Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ряполов Петр Алексеевич
Должность: декан ЕНФ
Дата подписания: 07.09.2026 11:56:03
Уникальный программный ключ:
efd3ecdbd183f7649d0e3a33c230c6662946c7c99039b2b268921fde408c1fb6

Аннотация к рабочей программе

дисциплины «Расчетные методы в квантовой химии»

Цель преподавания дисциплины: формирование у студентов знаний об основных приложениях квантовой механики к химических 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

Редактор молекул Avogadro. Интерфейс и приемы работы. Разделение электронного и ядерного движений в молекулах. Метод молекулярных орбиталей. Метод Хартри-Фока. Метод Хартри-Фока-Ругана. Наборы базисных функций. Электронная плотность, порядки связей, заряды на атомах, поляризуемость. Молекула водорода. Теория функционала плотности. Программный пакет для расчётов в рамках метода функционала плотности ABINIT. Ядерный магнитный резонанс.

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:
Декан факультета
естественно-научного
(наименование ф-та полностью)

_____ П.А. Ряполов
(подпись, инициалы, фамилия)

«31» 08 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Расчетные методы в квантовой химии
(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» 31.08 2019 г.
(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 НМО и ПФ 31.08.2020 № 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 НМО и ПФ 31.08.2021 № 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 НМО и ПФ № 1 от 31.08.2022
(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 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 МНиР N1 от 31.08.23
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой / Лидин С.Ф.

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 № 9 «25» 06 2021 г.
на заседании кафедры МНиР N1 от 30.08.24
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой / Лидин С.Ф.

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 «28» 02 2022 г.
на заседании кафедры МНиР N1 от 29.08.25
(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой / Лидин С.Ф.

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 № 8 «24» 02 2026 г.
на заседании кафедры МНиР N1 от 31.08.26
(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 химических 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

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-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	***Знать:*** - 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. ***Уметь:*** - 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*		
			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; ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** 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 «Расчетные методы в квантовой химии» 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	Редактор молекул Avogadro. Интерфейс и приемы работы	Основное окно программы. Инструмент рисования. Инструмент выделения. Инструмент навигация. Инструмент установления центральной связи. Инструмент манипуляции. Инструмент автоматического вращения. Инструмент автоматической оптимизации. Инструмент для измерения. Проектирование нанотрубок. Построение пептида. Моделирование кристаллов.
2	Разделение электронного и ядерного движений в молекулах	Стационарное уравнение Шрёдингера, определяющие состояние молекулы в молекулярной системе. Оператор Гамильтона молекулы. Оператор Гамильтона, содержащий дифференцирование только по электронным координатам. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронная энергия.

		Электронные волновые функции.
3.	Метод молекулярных орбиталей. Метод Хартри-Фока. Метод Хартри-Фока-Ругана	Атомные и молекулярные орбитали. Метод Хартри-Фока для атомов. Детерминант Слейтера. Уравнения Рутана. Метод Хартри-Фока-Ругана. Процедура самосогласования. Метод МО ЛКАО.
4	Наборы базисных функции	Молекулярные орбители как разложение в ряд по атомным орбиталям. Слэтеровский тип АО. Гаусовский тип АО. Контрактированные (сгруппированные) базисные функции. Минимальный базисный набор. Расширенные базисные наборы.
5	Электронная плотность, порядки связей, заряды на атомах, поляризуемость	Результирующая плотность вероятности нахождения электрона. Анализ заселенностей по Малликену. «Заряд на атоме». Расчет поляризуемости молекулы.
6	Молекула водорода.	Электронный гамильтониан молекулы водорода. Волновая функция основного состояния молекулы водорода. Алгоритм расчета энергии основного состояния молекулы водорода.
7	Теория функционала плотности. Программный пакет для расчётов в рамках метода функционала плотности ABINIT.	Основная лемма Хоэнберга-Кона, лежащая в основе методов функционала плотности. Вариационный принцип Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма. Приближение локальной плотности. Квазилокальное приближение. Гибридные функционалы. Работа в программном пакете ABINIT.
8	Ядерный магнитный резонанс.	Определение структуры молекулы с помощью ЯМР. Алгоритм расчета ЯМР.

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	Редактор молекул Avogadro. Интерфейс и приемы работы	2	1	2	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ЛР-2 ПР-2 Т-2	ПК-2.3
2	Разделение электронного и ядерного движений в молекулах	2		1	У-1, МУ-2, МУ-3	ПР-4 Т-4	ПК-2.3
3	Метод молекулярных орбиталей. Метод Хартри-Фока. Метод Хартри-Фока-Ругана	2	2	3	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ПР-6 ЛР-6 Т-6	ПК-2.3
4	Наборы базисных функции	2	3		У-1, МУ-1, МУ-3	ЛР-8 Т-8	ПК-2.3

5	Электронная плотность, порядки связей, заряды на атомах, поляризуемость	2	4	4	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ПР-10 ЛР-10 Т-10	ПК-2.3
6	Молекула водорода.	2	7	5	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ПР-12 ЛР-12 Т-12	ПК-2.3
7	Теория функционала плотности. Программный пакет для расчётов в рамках метода функционала плотности ABINIT.	4	5	6	У-1, МУ-1, МУ-2, МУ-3	ПР-14 ЛР-14 Т-14	ПК-2.3
8	Ядерный магнитный резонанс.	2	6		У-1, МУ-1, МУ-3	ЛР-17 Т-17	ПК-2.3

ПР – проверка выполнения практической работы, ЛР – проверка выполнения 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 – Самостоятельнаяработа студентов

№ раздела (темы)	Наименование раздела(темы) дисциплины	Срок выполнения	Время, затрачиваемое на выполнение СРС, час.
1	2	3	4
1	Редактор молекул Avogadro. Интерфейс и приемы работы	2 неделя	6
2	Разделение электронного и ядерного движений в молекулах	4 неделя	6
3	Метод молекулярных орбиталей. Метод Хартри-Фока. Метод Хартри-Фока-Ругана	6 неделя	8
4	Наборы базисных функции	8 неделя	6
5	Электронная плотность, порядки связей, заряды на атомах, поляризуемость	10 неделя	6
6	Молекула водорода	12 неделя	6
7	Теория функционала плотности. Программный пакет для расчётов в рамках метода функционала плотности ABINIT	14 неделя	8
8	Ядерный магнитный резонанс	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 компетентностного 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.

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; Уметь: - применять методы физико-математического моделирования для решения прикладных задач квантовой химии (оценка потенциалов ионизации, энергии когезии и т. д.); Владеть (или Иметь опыт деятельности): - навыкам работы с современными программными пакетами для численного квантово-механического моделирования взаимодействия атомов в молекуле;	Знать: - вариационные принципы и методы физико-математического моделирования в квантовой химии; - фундаментальные законы квантовой механики и квантовой химии. Уметь: - 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. Владеть (или Иметь опыт дея-	Знать: - 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. Уметь: - применять методы физико-математического моделирования для решения прикладных задач квантовой химии (оценка потенциалов ионизации, энергии когезии и т. д.); - применять современное программное

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
			тельности): - 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.	обеспечение для визуализации молекул; - применять современное программное обеспечение для численного расчета параметров молекул; Владеть (или Иметь опыт деятельности): - 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.

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.	Редактор молекул Avogadro. Интерфейс и приемы работы	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.	Разделение электронного и ядерного движений в молекулах	ПК-2.3	лекция, практическое занятие, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	1	Согласно табл. 7.2
				тестовые задания	2	
3.	Метод молекулярных орбиталей. Метод Хартри-Фока. Метод Хартри-Фока-Ругана	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.	Наборы базисных функции	ПК-2.3	лекция, лабораторная работа, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	3	Согласно табл. 7.2
				тестовые задания	4	
5.	Электронная плотность, порядки связей, заряды на атомах, поляризуемость	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.	Молекула водорода	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.	Теория функционала плотности. Программный пакет для расчётов в рамках метода функционала плотности ABINIT.	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.	Ядерный магнитный резонанс.	ПК-2.3	лекция, лабораторная работа, СРС	отчет о выполнении лаб. раб.	6	Согласно табл. 7.2
				тестовые задания	8	

Примеры типовых контрольных заданий для проведения текущего контроля успеваемости

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

1. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока

Na
Cl_2
Cl
PF_5
NO
C_6H_6

2. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока

P_2
NO_2
SO_4^{2-}
Al
HNO_3
C_6H_5

3. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока

B
B_2
Br_2
CH_3
C_2H_2
N_2O

4. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока

NO_2
Li
Na_2
NO_3^-
CO
NaCl

5. Системы, которые можно рассчитывать ограниченным методом Хартри-Фока

Cl
Cl_2
NaCl
Na_2
Na
C_2H_4

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 $E=Ne_i$, 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 wxMaxima для l=2, m=0.
2. Постройте радиальную часть волновой функции в сферических координатах в wxMaxima 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 А1 и А2 верно:

1) $[A_1, A_2]=0$
2) $[A_1, A_2]= [A_2, A_1]$
3) $A_1f_1+A_2f_2= A_1A_2f_1f_2$
4) $A_1A_2f = A_2A_1f$
5) $A_1f_1A_2f_2= A_1f_2A_2f_1$

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 О балльно-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 кристаллических систем в Abinit)	1	Выполнил задание	2	Оформил отчет
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. Компьютерная 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. Компьютерная 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. Компьютерная 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 «Расчетные методы в квантовой химии» 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 «Расчетные методы в квантовой химии»: 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 немыслима 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 «Расчетные методы в квантовой химии» с целью освоения и закрепления компетенций.

Основная цель самостоятельной работы студента при изучении дисциплины «Расчетные методы в квантовой химии» - 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 нано-технологии и инженерной физики, оснащенные учебной мебелью: столы, стулья для обучающих-ся; стол, стул для преподавателя; доска. Экран настенный 150х150, мульдимедийный проектор MW533. Мобильный ПК ACER"Aspire 5720-102G16Mi (32032). Персональные компьютеры ПК S1155 Intel i3 (IntelRH67/i3-2130 3/40GHz/DDR III-4Gb/HDD SATA III 320Gb/DVD+R/RW/450Bt/клавиатура, мышь/23”LCD Samsung B2330(ZKFV)), 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 такжесурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков. Текущий контроль успеваемости осуществляется в письменной форме: обучающийся письменноотвечает 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, но-

утбук 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
	изменных	заменен-ных	аннулирован-ных	новых			