

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ряполов Петр Алексеевич

Должность: декан ЕНФ

Дата подписания: 04.10.2024 13:29:30

Уникальный программный ключ:

efd3ec9bd183f7649d0e3a33c730c6662946c7c99039b2b268921fde408c1fb6

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Строение вещества»

Цель преподавания дисциплины:

привить студентам - химикам современные научные представления о строении вещества в газовом и конденсированном состоянии, дать представление о современных экспериментальных методах исследования строения вещества во всех четырех фазовых состояниях.

Задачи изучения учебной дисциплины:

является использование ЭВМ для обработки и графического представления полученных результатов; обобщенное научное представление о Природе - физическая картина мира.

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

ОПК-4.1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности

ОПК-4.3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений

Разделы дисциплины:

- корпускулярно-волновой дуализм вещества;
- многоэлектронные атомы;
- молекулы. Приближённое описание молекулярной орбитали в методе МО ЛКАО;
- теория химической связи;
- спектральные методы исследования строения и энергетических состояний молекул;
- элементы химической термодинамики.

• МИНОБРНАУКИ РОССИИ

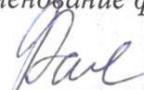
Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан факультета

Естественно-научного

(наименование ф-та полностью)



П.А. РЯПОЛОВ

(подпись, инициалы, фамилия)

« 31 » 08 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Строение вещества

(наименование дисциплины)

ОПОП ВО

04.03.01 Химия

Шифр и наименование направления подготовки (специальности)

Органическая и биоорганическая химия

наименование направленности (профиля)

форма обучения

очная

(очная, очно-заочная, заочная)

Курск – 2020

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с ФГОС ВО бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Наименование «Химия», направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Учёным советом университета (протокол №7 «25» февраля 2020 г).

Рабочая программа дисциплины обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе для обучения студентов по ОПОП ВО 04.03.01 Наименование «Химия», направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия» на заседании кафедры НТОиПФ «10» 07 2020 г. № 7
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Кузько А.Е.
Разработчик программы: _____
к.ф.м.н. _____ Красных П. Л.
(учёная степень и звание, Ф.И.О.)

Согласовано: на заседании кафедры фундаментальной химии и химической технологии «26» 06 2020г. № 13

Зав. кафедрой _____ Кувардин Н.В.
(название кафедры, дата, номер протокола, подпись, действующего кафедрой, если название протокола не основывается на одной дисциплине, а также при необходимости руковоление или других структурных подразделениях)

Директор научной библиотеки _____ Макаровская В.Г.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Наименование «Химия», направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Учёным советом университета (протокол №7 «25» февраля 2020 г).

на заседании кафедры ИМОиПФ №1 31.08.21
(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 04.03.01 Наименование «Химия», направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Учёным советом университета (протокол №7 «28» февраля 2020 г).

на заседании кафедры ИМОиПФ №1 31 августа 2022
(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 04.03.01 Наименование «Химия», направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Учёным советом университета (протокол №7 «25» февраля 2020 г).

на заседании кафедры ИМОиПФ №1 31 августа 2023
(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 04.03.01 химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета (протокол № 9 от «7» 09 2024), на заседании кафедры

НМО и ПЭ

(наименование, протокол №, дата)

Зав. кафедрой _____



Подпись

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета (протокол № __ от «__» __ 20__), на заседании кафедры

(наименование, протокол №, дата)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета (протокол № __ от «__» __ 20__), на заседании кафедры

(наименование, протокол №, дата)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета (протокол № __ от «__» __ 20__), на заседании кафедры

(наименование, протокол №, дата)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета (протокол № __ от «__» __ 20__), на заседании кафедры

(наименование, протокол №, дата)

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета (протокол № __ от «__» __ 20__), на заседании кафедры

(наименование, протокол №, дата)

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 деятель-

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		
			ности): Приемами, методиками идентификации основного вещества смеси, определения органических 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» относится части дисциплин по выбору учебного плана 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 (всего)	72,3
в том числе (по видам учебных занятий):	
лекции	36
лабораторные занятия	не предусмотрено
практические занятия	36
экзамен	0,3
зачет	не предусмотрено
курсовая работа (проект)	не предусмотрено
расчетно-графическая (контрольная) работа	не предусмотрено
Аудиторная работа (всего):	36
в том числе:	
лекции	36
лабораторные занятия	не предусмотрено
практические занятия	18
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	36
Контроль/экз (подготовка к экзамену)	36

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 (по неделям семестра)	Компетенции
		Лек., час	№ лаб.	№ пр.			
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Введение	2			У-1, У-2, У-3-5	К	ОПК-2 ПК-5
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	У-1, У-2, У-3-5	К	ОПК-2 ПК-5
8	Метод Хартри-Фока Роотхана.	2					
9	Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.						
10	Метод молекулярных орбиталей.	2		5	У-1, У-2, У-3-5	К	ОПК-2 ПК-5
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 состояния твердых тел.	2		8			
16	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.	2		8	К		

17	Метод конфигурационного взаимодействия	2		9	У-1, У-2, У-3-5		ОПК-2 ПК-5
18	Полуэмпирические методы квантовой хими	2		9	У-1, У-2, У-3-5		ОПК-2 ПК-5

К - контрольная работа,

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	4
1	Квантово механическое рассмотрение атома водорода.	2 неделя	4
2	Гармонический осциллятор	6 неделя	4
3	Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи	8 неделя	4
4	Метод Хартри-Фока Рoothана.	12 неделя	4
5	Метод молекулярных орбиталей.	14 неделя	4
6	Движение ядер	15 неделя	4
7	Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону	16 неделя	4
8	Электронные, колебательные состояния твердых тел.	17 неделя	4
9	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю	18 неделя	4
Итого			36

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 экзаменам;
 - методических указаний к выполнению лабораторных и практических работ и т.д.

Типографией университета:

- помощь авторам в подготовке и издании 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 общепрофессиональных и профессиональных компетенций обучающихся.

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

№	Наименование раздела (лекции, лабораторного занятия)	Используемые интерактивные технологии	Объем, час.
1	Лекция «Квантово механическое рассмотрение атома водорода»	<i>Решение ситуационных задач</i>	2
2	Лекция «Строение атома».	<i>Решение ситуационных задач</i>	2
3	Практическое занятие «Адиабатическое приближение для модельной двумерной задачи»	<i>Решение ситуационных задач</i>	2
4	Практическое занятие «Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы»	<i>Решение ситуационных задач</i>	2
5	Лекция «Неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц.»	<i>Учебная дискуссия.</i>	2
	Практическое занятие «Метод молекулярных орбиталей»	<i>Решение ситуационных задач</i>	2

	Практическое занятие «Электронные, колебательные состояния твердых тел»	<i>Решение ситуационных задач</i>	2
6	Лекция «Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.»	<i>Учебная дискуссия.</i>	2
	итого		16

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 науки, высокого профессионализма ученых, их ответственности за результаты и последствия деятельности для природы, человека и общества; примеры подлинной нравственности людей, причастных к развитию науки;

– применение технологий, форм и методов преподавания дисциплины, имеющих высокий воспитательный эффект за счет создания условий для взаимодействия обучающихся с преподавателем, другими обучающимися, (разбор конкретных ситуаций);

– 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 – качества, 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

Код и содержание компетенции	Этапы формирования компетенций и дисциплины (модули), при которых формируется данная компетенция		
	Начальный	Основной	Завершающий
1	2	3	4
владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2);	Аналитическая химия	Аналитическая химия, Квантовая химия	Высокомолекулярные соединения, Основы химии гетероциклических соединений,
способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5);	Математика,	Математика, Физическая химия, Математические методы в химии, Квантовая химия	Физическая химия, Информационные системы в химии

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 (или ее части)	Показатели оценивания компетенций	Уровни сформированности компетенции		
		Пороговый (удовлетворительный)	Продвинутый (хорошо)	Высокий (отлично)
	2	3	4	5
ОПК-2/ основной	<p>1. Доля освоенных обучающимся знаний, умений, навыков от общего объема ЗУН, установленные в п. 1.3РПД</p> <p>2. Качество освоенных обучающимся знаний, умений, навыков</p> <p>3. Умение применять знания, умения, навыки в типовых и нестандартных ситуациях</p>	<p>Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ</p> <p>Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам</p> <p>Владеть: базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов</p>	<p>Знать: методы получения, идентификации и исследования свойств веществ (материалов) стандартные методы обработки результатов эксперимента</p> <p>Уметь: проводить многостадийный синтез выбирать методы диагностики веществ и материалов, проводить стандартные измерения обрабатывать результаты эксперимента</p> <p>Владеть: навыками проведения эксперимента и методами обработки его результатов</p>	<p>Знать: методы планирования эксперимента методы построения моделей изучаемых объектов</p> <p>Уметь: планировать эксперимент на основе анализа литературных данных анализировать и обобщать результаты эксперимента, формулировать выводы</p> <p>Владеть: навыками планирования, анализа и обобщения результатов эксперимента</p>
ПК-5/ основной		<p>Знать: типы информационных химических ресурсов, особенности структурной химической информации, методы поиска научной химической информации</p> <p>Уметь: изображать структурные формулы сложных органических соединений с помощью различных структурно-графических химических редакторов пользоваться расчётными программами, программами анализа и визуализации результатов расчёта</p>	<p>Знать: основные методы молекулярных расчётов, основные приближения, применяющиеся в расчётных методах, границы применимости расчётных схем. основные ресурсы сети Интернет, содержащие химическую информацию.</p> <p>Уметь: использовать информационные ресурсы для создания новых объектов с полезными свойствами</p>	<p>Знать: методы эффективного поиска научной и технической информации в сети Интернет и в наиболее распространённых специализированных базах данных, в том числе, в полнотекстовых базах научных публикаций</p> <p>Уметь: использовать специализированное программное обеспечение для проведения теоретических расчётов и обработки экспериментальных данных при решении задач профессиональной сферы</p>

		<p>Владеть: приемами работы со структурно-графическими химическими редакторами и химическими базами данных</p> <p>методами работы в структурных банках соединений с целью постановки задачи, решения и представления результатов исследовательских задач</p>	<p>Владеть: навыками постановки расчётной задачи по определению физико-химических, электронных свойств и геометрии простейших органических молекул</p> <p>навыками работы с компьютером как средством управления информацией, работы с информацией в глобальных компьютерных сетях.</p>	<p>деятельности с учётом основных требований информационно-коммуникационных технологий и информационной безопасности</p> <p>Владеть: языками программирования, основными навыками и опытом разработки специализированных программ для решения конкретных задач профессиональной сферы деятельности, опытом представления результатов профессиональной деятельности в виде статей, рефератов и т.д.</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 основной профессиональной 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	ОПК-2 ПК-5	лекции, СРС	контрольные вопросы	1-4	Согласно табл. 7.2
2	Квантово механическое рассмотрение атома водорода	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные	5-8	Согласно табл. 7.2
3	Строение атома.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	9-12	Согласно табл. 7.2
4	Гармонический осциллятор	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	13-16	Согласно табл. 7.2
5	Общие принципы, касающиеся решения молекулярных задач.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контрольные вопросы	17-20	Согласно табл. 7.2
6	Адиабатическое приближение для модель-	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия,	контрольные	21-24	Согласно табл. 7.2

	ной двумерной задачи		СРС	вопросы		
7	Одноэлектронное приближение	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	25-28	Согласно табл. 7.2
8	Метод Хартри-Фока Роот-хана.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные	29-32	Согласно табл. 7.2
9	Расширенный метод Хюккеля и простейший метод МО, их типы.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	33-36	Согласно табл. 7.2
10	Метод молекулярных орбиталей.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	37-40	Согласно табл. 7.2
11	Движение ядер.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	41-44	Согласно табл. 7.2
12	Химическая связь.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контрольн ые вопросы	45-48	Согласно табл. 7.2
13	Молекула водорода по Гайтлеру и Лондону	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	49-52	Согласно табл. 7.2
14	Неразличимость (тождественность) одинаковых микрочастиц.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные	53-56	Согласно табл. 7.2
15	Электронные, колебательные состояния твердых тел.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	57-60	Согласно табл. 7.2
16	Внутренняя энергия и теплоемкость по Дебаю.	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	61-64	Согласно табл. 7.2
17	Метод конфигурационного взаимодействия	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контроль- ные вопро- сы	65-68	Согласно табл. 7.2
18	Полуэмпирические методы квантовой хими	ОПК-2 ПК-5	лекции, практ. занятия, СРС	контрольн ые вопросы	69-72	Согласно табл. 7.2

Примеры типовых контрольных заданий для текущего контроля

1. Квантовая химия и квантовая механика молекул как часть квантовой теории. 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 и валентность. Квантовые числа. Принцип Паули. Электронные оболочки. Построение периодической системы элементов Д.И.Менделеева. Квантовые числа и термы многоэлектронных атомов. Валентность с точки зрения квантовой химии.

4. Многоэлектронные атомы. Приближение независимых электронов. Метод самосогласованного поля Хартри. Определитель Слэтера. Волновые функции двухэлектронных систем.

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 «О балльно-рейтинговой системе оценки качества освоения образовательных программ»;

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

Для *текущего контроля* 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 Метод Хартри-Фока Рoothана.	1	Выполнил, доля правильных ответов менее 50 %	2	Выполнил, доля 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	2	Выполнил, доля правильных ответов

		менее 50 %		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 компетентностно-ориентированной 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 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 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, А. Д. Бурыкина. - Электрон. текстовые дан. (1077 КБ). - 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, О. Ю. Черных. - Электрон. текстовые дан. (2996 КБ). - 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. - 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, 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 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 уси-

лий 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 «Строение вещества» 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 Лист дополнений и изменений, внесенных в рабочую программу

Номер изменения	Номера страниц				Всего страниц	Дата	Основание для изменения и подпись лица, проводившего изменения
	изменённых	заменённых	аннулированных	новых			