самостоятельная работа над материалом курса не приведет к какому-либо значимому повышению качества выполнения учебных заданий	

## **2. Контрольно-оценочные средства**

### **2.1 Оценочные средства текущего контроля (типовые)**

#### **Вопросы для устного опроса**

1. Что такое квантовая химия?
2. Что такое атомная орбиталь?
3. Что такое молекулярная орбиталь?
4. Почему электроны не падают на ядро атома?
5. Что такое квантовые числа и как они характеризуют электроны в атоме?
6. Опишите модель атома Бора и ее ограничения.
7. Объясните принцип суперпозиции в квантовой механике и его значение для описания квантовых систем.
8. Что такое туннельный эффект и как он проявляется в квантовых явлениях?
9. Что такое волна де Бройля?
10. Объясните концепцию квантовой делокализации электронов и ее значение для описания химических связей.
11. Как квантовая механика описывает процессы поглощения и испускания света атомами и молекулами?
12. В чём суть приближения Борна-Оппенгеймера?
13. Что такое теория функционала плотности (DFT) и в каких случаях она применяется?
14. Каковы основные методы квантово-химического расчета и их применение в исследованиях?
15. Что описывают определители Слейтера?
16. Каковы основные типы функционалов, используемых в теории функционала плотности?
17. Объясните разницу между молекулярными орбиталями и атомными орбиталями.
18. Каковы основные проблемы и ограничения квантово-химических методов при моделировании больших систем (например, белков, наноструктур)?
19. Что такое набор базисных функций?
20. Какие наборы базисных функций для разложения МО вы знаете?

#### **Задачи для письменной самостоятельной контрольной работы:**

##### **Образец заданий к контрольной работе.**

1. Квантовая химия изучает:
  - а. Качественный и количественный анализ веществ;
  - б. Взаимное превращение одного вида энергии в другой;

- в. Химические процессы на основе физических законов;
  - г. Поверхностные явления на разделе фаз;
  - д. Строение вещества на основе математики и других наук.
2. В теории химического строения вещества коллективное взаимодействие можно рассматривать как образование
- а. Всевозможных связей между атомами;
  - б. Парных связей между атомами;
  - в. «Связанных» и «несвязанных» атомов.
3. Теория строения вещества объясняет, что
- а. Все взаимодействия между атомами являются главными («сильными»);
  - б. Часть взаимодействий между атомами являются главными («сильными»), часть взаимодействий между атомами слабыми;
  - в. Невозможно определить наличие главных и слабых связей между атомами.
4. В теории строения вещества представлена взаимосвязь между строением вещества и его свойствами как
- а. функция парциальных свойств только эффективных атомов и химических связей;
  - б. функция парциальных свойств химических связей и пар несвязанных атомов;
5. Синхотронное излучение имеет природу
- а. светового луча;
  - б. электрического поля;
  - в. электромагнитного поля.
6. Постулаты Бора характеризуют атом в
- а. неустойчивом состоянии;
  - б. переходном состоянии;
  - в. стационарном состоянии.
7. Гипотеза Ле де Бройля объясняет, что электрон способен
- а. дифрагировать подобно волнам сохраняя свои свойства;
  - б. дифрагировать подобно волнам не сохраняя свои свойства.
8. Выберите формулу, которая характеризует монохроматическое излучение атома при переходе из одного стационарного состояния в другое.
- а.  $E_2 h \omega = E_1 + E_2$ ;
  - б.  $h \omega = E_1$ ;
  - в.  $h \omega = E_2 - E_1$ .
9. Волновая функция характеризуется
- а. как комплексная величина;
  - б. как величина не зависящая от времени;
  - в. как величина, обладающая свойством дискретности.
10. Уравнение  $\int |\psi|^2 dV = 1$  означает, что
- а. частица располагается только в области определенного пространства;



- б. частица может находиться во всякой точке внутри и вне пространства;
  - в. интеграл взятый для частицы на границе пространства равен 1;
  - г. интеграл взятый для частицы на границе пространства равен 0.
11. Выберите уравнение, которое означает, что волновая функция это сопряженная функция.
- а.  $\psi(x, y, z)^2$ ;
  - б.  $\psi = \psi(x, y, z, t)$ ;
  - в.  $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ ;
  - г.  $\int |\psi|^2 dV = 1$ .
11. Возникновение волнового пакета
- а. не зависит от изменения величины волновой функции;
  - б. зависит от резкого понижения волновой функции;
  - в. зависит от резкого возрастания волновой функции.

### Темы для рефератов:

1. Ядерная модель строения атома. Электронное строение атома.
2. Гипотеза Ле де Бройля. Волновая функция.
3. Гибридизация. Вид Бр-гибридных орбиталей.
4. Гармонический осциллятор. Бозоны, фермионы.
5. Силы в молекулах и химическая связь.
6. Характеристика МО. Молекулярные термы. Сравнение методов ВС и МО.
7. Квантовая теория химических реакций.

## 2.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации

### Экзамен

1. Квантовая химия как наука, положение в системе знаний. Методы изучения строения вещества.
2. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии. Место квантовой механики среди других наук о движении.
3. Основные этапы развития квантовой теории и теории строения вещества.
4. Модели строения атомов Томсона и Резерфорда: сущность, недостатки.
5. Модель атома Н.Бора. Развитие представлений о строении атома.
6. Современная модель строения атома. Квантовые числа.
7. Атомные термы.
8. Принципы заполнения атомных орбиталей.
9. Корпускулярно-волновой дуализм.
10. Основные постулаты квантовой механики.
11. Принцип неопределенности Гезенберга.

12. Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций.
13. Стационарное уравнение Шредингера.
14. Свободное одномерное движение частицы.
15. Задача об атоме водорода. Разделение переменных.
16. Решение уравнения Шредингера для одномерного потенциального ящика.
17. Приближенные методы решения квантово-механических задач.
18. Приближение независимых частиц.
19. Метод самосогласованного поля.
20. Приближение центрального поля.
21. Атомные орбитали и их характеристики.
22. Антисимметричность электронной волновой функции.
23. Детерминант Слейтера.
24. Метод Хартри-Фока.
25. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.
26. Квантовохимическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока.
27. Электронные конфигурации атомов с точки зрения квантовой химии.
28. Приближение Борна-Оппенгеймера.
29. Метод Хартри-Фока для молекул.
30. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана.
31. Ограничения метода Хартри-Фока.
32. Электронная корреляция.
33. Метод конфигурационного взаимодействия.
34. Теорема Бриллюэна.
35. Теория возмущений.
36. Метод валентных связей.
37. Точность учета электронной корреляции.
38. Расчет энергии диссоциации химических связей.
39. Иерархия методов квантовой химии.
40. Типы химических связей, их характеристика.
41. Основные свойства химической связи (длина, энергия, направленность и т.д.).
42. Номенклатура базисных наборов.
43. Минимальный базисный набор.
44. Расширенные базисные наборы.
45. Поляризационные и диффузные функции.
46. Атомные базисные наборы.
47. Базисные наборы Попла.
48. Роль базисных функций в описании свойств молекул.
49. Полуэмпирические методы: MINDO, AM1, PM3.
50. Расчеты свойств молекул.
51. Орбитальная картина химической связи.
52. Конструктивная и деструктивная интерференция орбиталей.
53. Молекулярные орбитали и их симметричная классификация.

54. Электронные конфигурации двухатомных молекул.
55. Локализация и гибридизация орбиталей.
56. Орбитальное и топологическое обоснование модели отталкивания электронных пар Гиллеспи. Строение многоатомных молекул.
57. Современная формулировка периодического закона. Периодические изменения радиуса атома, энергии ионизации, сродства к электрону, электроотрицательности.
58. Объяснение периодического закона с точки зрения строения атома. s, p, d, f-элементы. Научное значение периодического закона. Открытия новых элементов. Устойчивость элементов.
59. Межмолекулярные взаимодействия: ориентационное, индукционное, дисперсионное.
60. Внутри- и межмолекулярная водородная связь.
61. Аморфные и кристаллические тела. Основные типы кристаллических решеток.
62. Особенности кристаллического состояния вещества.
63. Растворы электролитов: сольватация, гидратация, теплота гидратации, кристаллогидраты.
64. Особенности наносостояния вещества.
65. Зонная теория твердого тела. Проводники, диэлектрики, полупроводники.
66. Металлы и сплавы. Металлическое состояние и его особенности.
67. Электронные формулы и энергетические диаграммы гомонуклеарных и гетеронуклеарных молекул элементов первого и второго периодов.
68. Диамагнетизм, парамагнетизм, порядок связи.
69. Связь строения атома и свойств элемента с положением в Периодической таблице элементов Д.И. Менделеева.
70. Типы гибридизации. Примеры.