

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Кузбасский государственный технический университет имени Т. Ф. Горбачева»**

Институт химических и нефтегазовых технологий

**ПОДПИСАНО ЭП КУЗГТУ**

Институт химических и нефтегазовых  
технологий  
Директор

Дата: 25.11.2022 12:11:00

**В.В. Тихонов**

**Фонд оценочных средств дисциплины**

**Архитектура химических соединений и молекулярный дизайн**

Направление подготовки 18.03.01 Химическая технология  
Направленность (профиль) Химическая технология органических веществ

Присваиваемая квалификация  
"Бакалавр"

Формы обучения  
очная

## 1 Паспорт фонда оценочных средств

| Формы текущего контроля   | Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины | Индикатор(ы) достижения компетенции   | Результаты обучения по дисциплине (модулю)   | Уровень             |
|---|---|---|--|---------------------|
| Устный опрос, отчеты по практическим работам, тест  | УК-1  | Использует знание физических законов для решения поставленных задач. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи. Рассматривает возможные варианты решения задачи, оценивая их достоинства и недостатки. Использует знание химии простых веществ и соединений для решения поставленных задач. | <b>знать:</b> основные законы механики, молекулярной физики и термодинамики, электростатики и электромагнетизма, волновой и квантовой оптики, ядерной физики и элементарных частиц; физический смысл и математическое изображение основных физических законов; основные понятия и теоремы математики; основные законы химической термодинамики и кинетики, свойства растворов, теорию электролитической диссоциации, окислительно-восстановительные, электрохимические процессы и химические свойства элементов периодической системы; <b>уметь:</b> самостоятельно анализировать физические явления, происходящие в природе и различных устройствах; самостоятельно работать со справочной литературой; выполнять необходимые расчеты и определять параметры процессов; работать со справочной литературой; применять полученные знания в области математики для решения поставленных задач; самостоятельно анализировать химические процессы, составлять уравнения реакций, выполнять необходимые расчеты, пользоваться справочной литературой; <b>владеть:</b> современными методами решения физических задач и измерения параметров различных процессов в технических устройствах и системах; основными техниками математических расчетов; основными приемами проведения физико-химических измерений; способностью находить оптимальный подход к решению химических задач. | Высокий или средний |
| <p><b>Высокий уровень достижения компетенции</b> - компетенция сформирована частично, рекомендованные оценки: отлично, хорошо, зачтено.</p> <p><b>Средний уровень достижения компетенции</b> - компетенция сформирована частично, рекомендованные оценки: хорошо, удовлетворительно, зачтено.</p> <p><b>Низкий уровень достижения компетенции</b> - компетенция не сформирована частично, оценивается неудовлетворительно или не зачтено.</p> |   |   |  |                     |

## 2. Типовые контрольные задания или иные материалы

Текущий контроль успеваемости и аттестационные испытания обучающихся могут быть организованы с использованием ресурсов ЭИОС КузГТУ.

### 5.2.1. Оценочные средства при текущем контроле

Текущий контроль обучающихся проводится в виде устного опроса или тестирования на 5, 9, 13 и 17-й неделе учебного семестра.

## Примерные вопросы к проверке усвоения дисциплины «Архитектура химических соединений и молекулярный дизайн»

### Опрос 1

1. Способы изображения молекулярных структур.
2. Понятие органического синтеза.
3. Краткая история развития органического синтеза.
4. Цели органического синтеза.
5. Задачи органического синтеза
6. Тактика органического синтеза.
7. Организация синтетических схем.
8. Особенности структуры целевых соединений, определяющие стратегию синтеза.
9. Ретросинтетический анализ.

### Опрос 2

10. Роль планирования в синтезе.
11. Варианты планирования синтеза.
12. Термодинамический контроль в органическом синтезе.
13. Кинетический контроль в органическом синтезе.
14. Селективность органических реакций.
15. Как управлять селективностью?
16. Хемоселективность, регио- и стереоселективность.
17. Правила составления схемы синтеза.

### Опрос 3

18. Понятие молекулярный дизайн.
19. Структурно-ориентированный дизайн.
20. Кубан, его строение, свойства, производные. Перспективы применения производных кубана.
21. Додекаэдр, его строение, свойства, история дизайна, схема дизайна.
22. Функционально-ориентированный дизайн.
23. Краун-эфиры: строение, свойства, перспективы применения.
24. Комплексоны, их применение.

### Опрос 4

25. Общие приемы работы с программой ChemDraw.
26. Возможности программы Chem3D Ultra.
27. Создание и анализ геометрии трехмерных моделей молекул в среде Chem3D Ultra.
28. Эмпирические методы расчета физических и термодинамических свойств химических соединений.
29. Квантово-химические методы расчета физико-химических свойств соединений.
30. Алгоритм расчета физических и термодинамических свойств соединений с помощью программы Chem3D Ultra.
31. Минимизация энергии и оптимизация геометрии молекулярной структуры.
32. Алгоритм расчета распределения частичных зарядов на атомах в программе Chem3D Ultra.
33. Способы визуализации распределения зарядов в молекуле в Chem3D.

Знания, умения, навыки обучающегося оцениваются по 100-й бальной шкале. **Критерии оценивания:**

90-100 баллов ставится, если студент: 1) полно и аргументированно отвечает по содержанию вопроса; 2) обнаруживает понимание материала, может обосновать свои суждения, применить знания на практике, привести необходимые примеры не только по учебнику, но и самостоятельно составленные; 3) излагает материал последовательно и правильно.

75-89 баллов ставится, если студент дает ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, что и для 90-100 баллов, но допускает 1-2 ошибки, которые сам же исправляет.

50-74 баллов ставится, если студент обнаруживает знание и понимание основных положений данного вопроса, но: 1) излагает материал неполно и допускает неточности в определении понятий; 2) не умеет достаточно глубоко и доказательно обосновать свои суждения и привести свои примеры; 3) излагает материал непоследовательно и допускает ошибки.

0-49 баллов ставится, если студент обнаруживает незнание ответа на вопросы, допускает ошибки в формулировке определений и правил, искажающие их смысл, беспорядочно и неуверенно излагает материал.

|                   |          |        |        |         |
|-------------------|----------|--------|--------|---------|
| Количество баллов | 0-49     | 50-74  | 75-89  | 90-100  |
| Шкала оценивания  | Неудовл. | Удовл. | Хорошо | Отлично |

### **Отчеты по практическим работам.**

По каждой работе обучающиеся самостоятельно оформляют отчеты (согласно перечню практических работ п. 4 рабочей программы).

Содержание отчета:

1. Тема работы.
2. Задачи работы.
3. Краткое описание хода выполнения работы.
4. Ответы на задания или полученные результаты по окончании выполнения работы (в зависимости от задач, поставленных в п. 2).
5. Выводы

### **Критерии оценивания:**

- 75 - 100 баллов - при раскрытии всех разделов в полном объеме;

- 0 - 74 баллов - при раскрытии не всех разделов, либо при оформлении разделов в неполном объеме.

|                   |            |         |
|-------------------|------------|---------|
| Количество баллов | 0-74       | 75-100  |
| Шкала оценивания  | Не зачтено | Зачтено |

## **2.2 Оценочные средства при промежуточной аттестации**

Формой промежуточной аттестации является зачет, в процессе которого определяется сформированность обозначенных в рабочей программе компетенций. Инструментом измерения сформированности компетенций являются:

- зачетные отчеты обучающихся по практическим работам;
- ответы обучающихся на вопросы во время опроса.

К зачету допускаются студенты, выполнившие учебный план и получившие по каждой из четырех текущих аттестаций оценку не ниже 60 баллов.

При проведении промежуточного контроля обучающийся отвечает на 2 вопроса выбранных случайным образом, тестировании т.п. в соответствии с рабочей программой. Опрос может проводиться в письменной и (или) устной, и (или) электронной форме.

### **Перечень вопросов к зачету (промежуточной аттестации)**

1. Понятие молекулярный дизайн.
2. Структурно-ориентированный дизайн.
3. Кубан, его строение, свойства, производные. Перспективы применения производных кубана.
4. Додекаэдран, его строение, свойства, история дизайна, схема дизайна.
5. Функционально-ориентированный дизайн.
6. Фуллерены, открытие и дизайн.
7. Бакибол, его строение, свойства.
8. Древовидные молекулы. Дизайн дендримеров.
9. Соединения с «топологической связью»: катенаны, ротаксаны.
10. Краун-эфиры: строение, свойства, перспективы применения.
11. Комплексоны, их применение.
12. Цели и задачи органического синтеза.
13. Понятие стратегии органического синтеза.
14. Что означает тактика органического синтеза?
15. Общие принципы планирования органического синтеза.
16. Планирование синтеза по литературным данным, по аналогии и "нестандартного".
17. Разбор путей получения некоторых сложных соединений.
18. Кинетический контроль в органическом синтезе.
19. Термодинамический контроль в органическом синтезе.
20. Выбор оптимального пути синтеза органического соединения.
21. Решение проблем селективности в органическом синтезе.
22. Хемоселективность (функциональная селективность), регио- и стереоселективность.
23. Способы изображения молекулярных структур органических соединений.
24. Общие приемы работы с программой ChemDraw.
25. Визуализация плоских молекулярных структур с использованием программы ChemDraw пакета

- ChemOffice.
26. Визуализация пространственных молекулярных структур с использованием программы Chem3D Ultra пакета ChemOffice.
  27. Алгоритм анализа геометрии трёхмерных моделей молекул в среде Chem 3D Ultra.
  28. Анализ геометрии трехмерных моделей молекул в среде Chem3D Ultra.
  29. Эмпирические методы расчета физических и термодинамических свойств химических соединений.
  30. Квантово-химические методы расчета физико-химических свойств соединений.
  31. Полуэмпирические методы квантово-химических расчетов.
  32. Алгоритм расчета термодинамических свойств химических соединений.
  33. Минимизация энергии и оптимизация геометрии молекулярной структуры.
  34. Определение физических и термодинамических свойств соединений на основании их химического строения с использованием программы Chem3D Ultra.
  35. Алгоритм построения распределения частичных зарядов на атомах соединений в программе Chem3D Ultra.

**Критерии оценивания ответов:**

- 100 баллов - при полном и правильном ответе на два вопроса;
- 80...99 баллов - при правильном и полном ответе на один из вопросов и правильном, но не полном ответе на другой из вопросов;
- 60...79 баллов - при правильном и неполном ответе на два вопроса или при правильном и полном ответе только на один вопрос;
- 40...59 баллов - при правильном и неполном ответе только на один из вопросов;
- 0...39 баллов - при отсутствии ответов или правильных ответов на вопросы.

|                   |         |       |       |       |     |
|-------------------|---------|-------|-------|-------|-----|
| Количество баллов | 0-39    | 40-59 | 60-79 | 80-99 | 100 |
| Шкала оценивания  | незачет |       | зачет |       |     |

**Тестирование**

Тестирование может быть организовано с использованием ресурсов ЭИОС КузГТУ.

**Примеры тестовых заданий:**

1. Последовательная разборка целевой структуры молекулы на более простые предшественники, ведущая в конечном итоге к доступным исходным соединениям, которые можно использовать для химического синтеза, называется
  - синтетический метод;
  - ретросинтетический анализ;
  - органический анализ;
  - трансформационное превращение;
2. Реакция, в которой реагент атакует преимущественно одно из нескольких реакционноспособных положений молекулы исходного соединения, называется
  - стереоселективной;
  - региоселективной;
  - хемоселективной;
3. Как влияет на селективность реакций введение защитных групп в молекулу субстрата?
  - повышает;
  - не изменяет;
  - снижает;
4. Макроциклические соединения, состоящие из двух или более циклов, содержащих гетероатомы, соединенные между собой этиленовыми мостиками, называются
  - криптанды;
  - краун-эфир;
  - поданды;
5. Какие соединения называют ациклическими аналогами краун-эфиров?
  - криптанды;
  - коронанды;
  - поданды;
  - дендримеры;
6. Полиэдрические кластеры углерода получили название
  - дендримеры;
  - фуллерены;
  - карбораны;

Тест состоит из 15 вопросов и рассчитан на 15 минут.

**Критерии оценивания:**

- 100 баллов - при правильном ответе на все вопросы;
- 85...99 баллов - при правильном ответе на 12-14 вопросов;
- 60...84 балла - при правильном ответе на 10-12 вопросов;
- 30...59 баллов - при правильном ответе на 6-9 вопросов;
- 0...29 баллов - при отсутствии правильных ответов на вопросы или до 5 правильных ответов.

|                   |         |       |       |       |     |
|-------------------|---------|-------|-------|-------|-----|
| Количество баллов | 0-29    | 30-59 | 60-84 | 85-99 | 100 |
| Шкала оценивания  | незачет | зачет |       |       |     |

**5.2.3. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций**

1. При проведении текущего контроля теоретических знаний по темам дисциплины преподаватель задает студенту два вопроса. В течение пяти минут обучающийся должен дать ответы на заданные вопросы, при этом использовать любую печатную продукцию или технические средства не допускается. Результаты оценивания ответов на вопросы доводятся до сведения обучающихся не позднее трех учебных дней после даты проведения опроса. Если студент во время опроса воспользовался печатной продукцией или техническими средствами, то его ответы на вопросы не принимаются и ему выставляется 0 баллов. Текущий контроль на практических занятиях осуществляется путем сдачи и защиты отчетов по практическим работам. Преподаватель анализирует содержание отчета, после чего оценивает достигнутый результат. Научно-педагогический работник, после проведения оценочных процедур, имеет право вернуть обучающемуся отчет для последующей корректировки с указанием перечня несоответствий. Обучающийся обязан устранить все указанные несоответствия и направить отчет научно-педагогическому работнику в срок, не превышающий трех учебных дней, следующих за днем проведения текущего контроля успеваемости. Для защиты отчета студенту необходимо устно ответить на вопросы по теме практической работы, которые приведены в соответствующих методических указаниях. Обучающиеся, которые не прошли текущий контроль успеваемости в установленные сроки, обязаны пройти его в срок до начала процедуры промежуточной аттестации по дисциплине в соответствии с расписанием промежуточной аттестации. Результаты прохождения процедур текущего контроля успеваемости обучающихся учитываются при оценивании результатов промежуточной аттестации обучающихся.

2. Промежуточная аттестация обучающихся проводится после завершения обучения по дисциплине в семестре в соответствии с календарным учебным графиком и расписанием промежуточной аттестации. Для успешного прохождения процедуры промежуточной аттестации по дисциплине обучающиеся должны:

1. получить положительные результаты по всем предусмотренным рабочей программой формам текущего контроля успеваемости;
2. получить положительные результаты аттестационного испытания. Для успешного прохождения аттестационного испытания обучающийся в течение времени, установленного научно-педагогическим работником, осуществляет подготовку ответов на два вопроса, выбранных в случайном порядке. Для подготовки ответов используется чистый лист бумаги и ручка. На листе бумаги обучающиеся указывают свои фамилию, имя, отчество (при наличии), номер учебной группы и дату проведения аттестационного испытания. При подготовке ответов на вопросы обучающимся запрещается использование любых электронных и печатных источников информации. По истечении указанного времени, листы с подготовленными ответами на вопросы обучающиеся передают научно-педагогическому работнику для последующего оценивания результатов промежуточной аттестации. В случае обнаружения научно-педагогическим работником факта использования обучающимся при подготовке ответов на вопросы указанные источники информации - оценка результатов промежуточной аттестации соответствует 0 баллов и назначается дата повторного прохождения аттестационного испытания. Результаты промежуточной аттестации обучающихся размещаются в ЭИОС КузГТУ.

Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация обучающихся могут быть организованы с использованием ЭИОС КузГТУ, порядок и формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся при этом не меняется.