

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ряполов Петр Алексеевич

Должность: декан ЕНФ

Дата подписания: 05.09.2023 16:43:46

Уникальный программный ключ:

efd3ecdabd183f7649d0e3a33c230c6662946c7c99039b2b268921fde408c1fb6

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Квантовая химия»

Цель преподавания дисциплины: формирование у студентов знаний об основных приложениях квантовой механики к химическим системам; способности анализировать свойства многоэлектронных атомов и молекулярных систем и определять границы применимости теоретических закономерностей.

Задачи изучения дисциплины: изучение электронного строения атомов и молекул; овладение методами решения прикладных задач квантовой химии; овладение навыками работы с типовыми программными продуктами для визуализации и моделирования свойств молекул.

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины

- осуществляет подготовку и публикацию статей по результатам проведенных работ (ПК-2.3).

Разделы дисциплины

Введение. Предмет компьютерной химии. Атомные орбитали. Методы Хартри-Фока и Кона-Шема. Детерминант Слейтера. Химическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма. Методы расчета молекул. Адиабатическое приближение. Метод Хартри-Фока для молекул. Методы теории функционала плотности. Метод молекулярных орбиталей (МО) Хюккеля.

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан факультета

естественно-научного

(наименование ф-та полностью)



П.А. РЯПОЛОВ

(подпись, инициалы, фамилия)

« 31 » 08 2019г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовая химия

(наименование дисциплины)

ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника

шифр и наименование направления подготовки (специальности)

направленность (профиль, специализация) «Микро- и наносистемы»

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) 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль, специализация) «Микро- и наносистемы», одобренного Ученым советом университета (протокол № 7 «29» марта 2019г.).

Рабочая программа дисциплины обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе для обучения студентов по ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль, специализация) «Микро- и наносистемы» на заседании кафедры нанотехнологий, общей и прикладной физики №1 «31» августа 2019 г. НТОи ПР
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Кузько А.Е.
Разработчик программы _____
к.ф.-м.н., доцент _____ Кузько А.В.
(ученая степень и ученое звание, Ф.И.О.)

Согласовано: на заседании кафедры заседании кафедры нанотехнологий, общей и прикладной физики № « » 20 г.

Зав. кафедрой _____ Кузько А.Е.

(название кафедры, дата, номер протокола, подпись заведующего кафедрой; согласование производится с кафедрами, чьи дисциплины основываются на данной дисциплине, а также при необходимости руководителями других структурных подразделений)

Директор научной библиотеки _____ Макаровская В.Г.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль, специализация) «Микро- и наносистемы», одобренного Ученым советом университета протокол №7 «29» 03 2019г., на заседании кафедры НТОи ПР 31.08.2019 №1.
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Кузько А.Е.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль, специализация) «Микро- и наносистемы», одобренного Ученым советом университета протокол №7 «29» 03 2019г., на заседании кафедры НТОи ПР 31.08.2019 №1.
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Кузько А.Е.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль, специализация) «Микро- и наносистемы», одобренного Ученым советом университета протокол №7 «29» 03 2019г., на заседании кафедры НТОи ПР №1 от 31.08.2019г.
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Кузько А.Е.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль) «Микро- и наносистемы», одобренного Ученым советом университета (протокол № 7 «25» 02 2020 г. на заседании кафедры НМО, ПР 31.08.2023 №1

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой  Курко В.Е.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль) «Микро- и наносистемы», одобренного Ученым советом университета (протокол № « » 20 г. на заседании кафедры _____

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль) «Микро- и наносистемы», одобренного Ученым советом университета (протокол № « » 20 г. на заседании кафедры _____

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль) «Микро- и наносистемы», одобренного Ученым советом университета (протокол № « » 20 г. на заседании кафедры _____

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль) «Микро- и наносистемы», 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

Формирование у студентов знаний об основных приложениях квантовой механики к химическим системам; способности анализировать свойства многоэлектронных атомов и молекулярных систем и определять границы применимости теоретических закономерностей.

1.2 Задачи дисциплины

- изучение электронного строения атомов и молекул;
- овладение методами решения прикладных задач квантовой химии;
- овладение навыками работы с типовыми программными продуктами для визуализации и моделирования свойств молекул.

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

Таблица 1.3 – Результаты обучения по дисциплине

<i>Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)</i>		<i>Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной</i>	<i>Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций</i>
<i>код компетенции</i>	<i>наименование компетенции</i>		
ПК-2	ПК-2 Способен составлять аналитические обзоры, научные отчеты, публикации результатов исследований в области микро- и наносистем	ПК 2.3 Осуществляет подготовку и публикацию статей по результатам проведенных работ	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - вариационные принципы и методы физико-математического моделирования в квантовой химии; - фундаментальные законы квантовой механики и квантовой химии; - современные компьютерные технологии и типовые программные продукты для визуализации и численного расчета химических свойств атомов и молекул. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять методы физико-математического моделирования

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		
			<p>для решения прикладных задач квантовой химии (оценка потенциалов ионизации, энергии когезии и т. д.);</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять современное программное обеспечение для визуализации молекул; - применять современное программное обеспечение для численного расчета параметров молекул; <p>Владеть (или Иметь опыт деятельности):</p> <ul style="list-style-type: none"> навыкам работы с современными программными пакетами для численного квантово-механического моделирования взаимодействия атомов в молекуле; - навыками определения геометрических параметров молекул посредством применения современных компьютерных программ; - навыками построения атомных орбиталей посредством применения современных компьютерных программ.

2 Указание места дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы

Дисциплина «Квантовая химия» является элективной дисциплиной, входит в часть, формируемую участниками образовательных отношений, основной профессиональной образовательной программы – программы бакалавриата (специалитета, магистратуры) 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, направленность (профиль, специализация) «Микро- и наносистемы». Дисциплина изучается на 4 курсе в 7 семестре.

3 Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обу-

чающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 3 зачетные единицы (з.е.), 108 академических часов.

Таблица 3 - Объем дисциплины

Виды учебной работы	Всего, часов
Общая трудоемкость дисциплины	108
Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий (всего)	54,1
в том числе:	
лекции	18
лабораторные занятия	18
практические занятия	18
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	53,9
Контроль (подготовка к экзамену)	0
Контактная работа по промежуточной аттестации (всего АттКР)	0,1
в том числе:	
зачет	0,1
зачет с оценкой	не предусмотрен
курсовая работа (проект)	не предусмотрена
экзамен (включая консультацию перед экзаменом)	не предусмотрен

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. Предмет компьютерной химии	Предмет компьютерной химии и ее роль в описании химических явлений и процессов. Постулаты квантовой механики. Вариационный принцип. Решение уравнения Шредингера.
2.	Атомные орбитали	Радиальные нормированные функции водородоподобных атомов. Угловые части волновой функции атома, обладающего центральным полем.
3.	Методы Хартри-Фока и Кона-Шема.	Приближение независимых частиц. Метод самосогласованного поля. Приближение центрального поля. Метод Хартри-Фока. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока. Метод Кона-Шэма.
4.	Детерминант Слейтера.	Учет спина электрона. Антисимметричность электронной

		волновой функции. Принцип Паули. Детерминант Слейтера. Электронные конфигурации атомов с точки зрения квантовой химии.
5.	Химическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма.	Оценка потенциалов ионизации, электроотрицательности, химической жесткости, энергии когезии.
6.	Методы расчета молекул. Адиабатическое приближение.	Приближение Борна-Оппенгеймера. Поверхность потенциальной энергии. Энергии вращательных барьеров. Молекулярная структура.
7.	Метод Хартри-Фока для молекул.	Метод Хартри-Фока для молекул. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Ограничения метода Хартри-Фока.
8.	Методы теории функционала плотности	Методы ТФП. Метод Хартри-Фока-Слейтера.

Таблица 4.1.2 – Содержание дисциплины и его методическое обеспечение

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Виды деятельности			Учебно-методические материалы	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра)	Компетенции
		лек. час	№ лаб.	№ пр.			
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Введение. Предмет компьютерной химии	2	1	2	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ЛР-2 ПР-2 Т-2	ПК-2.3
2	Атомные орбитали	2		1	У-1, МУ-2, МУ-3	ПР-4 Т-4	ПК-2.3
3	Методы Хартри-Фока и Кона-Шэма	2	2	3	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ПР-6 ЛР-6 Т-6	ПК-2.3
4	Детерминант Слейтера.	2	3		У-1, МУ-1, МУ-3	ЛР-8 Т-8	ПК-2.3
5	Химическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма.	2	4	4	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ПР-10 ЛР-10 Т-10	ПК-2.3
6	Методы расчета молекул. Адиабатическое приближение.	2	7	5	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ПР-12 ЛР-12 Т-12	ПК-2.3
7	Метод Хартри-Фока для молекул.	2	5	6	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ПР-14 ЛР-14 Т-14	ПК-2.3
8	Методы теории функционала плотности	4	6		У-1, МУ-1, МУ-3	ЛР-17 Т-17	ПК-2.3

ПР – проверка решения задач, ЛР – защита лабораторной работы, Т – тест

4.2 Лабораторные работы и (или) практические занятия

4.2.1 Лабораторные работы

Таблица 4.2.1 – Лабораторные работы

№	Наименование лабораторной работы	Объем, час
1	2	3
1	«Молекулярный редактор» Avogadro. Интерфейс	2
2	Построение пептида	2
3	Проектирование нанотрубок	2
4	Моделирование кристаллов	2
5	Моделирование электронной структуры молекулы H ₂ в Abinit	4
6	Электронная структура кристаллических систем в Abinit	4
7	Определение элементного состава вещества	2
Итого		18

4.2.2 Практические занятия

Таблица 4.2.2 – Практические занятия

№	Наименование практического (семинарского) занятия	Объем, час
1	2	3
1	Атом водорода. Атомные орбитали. Построение угловой части волновой функции в программе wxMaxima	2
2	Построение радиальной части волновой функции в программе wxMaxima.	2
3	Метод Хартри	4
4	Метод Хартри-Фока	4
5	Приближение Хюккеля	2
6	Метод МО ЛКБФ. Метод Рутана	4
Итого		18

4.3 Самостоятельная работа студентов (СРС)

Таблица 4.3 – Самостоятельная работа студентов

№ раздела (темы)	Наименование раздела(темы) дисциплины	Срок выполнения	Время, затрачиваемое на выполнение СРС, час.
1	2	3	4
1	Введение. Предмет компьютерной химии	2 неделя	6
2	Атомные орбитали	4 неделя	6
3	Методы Хартри-Фока и Кона-Шема	6 неделя	8
4	Детерминант Слейтера.	8 неделя	6
5	Химическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока и Кона-Шема.	10 неделя	6
6	Методы расчета молекул. Адиабатическое приближение.	12 неделя	6
7	Метод Хартри-Фока для молекул.	14 неделя	8
8	Методы теории функционала плотности	17 неделя	7,9
Итого			53,9

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

Студенты могут при самостоятельном изучении отдельных тем и вопросов дисциплин 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;
 - тем рефератов;
 - вопросов к зачету;
 - методических указаний к выполнению лабораторных работ и т.д.

типографией университета:

- помощь авторам в подготовке и издании научной, учебной и методической литературы;
- удовлетворение потребности в тиражировании научной, учебной и методической литературы.

6 Образовательные технологии. Технологии использования воспитательного потенциала дисциплины

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

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

№	Наименование раздела (темы лекции, практического или лабораторного занятия)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Объем, час.
1	2	3	4
1	Лабораторная работа: «Проектирование нанотрубок»	Компьютерная симуляция	2
2	Практическое занятие: «Атом водорода. Атомные орбитали. Построение угловой части волновой функции в программе wxMaxima»	Компьютерная симуляция	2
Итого			4

Содержание дисциплины обладает значительным воспитательным потенциалом, поскольку в нем аккумулирован исторический и современный научный опыт человечества. Реализация воспитательного потенциала дисциплины осуществляется в рамках единого образовательного и воспитательного процесса и способствует непрерывному развитию личности каждого обучающегося. Дисциплина вносит значимый вклад в формирование общей и профессиональной культуры обучающихся. Содержание дисциплины способствует профессионально-трудовому воспитанию обучающихся.

Реализация воспитательного потенциала дисциплины подразумевает:

- целенаправленный отбор преподавателем и включение в лекционный материал, материал для практических и лабораторных занятий содержания, демонстрирующего обучающимся образцы настоящего научного подвижничества создателей и представителей данной отрасли науки (производства), высокого профессионализма ученых (представителей производства), их ответственности за результаты и последствия деятельности для человека и общества; примеры подлинной нравственности людей, причастных к развитию науки и производства, а также примеры творческого мышления;

- применение технологий, форм и методов преподавания дисциплины, имеющих высокий воспитательный эффект за счет создания условий для взаимодействия обучающихся с преподавателем, другими обучающимися, представителями работодателей (командная работа, проектное обучение, разбор конкретных ситуаций, решение кейсов);

- личный пример преподавателя, демонстрацию им в образовательной деятельности и общении с обучающимися за рамками образовательного процесса высокой общей и профессиональной культуры.

Реализация воспитательного потенциала дисциплины на учебных занятиях направлена на поддержание в университете единой развивающей образовательной и воспитательной среды. Реализация воспитательного потенциала дисциплины в ходе самостоятельной работы обучающихся способствует развитию в них целеустремленности, инициативности, креативности, ответственности за результаты своей работы – качеств, необходимых для успешной социализации и профессионального становления.

7 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

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

Таблица 7.1 – Этапы формирования компетенций

Код и наименование компетенции	Этапы* формирования компетенций и дисциплины (модули) и практики, при изучении/ прохождении которых формируется данная компетенция		
	начальный	основной	завершающий
1	2	3	4
ПК-2.3 Осуществляет подготовку и публикацию статей по результатам проведенных работ	Основы научных исследований Основы инженерного творчества		Квантовая химия Расчетные методы в квантовой химии Нано- и микродисперсные магнитные системы

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

Таблица 7.2 – Показатели и критерии оценивания компетенций, шкала оценивания

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
ПК-2/ завершающий	ПК-2.3 Осуществляет подготовку и публикацию статей по результатам проведенных работ	Знать: - вариационные принципы и методы физико-математического моделирования в квантовой химии;	Знать: - вариационные принципы и методы физико-математического моделирования в квантовой химии; - фундаментальные законы кван-	Знать: - вариационные принципы и методы физико-математического моделирования в квантовой химии; - фундаментальные законы квантовой ме-

Код компетенции/ этап (указывается название этапа из п.7.1)	Показатели оценивания компетенций (индикаторы достижения компетенций, закрепленные за дисципли- ной)	Критерии и шкала оценивания компетенций		
		Пороговый уровень («удовлетворительно»)	Продвинутый уровень (хорошо)	Высокий уровень («отлично»)
1	2	3	4	5
		<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять методы физико-математического моделирования для решения прикладных задач квантовой химии (оценка потенциалов ионизации, энергии когезии и т. д.); <p>Владеть (или Иметь опыт деятельности):</p> <ul style="list-style-type: none"> - навыкам работы с современными программными пакетами для численного квантово-механического моделирования взаимодействия атомов в молекуле; 	<p>товой механики и квантовой химии.</p> <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять методы физико-математического моделирования для решения прикладных задач квантовой химии (оценка потенциалов ионизации, энергии когезии и т. д.); - применять современное программное обеспечение для визуализации молекул. <p>Владеть (или Иметь опыт деятельности):</p> <ul style="list-style-type: none"> - навыкам работы с современными программными пакетами для численного квантово-механического моделирования взаимодействия атомов в молекуле; - навыками определения геометрических параметров молекул 	<p>ханики и квантовой химии;</p> <ul style="list-style-type: none"> - современные компьютерные технологии и типовые программные продукты для визуализации и численного расчета химических свойств атомов и молекул. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять методы физико-математического моделирования для решения прикладных задач квантовой химии (оценка потенциалов ионизации, энергии когезии и т. д.); - применять современное программное обеспечение для визуализации молекул; - применять современное программное обеспечение для численного расчета параметров молекул; <p>Владеть (или Иметь опыт деятельности):</p> <ul style="list-style-type: none"> - навыкам работы с современными программными пакетами для численного квантово-механического моделирования взаи-

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
			посредством применения современных компьютерных программ.	модействия атомов в молекуле; - навыками определения геометрических параметров молекул посредством применения современных компьютерных программ; - навыками построения атомных орбиталей посредством применения современных компьютерных программ.

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 основной профессиональной образовательной программы

Таблица 7.3 - Паспорт комплекта оценочных средств для текущего контроля успеваемости

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Код контролируемой компетенции (или её части)	Технология формирования	Оценочные средства		Описание шкал оценивания
				наименование	№№ заданий	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Введение. Предмет компьютерной химии	ПК-2.3	лекция, практическое занятие, лабораторная работа, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	1	Согласно табл. 7.2
				отчет о выполнении пр. раб.	2	
				тестовые задания	1	

2.	Атомные орбитали	ПК-2.3	лекция, практическое занятие, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	1	Согласно табл. 7.2
				тестовые задания	2	
3.	Методы Хартри-Фока и Кона-Шема	ПК-2.3	лекция, практическое занятие, лабораторная работа, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	2	Согласно табл. 7.2
				отчет о выполнении пр. раб.	3	
				тестовые задания	3	
4.	Детерминант Слейтера.	ПК-2.3	лекция, лабораторная работа, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	3	Согласно табл. 7.2
				тестовые задания	4	
5.	Химическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма.	ПК-2.3	лекция, практическое занятие, лабораторная работа, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	4	Согласно табл. 7.2
				отчет о выполнении пр. раб.	4	
				тестовые задания	5	
6.	Методы расчета молекул. Адиабатическое приближение.	ПК-2.3	лекция, практическое занятие, лабораторная работа, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	7	Согласно табл. 7.2
				отчет о выполнении пр. раб.	5	
				тестовые задания	6	
7.	Метод Хартри-Фока для молекул.	ПК-2.3	лекция, практическое занятие, лабораторная работа, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	5	Согласно табл. 7.2
				отчет о выполнении пр. раб.	6	
				тестовые задания	7	
8.	Методы теории функционала плотности	ПК-2.3	лекция, лабораторная работа,	отчет о выполнении лаб. раб.	6	Согласно табл. 7.2

			СРС	тестовые за- дания	8	
--	--	--	-----	-----------------------	---	--

Примеры типовых контрольных заданий для проведения текущего кон- троля успеваемости

Вопросы в тестовой форме по разделу «Методы Хартри-Фока и Кона-Шэма»

1. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-

Фока

Na
Cl₂
Cl
PF₅
NO
C₆H₆

2. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-

Фока

P₂
NO₂
SO₄²⁻
Al
HNO₃
C₆H₅

3. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-

Фока

B
B₂
Br₂
CH₃
C₂H₂
N₂O

4. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-

Фока

NO₂
Li
Na₂
NO₃⁻
CO
NaCl

5. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-

Фока

Cl
Cl₂
NaCl

Na₂

Na

C₂H₄

6. Истинные утверждения для метода Хартри (приближения независимых частиц)

гамильтониан можно представить как сумму операторов, каждый из которых зависит только от координат одного электрона

гамильтониан можно представить как сумму одно- и двухэлектронных операторов

не учитывается взаимодействие между электронами

не учитывается взаимодействие между ядром и электронами

не учитывается кинетическая энергия электронов

7. Истинные утверждения для метода Хартри-Фока

гамильтониан можно представить как сумму операторов, каждый из которых зависит только от координат одного электрона

гамильтониан можно представить как сумму одно- и двухэлектронных операторов

полная энергия атома $E = \sum_{i=1}^N e_i$, где e_i — энергии занятых орбиталей

полная энергия атома $E = \sum_{i=1}^N e_i$, где e_i — энергии всех орбиталей

полная энергия атома $E = \sum_i e_i$, где $e_i = e_j$ при любых i и j — энергии занятых орбиталей

полная энергия атома $E = \sum_i e_i - \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{1}{r_{ij}}$

8. Методом Хартри-Фока нельзя получить точные волновые функции и энергии атомов или молекул, т.к...

не учитывается электронная корреляция

электронная корреляция учитывается, но не полностью

используется метод самосогласованного поля, а не непосредственный учет межэлектронного взаимодействия

учитывается принцип Паули

не учитывается принцип Паули

волновая функция ищется как антисимметричная относительно перестановок электронов

9. В методе Хартри-Фока используется

теория возмущений

одноэлектронное приближение

взаимодействие электрона с усредненным полем

вариационный принцип

10. Принципиальное отличие метода Хартри-Фока от метода Хартри

учет антисимметричности волновой функции

учет электронного обмена

использование орбитального приближения

использование одноэлектронного приближения

Типовые задачи

1. Постройте угловую часть волновой функции в сферических координатах в ψ_{Maxima} для $l=2, m=0$.
2. Постройте радиальную часть волновой функции в сферических координатах в ψ_{Maxima} $n=0, l=0$.

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 зачета. Зачет проводится в виде бланкового и/или 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:

Для коммутирующих операторов A_1 и A_2 верно:

- 1) $[A_1, A_2]=0$
- 2) $[A_1, A_2]= [A_2, A_1]$
- 3) $A_1 f_1 + A_2 f_2 = A_1 A_2 f_1 f_2$
- 4) $A_1 A_2 f = A_2 A_1 f$
- 5) $A_1 f_1 A_2 f_2 = A_1 f_2 A_2 f_1$

Задание в открытой форме:

Сколько членов в нерелятивистском гамильтониане для иона H^+ при неподвижном ядре?

Задание на установление соответствия:

Оператор	Формула
1. Координата x	a) $-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r)$
2. Полная энергия	b) $\frac{\partial}{\partial x}$
3. Кинетическая энергия	c) $-i \frac{\partial}{\partial x}$
4. Импульс вдоль оси x	d) $-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$
	e) x

Компетентностно-ориентированная задача:

Спроектируйте двуслойную нанотрубку длиной 10 ангстрем. Диаметр внутренней нанотрубки равен 4,3 ангстрем, диаметр внешней – 6,5 ангстрем. Оптимизируйте её форму.

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 Обалльно-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

Форма контроля	Минимальный балл		Максимальный балл	
	балл	примечание	балл	примечание
1	2	3	4	5
Практическое занятие № 1 (Атом водорода. Атомные орбитали. Построение угловой части волновой функции в программе wxMaxima)	1	Выполнил, но «не защитил»	2	Выполнил и «защитил»
Практическое занятие № 2 (Построение радиальной части волновой функции в программе wxMaxima)	0,5	Выполнил, но «не защитил»	1	Выполнил и «защитил»
Практическое занятие № 3 (Метод Хартри)	1	Выполнил, но «не защитил»	2	Выполнил и «защитил»
Практическое занятие № 4 (Метод Хартри-Фока)	1	Выполнил, но «не защитил»	2	Выполнил и «защитил»
Практическое занятие № 5 (Приближение Хюккеля)	1	Выполнил, но «не защитил»	2	Выполнил и «защитил»
Практическое занятие № 6 (Метод МО ЛКБФ. Метод Рутана)	1	Выполнил, но «не защитил»	2	Выполнил и «защитил»
Лабораторная работа № 1 («Молекулярный редактор» Avogadro. Интерфейс)	0,5	Выполнил задание	1	Оформил отчет
Лабораторная работа № 2 (Построение пептида)	1	Выполнил задание	2	Оформил отчет
Лабораторная работа № 3 (Проектирование нанотрубок)	1	Выполнил задание	2	Оформил отчет
Лабораторная работа № 4 (Моделирование кристаллов)	1	Выполнил задание	2	Оформил отчет
Лабораторная работа № 5 (Моделирование электронной структуры молекулы H ₂ в Abinit)	1	Выполнил задание	2	Оформил отчет
Лабораторная работа № 6 (Электронная структура кристалли-	1	Выполнил задание	2	Оформил отчет

ческих систем в Abinit)				
Лабораторная работа № 7 (Определение элементного состава вещества)	1	Выполнил задание	2	Оформил отчет
СРС	12		24	
Итого	24		48	
Посещаемость	0		16	
Зачет	0		36	
Итого	24		100	

Для промежуточной аттестации обучающихся, проводимой в виде 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 –2балла,
- 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. Крашенинин В. И. 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. // Режим доступа –<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>

8.2 Дополнительная учебная литература

2. Веселов М. Г. Элементарная квантовая теория атомов и молекул [Электронный ресурс]: учебное пособие / М. Г. Веселов. - 2-е изд., доп. - М. : Гос. изд-во физико-математической лит., 1962. - 215 с. // Режим доступа - <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=211942>

3. Чертов А. Г. Задачник по физике [Текст] : учебное пособие / А. Г. Чертов, А. А. Воробьев. - 7-е изд., перераб. и доп. - М. : Физико-математической литературы, 2003. - 640 с.

4. Родионов А. А. Квантовая химия [Текст] : учебное пособие / А. А. Родионов; Юго-Западный государственный университет. - Курск : ЮЗГУ, 2011. - 246 с.

5. Родионов А. А. Квантовая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / А. А. Родионов; Юго-Западный государственный университет. - Курск : ЮЗГУ, 2011. - 246 с.

6. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебник для студентов вузов / Н. Ф. Степанов. - М. : Мир, 2001. - 519 с.
7. Цирельсон В. Г. Многоэлектронный атом [Текст] / В. Г. Цирельсон, М. Ф. Бобров. - М.: РХТУ, 2004. - 51 с.
8. Апостолова Е. С. Квантово-химическое описание реакций [Текст] / Е. С. Апостолова, А. И. Михайлюк, В. Г. Цирельсон. - М.: РХТУ, 1999. - 61 с.
9. Цирельсон В. Г. Квантовая химия молекул [Текст] / В. Г. Цирельсон, М. Ф. Бобров. - М.: РХТУ, 2000. – 83 с.
10. Цирельсон В. Г. Химическая связь и межмолекулярное взаимодействие [Текст]. - М.: РХТУ, 2004. – 108 с.
11. Минкин В. И. Теория строения молекул [Текст] / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - Ростов: Феникс, 1997. - 407 с.
12. Минкин В. И. Квантовая химия органических соединений [Текст] / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - М.: Химия, 1986. - 246 с.
13. Жидомиров Г. И. Квантовохимические расчеты магнитно-резонансных параметров [Текст] / Г. И. Жидомиров, П. В. Счастнев, Н. Д. Чувылкин. - Новосибирск: Наука, 1978. - 367 с.
14. Жидомиров Г. И. Прикладная квантовая химия [Текст] / Г. И. Жидомиров, А. А. Багатурьянц, И. А. Абронин. - М.: Химия, 1979. – 295 с.
15. Кларк Т. Компьютерная химия [Текст]. - М.: Мир, 1990. – 383 с.

8.3 Перечень методических указаний

1. Квантовая химия [Электронный ресурс]: методические указания к выполнению лабораторных работ для студентов направления подготовки 28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника» / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Кузько, А.Е. Кузько. – Курск: ЮЗГУ, 2017. - 46 с.
2. 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. – Курск: ЮЗГУ, 2017. - 21 с.
3. 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. – Курск: ЮЗГУ, 2017. - 13 с.

8.4 Другие учебно-методические материалы

Отраслевые научно-технические журналы в библиотеке университета:
Нанотехнологии: наука и производство

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

1. <http://www.strf.ru/> - Интернет- издание «Наука и технологии России – strf.ru»
2. <http://www.nanometer.ru/> -сайт "Нанометр"
3. <http://www.rusnano.com/> - Группа РОСНАНО
4. <http://thesaurus.rusnano.com/> - Словарь нанотехнологических и связанных с нанотехнологиями терминов.
5. <http://biblioclub.ru> - Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека онлайн».

10 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Основными видами аудиторной работы студента при изучении дисциплины «Квантовая химия» являются лекции, практические и лабораторные занятия. Студент не имеет 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 наиболее важных тем или разделов дисциплины завершают лабораторные занятия, 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.

Лабораторному 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 или по его заданию студенты готовят рефераты по отдельным темам дисциплины, выступают на занятиях с докладами. Основу докладов составляет, как правило, содержание подготовленных студентами рефератов.

Качество учебной работы студентов преподаватель оценивает по результатам тестирования, собеседования, защиты отчетов по лабораторным работам, а также по результатам докладов.

Преподаватель уже на первых занятиях объясняет студентам, какие формы обучения следует использовать при самостоятельном изучении дисциплины «Квантовая химия»: конспектирование учебной литературы и лекции, составление словарей понятий и терминов и т. п.

В процессе обучения преподаватели используют активные формы работы со студентами: чтение лекций, привлечение студентов к творческому процессу на лекциях, отработку студентами пропущенных лекций, 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 закрепления 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 освоению учебного материала. В случае необходимости студенты обращаются за консультацией к преподавателю по вопросам дисциплины «Квантовая химия» с целью освоения и закрепления компетенций.

Основная цель самостоятельной работы студента при изучении дисциплины «Квантовая химия» - 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)
 wxMaxima – программа для построения графиков (свободно распр. ПО).
 Avogadro - визуализатор и редактор молекул (свободно распр. ПО).
 ABINIT- это программный пакет для расчета свойств химических соединений на основе теории функционала плотности (DFT).

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

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и лаборатории кафедры нанотехнологии и инженерной физики, оснащенные учебной мебелью: столы, стулья для обучающихся; стол, стул для преподавателя; доска. Экран настенный 150x150, мультимедийный проектор MW533. Мобильный ПК ACER"Aspire 5720-102G16Mi (32032). Лабораторная установка "Рентгеновская люминесценция". Персональные компьютеры ПК S1155 Intel i3 (IntelRH67/i3-2130 3/40GHz/DDR III-4Gb/HDD SATA III 320Gb/DVD+R/RW/450Wt/клавиатура, мышь/23"LCD Samsung B2330(ZKFFV)), год выпуска 2011, 15 шт.

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).

14 Лист дополнений и изменений, внесенных в рабочую программу дисциплины

Номер изменения	Номера страниц				Всего страниц	Дата	Основание для изменения и подпись лица, проводившего изменения
	измененных	замененных	аннулированных	новых			