

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ряполов Петр Алексеевич

Должность: декан ЕНФ

Дата подписания: 08.09.2023 16:53:24

Уникальный программный ключ:

efd3ecdbd183f7649d0e3a33c230c6662946c7c99039b2b268921fde408c1fb6

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Квантовая химия»

Цель преподавания дисциплины:

фундаментальная подготовка дипломированных специалистов в области квантовой химии, современных методов исследования структуры органических жидкостей и материалов, которые являются основой в формировании химических и физических свойств технически важных материалов.

Задачи изучения учебной дисциплины:

Должен знать законы, объекты и процессы природы, включая макроскопические и микроскопические объекты; о перспективных технических системах и о физических принципах их функционирования; о стандартных базовых моделях в области квантовой химии: строение молекул и конденсированном веществе в процессе приближения к состоянию равновесия; веществе и поле в тепловом равновесии как системе квазичастиц; веществе в тепловом равновесии во внешнем поле

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

ПК-1 Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований по синтезу и анализу органических соединений

ПК-1.2 Осуществляет сбор, обработку, анализ и обобщение передового отечественного и международного опыта в области исследования органических соединений

ПК-1.3 Осуществляет сбор, обработку, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований синтеза органических соединений, а также изучения их структуры и реакционной способности

Разделы дисциплины:

- квантовая химия и квантовая механика;
- гармонический осциллятор;
- адиабатическое приближение. Одноэлектронное приближение;
- одноэлектронное приближение,
- метод Хартри-Фока Роотхана;
- расширенный метод Хюккеля;
- неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц;
- метод конфигурационного взаимодействия.

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан естественно-научного
факультета

(наименование факультета полностью)



П.А. Ряполов

(подпись, инициалы, фамилия)

« 30 » 08 20 19 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовая химия

(наименование дисциплины)

ОПОП ВО

04.03.01

«Химия»

шифр и наименование направления подготовки (специальности)

направленность (профиль, специализация) «Органическая и биоор-
ганическая химия»

Наименование направленности (профиля, специализации)

форма обучения

очная

(очная, очно-заочная, заочная)


Курск – 2019

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с ФГОС ВО – бакалавриат по направлению подготовки (специальности) 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета (протокол № 7 от «29» марта 2019 г.).

Рабочая программа дисциплины обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе для обучения студентов по ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия» на заседании кафедры Нанотехнологий, общей и прикладной физики 31.08.2019 г., протокол № 1
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____  А.Е. Кузько

Разработчик программы

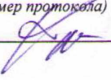
_____  ст.преподаватель Сучилкин В.В.
(ученая степень и ученое звание, Ф.И.О.)


Согласовано: на заседании кафедры ФХ и ХТ

И.о. зав. кафедрой к.х.н., доцент _____  Н.В. Кувардин

« ____ » _____ 20 ____ г, протокол № ____ .
(название кафедры, дата, номер протокола, подпись заведующего кафедрой; согласование производится с кафедрами, чьи дисциплины охватываются на данной дисциплине, а также при необходимости руководителями других структурных подразделений)

• Директор научной библиотеки _____  Макаровская В.Г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол № 4 «25» 02 2022 г. на заседании кафедры _____  Кузько А.Е.
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол № ____ « ____ » _____ 20 ____ г. на заседании кафедры _____  Кузько А.Е.
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протоколом № 7 «98» 02 2017 г. на заседании кафедры ИМО и ИР ИТ З.А. Давыдова 90

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протоколом № « » 20 г. на заседании кафедры _____

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протоколом № « » 20 г. на заседании кафедры _____

Зав. кафедрой _____

• Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протоколом № « » 20 г. на заседании кафедры _____

Зав. кафедрой _____

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия , направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол № _____ « _____ » _____ 20_г. на заседании кафедры _____
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия , направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол № _____ « _____ » _____ 20_г. на заседании кафедры _____
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия , направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол № _____ « _____ » _____ 20_г. на заседании кафедры _____
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и рекомендована к применению в образовательном процессе на основании учебного плана направления подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия , направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол № _____ « _____ » _____ 20_г. на заседании кафедры _____
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____

1 Цель и задачи дисциплины. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

1.1 Цель дисциплины

Целью изучения дисциплины является фундаментальная подготовка дипломированных специалистов в области квантовой химии, современных методов исследования структуры органических жидкостей и материалов, которые являются основой в формировании химических и физических свойств технически важных материалов.

1.2 Задачи дисциплины

Основными задачами изучения дисциплины является теоретическое освоение важнейших фундаментальных представлений и понятий, касающихся квантовой природы материи и следствий из них, выработки у будущего специалиста комплекса навыков и знаний для использования их в последующей работе.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)		Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной	Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
код компетенции	наименование компетенции		
ПК-1	Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований по синтезу и анализу органических соединений	ПК-1.2 Проводит исследования научно-технической информации по методам получения и анализу органических соединений	Знать: методы планирования эксперимента методы построения моделей изучаемых объектов Уметь: планировать эксперимент на основе анализа литературных данных анализировать и обобщать результаты эксперимента, формулировать выводы Владеть или Иметь опыт деятельности): проведения эксперимента и методами обработки его результатов
		ПК-1.3 Осуществляет сбор, обработку, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований синтеза органических соединений, а также изучения их структуры и реакционной способности	Знать: Основные методы качественного (титрование, экстракция в сочетании с фотометрией, хроматография, УФ-спектрометрия, флуориметрия и другие.) и количественного анализа веществ. Уметь: использовать специализированное программное обеспечение для проведения теоретических расчетов и обработки экспериментальных данных, изображать структурные формулы сложных органических соединений с помощью различных структурно-графических химических редакторов пользоваться расчётными программами, программами анализа и визуализации результатов расчёта Владеть (или Иметь опыт деятельности): Приемами, методиками идентификации основного вещества смеси, определения органи-

Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)		Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной	Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
код компетенции	наименование компетенции		
			ческих или неорганических примесей в синтезируемых веществах, подтверждения структуры вещества или анализ сложной многокомпонентной смеси

2 Указание места дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы

Дисциплина «Квантовая химия» имеет индекс Б.1.В.10 части учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений направления подготовки 04.03.01 Химия, изучаемая в 5 семестре.

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 4 зачетных единиц (з.е.), 144 академических часов.

Таблица 3 –Объём дисциплины

Виды учебной работы	Всего, часов
Общая трудоемкость дисциплины	144
Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий (всего)	91,15
в том числе:	
лекции	54
лабораторные занятия	Не предусмотрено
практические занятия	36
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	16,85
Контроль (подготовка к экзамену)	36
Контактная работа по промежуточной аттестации (всего АттКР)	1,15
в том числе:	
зачет	не предусмотрен
зачет с оценкой	не предусмотрен
курсовая работа (проект)	не предусмотрена
экзамен (включая консультацию перед экзаменом)	1,15

4 Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Содержание дисциплины

Таблица 4.1.1 – Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Содержание
-------	--------------------------	------------

1	2	3
1	Введение	Квантовая химия и квантовая механика молекул как составные части квантовой теории вещества. Предмет, методы, цели и задачи квантовой химии. История и основные этапы становления и развития квантовой химии, ее современное состояние и достижения.
2	Квантово механическое рассмотрение атома водорода	Уравнение Шредингера в сферических координатах. Решения угловых и радиального уравнений. Квантовые числа атома водорода. Волновые функции атома водорода. Расчет различных свойств водородоподобных атомов.
3	Строение атома.	Водородоподобные атомы. Атомные орбитали водородоподобного атома. Спин электрона. Многоэлектронные атомы.
4	Гармонический осциллятор	Гармонический осциллятор, его собственные функции и собственные значения энергии. Трехмерный изотропный гармонический осциллятор. Ангармонический осциллятор
5	Общие принципы, касающиеся решения молекулярных задач.	Молекулярное уравнение Шредингера: стационарное, отделение переменных центра масс. Вращение молекулы как целого.
6	Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи	Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи и теория возмущений, разновидности гамильтониана. Выход за рамки адиабатического приближения. Электронное волновое уравнение (одноэлектронный подход)..
7	Одноэлектронное приближение	метод самосогласованного поля (одноконфигурационное приближение; уравнения Хартри-Фока, их разновидности, энергия и плотность). Метод самосогласованного поля и общие свойства орбиталей... Электронное волновое уравнение (одноэлектронный подход)..
8	Метод Хартри-Фока Рoothана.	Аппроксимации атомных орбиталей, орбитали Слэтера-Зенера. Силы в молекулах, теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала и природа химической связи.
9	Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.	Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы. Реакционные и натуральные орбитали, в том числе связанные. Простейший метод Хюккеля. Пи-электронное приближение, метод орбиталей Хюккеля(МОХ). Метод Хюккеля и теория возмущений
10	Метод молекулярных орбиталей.	Приближение линейной комбинации атомных орбиталей. Уточнения метода Хартри-Фока-Рутаана. Молекула H_2 в МОЛКАО. Симметрия волновых функций, орбиталей
11	Движение ядер.	Потенциальные поверхности и симметрия. Электронно-колебательное взаимодействие.
12	Химическая связь.	О природе химической связи. Межмолекулярное взаимодействие и химическая связь в конденсированных состояниях. Атомы в молекулах.
13	Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону	Электронные, колебательные и вращательные уровни молекул. Многоатомные молекулы и дипольные моменты, поляризуемость, магнитные моменты. Межмолекулярные силы (понятие о силах Ван-дер-Ваальса).
14	Неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц.	Симметричная и антисимметричная волновые функции. Бозоны и фермионы. Элементы статистики Бозе-Эйнштейна и Ферми -Дикара.

15	Электронные, колебательные состояния твердых тел.	Периодичность потенциала одноэлектронной волновой функции кристаллической решетки. Понятие о зонах Бриллюэна. Экситоны. Акустические и оптические ветви спектра кристаллической решетки. Понятие о нормальных колебаниях, их функция распределения по частотам. Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.
16	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю. Характеристическая температура. Понятие о фононах. Заполнение энергетических зон в кристалле. Зонные модели полупроводников, диэлектриков и металлов. Собственная и примесная проводимость. Понятие о сверхпроводимости.
17	Метод конфигурационного взаимодействия	Алгоритм вычислений. Метод валентных схем (ВС), спиновые функции для S^2 и S_z , диаграммы Румера Молекула водорода. Молекула H_2 в варианте МОЛКАО. Симметрия волновых функций и орбиталей.
18	Полуэмпирические методы квантовой химии	Полуэмпирические методы квантовой химии в прил. НДП (Нулевое дифференциальное перекрывание), Валентное приближение, НДП и инвариантность состояний молекулярных орбит, конфигурационное взаимодействие, валентное состояние.

Таблица 4.1.2 – Содержание дисциплины и ее методическое обеспечение

№ п/п	Раздел(тема) дисциплины	Виды деятельности			Учебно-методические материалы	Формы текущего контроля успеваемости и (по неделям семестра)	Компетенции
		Лек., час	№ лаб.	№ пр.			
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Введение	2			У1-4, МУ1,2	Ср, Сб, Р	ПК-1
2	Квантово механическое рассмотрение атома водорода	2		1			
3	Строение атома.	2		2			
4	Гармонический осциллятор	2		2			
5	Общие принципы, касающиеся решения молекулярных задач.	2		3			
6	Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи	2		3			
7	Одноэлектронное приближение	2		4	У1-4, МУ1,2	Ср, Сб, Р	ПК-1
8	Метод Хартри-Фока Роотхана.	2					
9	Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.	2			У1-4, МУ1,2	Ср, Сб, Р	ПК-1
10	Метод молекулярных орбиталей.	2		5	У1-4, МУ1,2	Ср, Сб, Р	ПК-1
11	Движение ядер.	2		5			
12	Химическая связь.	2		6			
13	Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону	2		7			
14	Неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц.	2		7			
15	Электронные, колебательные состо-	2		8			

яния твердых тел.							
16	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.	2		8			
17	Метод конфигурационного взаимодействия	2		9	У1-4, МУ1,2	Ср, Сб, Р	ПК-1
18	Полуэмпирические методы квантовой хими	2		9	У1-4, МУ1,2	Ср, Сб, Р	ПК-1

Ср – семинар, Сб – собеседование Р - реферат.

4.2 Лабораторные работы и (или) практические занятия

Таблица 4.2.1 – Практические занятия

№	Наименование практического (семинарского) занятия	Объем, час.
1	2	3
1	Уравнение Шредингера в сферических координатах. Решения угловых и радиального уравнений.	2
2	Квантово механическое рассмотрение атома водорода	2
3	Строение атома.	2
4	Гармонический осциллятор	2
5	Общие принципы, касающиеся решения молекулярных задач.	2
6	Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи	2
7	Одноэлектронное приближение	2
8	Метод Хартри-Фока Рoothана.	2
9	Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.	2
10	Метод молекулярных орбиталей.	2
11	Движение ядер.	2
12	Химическая связь.	2
13	Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону	2
14	Неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц.	2
15	Электронные, колебательные состояния твердых тел.	2
16	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.	2
17	Метод конфигурационного взаимодействия	2
18	Полуэмпирические методы квантовой хими	2
Итого		36

4.3 Самостоятельная работа студентов (СРС)

Таблица 4.3 – Самостоятельная работа студентов

Форма СРС	Наименование раздела дисциплины	Срок выполнения	Время, затрачиваемое на выполнение СРС, час.
1	2	3	2
1	Квантово механическое рассмотрение атома водорода.	2 неделя	2
2	Гармонический осциллятор	6 неделя	2
3	Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи	8 неделя	2
4	Метод Хартри-Фока Рoothана.	12 неделя	2
5	Метод молекулярных орбиталей.	14 неделя	1
6	Движение ядер	15 неделя	1

7	Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону	16 неделя	1
8	Электронные, колебательные состояния твердых тел.	17 неделя	2
9	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю	18 неделя	1,85
Итого			16,85

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Студенты могут при самостоятельном изучении отдельных тем и вопросов дисциплины пользоваться учебно-наглядными пособиями, учебным оборудованием и методическими разработками кафедры в рабочее время, установленное Правилами внутреннего распорядка работников.

Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по данной дисциплине организуется:

библиотекой университета:

- Библиотечный фонд укомплектован учебной, методической, научной, периодической, справочной и художественной литературой в соответствии с УП и данной РПД;
- Имеется доступ к основным информационным образовательным ресурсам, информационной базе данных, в том числе библиографической, возможность выхода в интернет.

кафедрой:

- Путем обеспечения доступности всего необходимого учебно-методического и справочного материала;
- Путем предоставления сведений о наличии учебно-методической литературы, современных программных средств.
- Путем разработки:
 - методических рекомендаций, пособий по организации самостоятельной работы студентов;
 - заданий для самостоятельной работы;
 - тем рефератов и докладов;
 - вопросов к экзамену;
 - методических указаний к выполнению практических работ и т.д.

Типографией университета:

- помощь авторам в подготовке и издании научной, учебной и методической литературы.

6 Образовательные технологии

Реализация компетентного подхода предусматривает широкое использование в образовательном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования общепрофессиональных компетенций обучающихся.

Таблица 6.1 – Интерактивные образовательные технологии, используемые при проведении аудиторных занятий

Не предусмотрено

7 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

7.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

Код и содержание компетенции	Этапы формирования компетенций и дисциплины (модули), при которых формируется данная компетенция		
	Начальный	Основной	Завершающий
1	2	3	4
Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований по синтезу и анализу органических соединений (ПК-1);	правоведение, иностранный язык, русский язык и культура речи, введение в направление подготовки и планирование профессиональной карьеры	Физико-химические методы исследования структуры органических соединений, Методы исследования органических соединений	Химические основы биологически активных соединений, Введение в химию биологически активных веществ.

7.2 Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Таблица 7.2 Показатели и критерии определения уровня сформированности компетенций (частей компетенций)

Код компетенции/ этап (указывается название этапа из п.7.1)	Показатели оценивания компетенций (индикаторы достижения компетенций, закрепленные за дисциплиной)	Критерии и шкала оценивания компетенций		
		Пороговый уровень («удовлетворительно»)	Продвинутый уровень («хорошо»)	Высокий уровень («отлично»)
1	2	3	4	5

<p>ПК-1 основной</p>	<p>ПК-1.2 Осуществляет сбор, обработку, анализ и обобщение передового отечественного и международного опыта в области исследования органических соединений ПК1.3 Осуществляет сбор, обработку, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований синтеза органических соединений, а также изучения их структуры и реакционной способности</p>	<p>Знать: методы планирования эксперимента Уметь: планировать эксперимент на основе анализа литературных данных анализировать и обобщать результаты эксперимента, формулировать выводы Владеть или Иметь опыт деятельности): проведения эксперимента и методами обработки его результатов</p>	<p>Знать: методы планирования эксперимента методы построения моделей изучаемых объектов Уметь: планировать эксперимент на основе анализа литературных данных анализировать и обобщать результаты эксперимента, формулировать выводы, использовать специализированное программное обеспечение для проведения теоретических расчетов и обработки экспериментальных данных Владеть или Иметь опыт деятельности): проведения эксперимента и методами обработки его результатов, приемами, методиками идентификации основного вещества смеси</p>	<p>Знать: методы планирования эксперимента методы построения моделей изучаемых объектов, основные методы качественного (титрование, экстракция в сочетании с фотометрией, хроматография, УФ-спектрометрия, флуориметрия и другие.) и количественного анализа веществ. Уметь: планировать эксперимент на основе анализа литературных данных анализировать и обобщать результаты эксперимента, формулировать выводы, использовать специализированное программное обеспечение для проведения теоретических расчетов и обработки экспериментальных данных, изображать структурные формулы сложных органических соединений с помощью различных структурно-графических химических редакторов пользоваться расчётными программами, программами анализа и визуализации результатов расчёта Владеть или Иметь опыт деятельности): проведения эксперимента и методами обработки его результатов, приемами, методиками идентификации основного вещества смеси определения</p>
--------------------------	---	--	--	---

--	--	--	--	--

7.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Таблица 7.3 Паспорт комплекта оценочных средств для текущего контроля

№	Раздел (тема) дисциплины	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Технология формирования	Оценочные средства		Описание шкал оценивания
				наименование	№№ заданий	
1	2	3	4	5	6	7
1	Введение	ПК-1	лекции, СРС	контрольные вопросы	1-4	Согласно табл. 7.2
2	Квантово механическое рассмотрение атома водорода	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные	5-8	Согласно табл. 7.2
3	Строение атома.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	9-12	Согласно табл. 7.2
4	Гармонический осциллятор	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	13-16	Согласно табл. 7.2
5	Общие принципы, касающиеся решения молекулярных задач.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	17-20	Согласно табл. 7.2
6	Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	21-24	Согласно табл. 7.2
7	Одноэлектронное приближение	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	25-28	Согласно табл. 7.2
8	Метод Хартри-Фока Рoothана.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные	29-32	Согласно табл. 7.2
9	Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	33-36	Согласно табл. 7.2
10	Метод молекулярных орбиталей.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	37-40	Согласно табл. 7.2
11	Движение ядер.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	41-44	Согласно табл. 7.2
12	Химическая связь.	ПК-1	лекции,	контрольн	45-48	Согласно

			практ. занятия, СРС	ые вопросы		табл. 7.2
13	Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	49-52	Согласно табл. 7.2
14	Неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные	53-56	Согласно табл. 7.2
15	Электронные, колебательные состояния твердых тел.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	57-60	Согласно табл. 7.2
16	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	61-64	Согласно табл. 7.2
17	Метод конфигурационного взаимодействия	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	65-68	Согласно табл. 7.2
18	Полуэмпирические методы квантовой химии	ПК-1	лекции, практ. занятия, СРС	контрольн ые вопросы	69-72	Согласно табл. 7.2

Примеры типовых контрольных заданий для текущего контроля

Тема 1 Введение

1. Квантовая химия и квантовая механика молекул как часть квантовой теории.
2. Предмет, методы, цели, и задачи квантовой химии.
3. История и основные этапы становления и развития квантовой химии, ее современное состояние и достижения.
4. Перспективы развития квантовой химии.

Тема 2 Квантово механическое рассмотрение атома водорода

5. Квантово механическое рассмотрение атома водорода.
6. Уравнение Шредингера в сферических координатах. Решения угловых и радиального уравнений.
7. Квантовые числа атома водорода. Волновые функции атома водорода.
8. Расчет различных свойств водородоподобных атомов.

Темы рефератов

1. Строение атома и валентность. Квантовые числа. Принцип Паули. Электронные оболочки.
2. Построение периодической системы элементов Д.И.Менделеева. Квантовые числа и термы многоэлектронных атомов. Валентность с точки зрения квантовой химии.
3. Многоэлектронные атомы. Приближение независимых электронов. Метод самосогласованного поля Хартри.
4. Определитель Слэтера. Волновые функции двухэлектронных систем.

6. Метод Хартри-Фока. Аппроксимации атомных орбиталей, орбитали Слэтера-Зенера. Силы в молекулах, теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала и природа химической связи.

Полностью оценочные материалы и оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости представлены в УММ по дисциплине.

Типовые задания для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена. Экзамен проводится в виде компьютерного тестирования.

Для тестирования используются контрольно-измерительные материалы (КИМ) – вопросы и задания в тестовой форме, составляющие банк тестовых заданий (БТЗ) по дисциплине, утвержденный в установленном в университете порядке.

Проверяемыми на промежуточной аттестации элементами содержания являются темы дисциплины, указанные в разделе 4 настоящей программы. Все темы дисциплины отражены в КИМ в равных долях (%). БТЗ включает в себя не менее 100 заданий и постоянно пополняется. БТЗ хранится на бумажном носителе в составе УММ и электронном виде в ЭИОС университета.

Для проверки *знаний* используются вопросы и задания в различных формах:

- закрытой (с выбором одного или нескольких правильных ответов),
- открытой (необходимо вписать правильный ответ),
- на установление правильной последовательности,
- на установление соответствия.

Умения, навыки(или опыт деятельности) и компетенции проверяются с помощью компетентностно-ориентированных задач (ситуационных, производственных или кейсового характера) и различного вида конструкторов. Все задачи являются многоходовыми. Некоторые задачи, проверяющие уровень сформированности компетенций, являются многовариантными. Часть умений, навыков и компетенций прямо не отражена в формулировках задач, но они могут быть проявлены обучающимися при их решении.

В каждый вариант КИМ включаются задания по каждому проверяемому элементу содержания во всех перечисленных выше формах и разного уровня сложности. Такой формат КИМ позволяет объективно определить качество освоения обучающимися основных элементов содержания дисциплины и уровень сформированности компетенций.

Примеры типовых заданий для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Задание в закрытой форме:

1. Вычислите энергию фотона, если ему соответствует длина волны 5000 Å.

1. $3,978 \cdot 10^{19}$ Дж	2. $3,978 \cdot 10^{17}$ Дж	3. $5,8 \cdot 10^{19}$ Дж
4. $3 \cdot 10^{18}$ Дж	5. $3,1 \cdot 10^{19}$ Дж	6. $3,3 \cdot 10^{19}$ Дж

Задание в открытой форме:

2. Какая из молекул CO или NO является более жесткой, если они поглощают при 2170,21 и 1904,03 см⁻¹ соответственно?

Полностью оценочные материалы и оценочные средства для проведения промежуточной аттестации обучающихся представлены в УММ по дисциплине.

7.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, регулируются следующими нормативными актами университета:

– положение П 02.016–2018 Обально-рейтинговой системе оценивания результатов обучения по дисциплинам (модулям) и практикам при освоении обучающимися образовательных программ;

– методические указания, используемые в образовательном процессе, указанные в списке литературы.

Для *текущего контроля успеваемости* по дисциплине в рамках действующей в университете балльно-рейтинговой системы применяется следующий порядок начисления баллов:

Таблица 7.4 – Порядок начисления баллов в рамках БРС

2 семестр

Форма контроля	Минимальный балл		Максимальный балл	
	балл	примечание	балл	примечание
1	2	3	4	5
Практическое занятие №1 Уравнение Шредингера в сферических координатах	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №2 Квантово механическое рассмотрение атома водорода	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №3 Строение атома.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №4 Гармонический осциллятор	1	Выполнил, но «не защитил»	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №5 Общие принципы, касающиеся решения молекулярных задач.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №6 Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №7 Одноэлектронное приближение	1	Выполнил, но «не защитил»	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №8	1	Выполнил, доля	2	Выполнил, доля

Метод Хартри-Фока Рoothана.		правильных ответов менее 50 %		правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №9 Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №10 Метод молекулярных орбиталей.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №11 Движение ядер.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №12 Химическая связь.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №13 Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №14 Неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №15 Электронные, колебательные состояния твердых тел.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №16 Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №17 Метод конфигурационного взаимодействия	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
Практическое занятие №18 Полуэмпирические методы квантовой химии	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
СРС	6	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	12	Выполнил, доля правильных ответов более 50 %
<i>Итого за успеваемость</i>	24		48	
Посещаемость	0		16	
Экзамен	0		36	
<i>Итого</i>	24		100	

Для промежуточной аттестации, проводимой в форме тестирования, используется следующая методика оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности. В каждом варианте КИМ 16 заданий (15 вопросов и одна задача).

Каждый верный ответ оценивается следующим образом:

- задание в закрытой форме - 2 балла,
- задание в открытой форме - 2 балла,
- задание на установление правильной последовательности - 2 балла,
- задание на установление соответствия - 2 балла,
- решение задачи - 6 баллов.

Максимальное количество баллов за тестирование - 36 баллов.

Для промежуточной аттестации, проводимой в форме тестирования, используется следующая методика оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности. В каждом варианте КИМ 16 заданий (15 вопросов и одна задача).

Каждый верный ответ оценивается следующим образом:

- задание в закрытой форме - 2 балла,
- задание в открытой форме - 2 балла,
- задание на установление правильной последовательности - 2 балла,
- задание на установление соответствия - 2 балла,
- решение компетентностно-ориентированной задачи - 6 баллов.

Максимальное количество баллов за тестирование - 36 баллов.

8 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

8.1 Основная учебная литература

1. **Квантовая химия**. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. - 3-е изд. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. - Текст : непосредственный.
2. **Квантовая химия** : [Электронный ресурс] : учебное пособие / А. А. Родионов ; Юго-Зап. гос. ун-т. - Курск : ЮЗГУ, 2011. - 246 с.
3. **Квантовая химия** и квантовая механика в применении к задачам : [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. И. Крашенинин, Е. Г. Газенаур, Л. В. Кузьмина. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012. - 56 с. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>.
4. Крашенинин, В.И. Квантовая химия : учебное пособие : [16+] / В.И. Крашенинин, Л.В. Кузьмина, Е.Г. Газенаур ; Кемеровский государственный университет. – Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2019. – 82 с. : ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=600391> (дата обращения: 10.02.2021). – Библиогр. в кн. – ISBN 978-5-8353-2440-8. – Текст : электронный.

8.2 Дополнительная учебная литература

1. Квантовая химия в материаловедении. Неметаллические тугоплавкие соединения и неметаллическая керамика / А. Л. Ивановский, Г. П. Швейкин. - Екатеринбург : Екатеринбург, 2000. - 179 с. - Текст : непосредственный.
2. Задачник по физике : учебное пособие / А. Г. Чертов, А. А. Воробьев. - 7-е изд., перераб. и доп. - М. : Физико-математической литературы, 2003. - 640 с. - Текст : непосредственный.
3. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В.Г. Цирельсон. – 4-е изд. (эл.). – Москва : Лаборатория знаний, 2017. – 522 с. : ил., табл., схем. – (Учебник для высшей школы). – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=463160> (дата обращения: 10.02.2021). – ISBN 978-5-00101-502-4. – Текст : электронный.

8.3 Перечень методических указаний

1. **Квантовая химия** : [Электронный ресурс] : методические указания к выполнению практических работ для студентов направления подготовки 28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника» / Юго-Зап. гос. ун-т ; сост.: А. В. Кузько, А. Е. Кузько, О. Ю. Черных. - Электрон. текстовые дан. (2996 КБ). - Курск : ЮЗГУ, 2017. - 21 с.

2. **Квантовая химия** : [Электронный ресурс] : методические рекомендации для самостоятельной работы студентов направления подготовки 28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника» / Юго-Зап. гос. ун-т ; сост. А. В. Кузько. - Электрон. текстовые дан. (483 КБ). - Курск : ЮЗГУ, 2017. - 12 с.

9 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. <http://biblioclub.ru> - Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека онлайн»

2. Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки. Сайт: <http://diss/rsl.ru>.

3. Научная библиотека elibrary. Сайт: <http://elibrary.ru>.

4. <http://www.consultant.ru> - Официальный сайт компании «Консультант Плюс».

10 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Основными видами аудиторной работы студента при изучении дисциплины являются лекции и практические занятия. Студенты не имеют права пропускать занятия без уважительных причин.

На лекциях излагаются и разъясняются основные понятия темы, связанные с ней теоретические и практические проблемы, даются рекомендации для самостоятельной работы. В ходе лекции студент должен внимательно слушать и конспектировать материал.

Изучение лекционных тем или разделов дисциплины подкрепляются практическими занятиями, которые обеспечивают: контроль подготовленности студента; закрепление учебного материала; приобретение опыта устных публичных выступлений, ведения дискуссии, в том числе аргументации и защиты выдвигаемых положений и тезисов.

Практическому занятию предшествует самостоятельная работа студента, связанная с освоением материала, полученного на лекциях, и материалов, изложенных в учебниках и учебных пособиях, а также литературе, рекомендованной преподавателем.

По согласованию с преподавателем студенты могут готовить рефераты по отдельным темам дисциплины, выступать на занятиях с докладами. Основу докладов составляет, как правило, содержание подготовленных студентами рефератов.

Качество учебной работы студентов преподаватель оценивает по результатам тестирования, собеседования, результатам докладов.

Преподаватель уже на первых занятиях объясняет студентам, какие формы обучения следует использовать при самостоятельном изучении дисциплины конспектирование учебной литературы и лекций.

В процессе обучения преподаватели используют активные формы работы со студентами: чтение лекций, привлечение студентов к творческому процессу на лекциях, промежуточный контроль путем отработки студентами пропущенных лекции, участие в групповых и индивидуальных консультациях (собеседовании). Эти формы способствуют выработке у студентов умения работать с учебником и литературой. Изучение литературы составляет значительную часть самостоятельной работы студента. Это большой труд, требующий усилий и желания студента. В самом начале работы над книгой важно определить цель и направление этой работы. Прочитанное следует закрепить в памяти.

Одним из приемов закрепление освоенного материала является конспектирование, без которого немислима серьезная работа над литературой. Систематическое конспектирование помогает научиться правильно, кратко и четко излагать своими словами прочитанный материал.

Самостоятельную работу следует начинать с первых занятий. От занятия к занятию нужно регулярно прочитывать конспект лекций, знакомиться с соответствующими разделами учебника, читать и конспектировать литературу по каждой теме дисциплины. Самостоятельная работа дает студентам возможность равномерно распределить нагрузку, способствует более глубокому и качественному усвоению учебного материала.

В случае необходимости студенты обращаются за консультацией к преподавателю по вопросам дисциплины «Квантовая физика» с целью усвоения и закрепления компетенций.

Основная цель самостоятельной работы студента при изучении дисциплины - закрепить теоретические знания, полученные в процессе лекционных занятий, а также сформировать практические навыки самостоятельного анализа особенностей дисциплины.

11 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Libreoffice операционная система Windows
Антивирус Касперского (или ESETNOD)

При организации и контроле самостоятельной работы студентов используется электронная почта сети Интернет.

12 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и лаборатории кафедры общей и прикладной физики, оснащенные учебной мебелью: столы, стулья для обучающихся; стол, стул для преподавателя; доска;

2. Проекционный экран на штативе;

3. Мультимедиацентр: ноутбук ASUSX50VLPMD-T2330/14"/1024Mb/160Gb

/сумка/ проектор inFocusIN24+;

4. Экран мобильный Draper Diplomat 60x60/.

13 Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья учитываются их индивидуальные психофизические особенности. Обучение инвалидов осуществляется также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).

Для лиц с нарушением слуха возможно предоставление учебной информации в визуальной форме (краткий конспект лекций; тексты заданий, напечатанные увеличенным шрифтом), на аудиторных занятиях допускается присутствие ассистента, а также сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков. Текущий контроль успеваемости осуществляется в письменной форме: обучающийся письменно отвечает на вопросы, письменно выполняет практические задания. Доклад (реферат) также может быть представлен в письменной форме, при этом требования к содержанию остаются теми же, а требования к качеству изложения материала (понятность, качество речи, взаимодействие с аудиторией и т. д.) заменяются на соответствующие требования, предъявляемые к письменным работам (качество оформления текста и списка литературы, грамотность, наличие иллюстрационных материалов и т.д.). Промежуточная аттестация для лиц с нарушениями слуха проводится в письменной форме, при этом используются общие критерии оценивания. При необходимости время подготовки к ответу может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации, а также использование на аудиторных занятиях звукозаписывающих устройств (диктофонов и т.д.). Допускается присутствие на занятиях ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь. Текущий контроль успеваемости осуществляется в устной форме. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование по вопросам.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, на аудиторных занятиях, а также при проведении процедур текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации могут быть предоставлены необходимые технические средства (персональный компьютер, ноутбук или другой гаджет); допускается присутствие ассистента (ассистентов), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь (занять рабочее место, передвигаться по аудитории, прочитать задание, оформить ответ, общаться с преподавателем).

13 Лист дополнений и изменений, внесенных в рабочую программу

Номер изме- нения	Номера страниц				Всего стра- ниц	Дата	Основание для изменения и под- пись лица, прово- дившего измене- ния
	изме- нённых	заме- нённых	аннули- ро- ванных	но- вых			

--	--	--	--	--	--	--	--