

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина»
Институт естествознания
Кафедра химии

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института



Е. В. Скрипникова
«22» июня 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

по дисциплине Б1.В.3 Квантовая химия

Направление подготовки/специальность: 04.03.01 - Химия

Профиль/направленность/специализация: Химия твёрдого тела и химия материалов

Уровень высшего образования: бакалавриат

Квалификация: Бакалавр

год набора: 2023

Тамбов, 2023

Автор программы:

Кандидат химических наук, Балыбин Дмитрий Викторович

Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 - Химия (уровень бакалавриата) (приказ Министерства образования и науки РФ от «17» июля 2017 г. № 671).

Рабочая программа принята на заседании Кафедры химии «15» июня 2023 г. Протокол № 8

Рассмотрена и одобрена на заседании Ученого совета Института естествознания, Протокол от «22» июня 2023 г. № 10.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|----|
| 1. Цели и задачи дисциплины..... | 4 |
| 2. Место дисциплины в структуре ОП Бакалавриата..... | 5 |
| 3. Объем и содержание дисциплины..... | 5 |
| 4. Контроль знаний обучающихся и типовые оценочные средства..... | 9 |
| 5. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)..... | 24 |
| 6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины..... | 26 |
| 7. Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы..... | 26 |

1. Цели и задачи дисциплины

1.1 Цель дисциплины – формирование компетенций:

ПК-5 Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований

1.2 Типы задач профессиональной деятельности, к которым готовятся обучающиеся в рамках освоения дисциплины:

- научно-исследовательский
- технологический

1.3 Дисциплина ориентирована на подготовку обучающихся к профессиональной деятельности в сферах: 26 Химическое, химико-технологическое производство (в сфере оптимизации существующих и разработки новых технологий, методов и методик получения и анализа продукции, в сфере контроля качества сырья, полуфабрикатов и готовой продукции, в сфере паспортизации и сертификации продукции), 40 Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере науднотехнических, опытно-конструкторских разработок и внедрения химической продукции различного назначения, в сфере метрологии сертификации и технического контроля качества продукции)

1.4 В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть сформированы:

| Обобщенные трудовые функции / трудовые функции / трудовые или профессиональные действия (при наличии профстандарта) | Код и наименование компетенции ФГОС ВО, необходимой для формирования трудового или профессионального действия | Индикаторы достижения компетенций |
|---|--|--|
| - А Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок по отдельным разделам темы - Сбор, обработка, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований в соответствующей области знаний | ПК-5 Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований | Использует расчетные методы квантовой химии, с применением современных цифровых технологий, для решения различных практических задач |

1.5 Согласование междисциплинарных связей дисциплин, обеспечивающих освоение компетенций:

ПК-5 Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований

| № п/п | Наименование дисциплин, определяющих междисциплинарные связи | Форма обучения | | | | | |
|-------|--|-----------------|---|---|---|---|---|
| | | Очная (семестр) | | | | | |
| | | 2 | 3 | 4 | 5 | 7 | 8 |
| 1 | Актуальные направления современной химии | + | | | | | |
| 2 | Дисперсные системы | | | | | + | |
| 3 | Коллоидно-химические методы защиты окружающей среды | | | | | + | |

| | | | | | | | |
|---|-----------------------------|--|---|---|---|---|---|
| 4 | Кристаллохимия | | | | + | | |
| 5 | Методика преподавания химии | | | | | + | |
| 6 | Преддипломная практика | | | | | | + |
| 7 | Строение вещества | | + | + | | | |

2. Место дисциплины в структуре ОП бакалавриата:

Дисциплина «Квантовая химия» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, учебного плана ОП по направлению подготовки 04.03.01 - Химия.

Дисциплина «Квантовая химия» изучается в 3 семестре.

3. Объем и содержание дисциплины

3.1. Объем дисциплины: 3 з.е.

Очная: 3 з.е.

| Вид учебной работы | Очная (всего часов) |
|--------------------------------------|------------------------|
| Общая трудоёмкость дисциплины | 108 |
| Контактная работа | 80 |
| Лекции (Лекции) | 32 |
| Практические (Практ. раб.) | 48 |
| Самостоятельная работа (СР) | 28 |
| Зачет | - |

3.2. Содержание курса:

| № темы | Название раздела/темы | Вид учебной работы, час. | | | Формы текущего контроля |
|-----------|--|-----------------------------|--------------------|----|---|
| | | Лек ции | Пра кт. раб. | СР | |
| | | О | О | О | |
| 3 семестр | | | | | |
| 1 | Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности | 6 | 8 | 4 | Реферат; работа на семинаре |
| 2 | Основы квантовой механики. Операторы квантовой механики. Расчеты с применение цифровых инструментов. | 6 | 6 | 4 | работа на семинаре; Реферат; Расчёты с применением цифровых инструментов (программа Maple) |

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|--|
| 3 | Собственные значения и собственные функции некоторых операторов квантовой механики. | 4 | 6 | 4 | работа на семинаре; Реферат |
| 4 | Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле. Расчет с применением цифровых инструментов | 4 | 6 | 4 | Реферат; работа на семинаре; коллоквиум; Расчёты с применением цифровых инструментов (программа Mathcad) |
| 5 | Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями | 4 | 6 | 4 | работа на семинаре; Реферат |
| 6 | Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные системы. | 4 | 8 | 4 | Реферат; работа на семинаре |
| 7 | Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. Корреляция электронов | 4 | 8 | 4 | работа на семинаре; Реферат; коллоквиум |

Тема 1. Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности (ПК-5)

Лекция.

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энергия, импульс, момент импульса. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона. Функция Гамильтона.
2. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая закономерность в квантовой механике.

Практическое занятие.

1. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Функция распределения. Коэффициент нормировки.
2. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.

Задания для самостоятельной работы.

1. Одномерная модель свободной частицы. Трехмерное описание свободной частицы.
2. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Тема 2. Основы квантовой механики. Операторы квантовой механики. Расчеты с применением цифровых инструментов. (ПК-5)

Лекция.

1. Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Оператор кинетической энергии T . Оператор момента импульса M . Оператор квадрата момента импульса M^2 . Оператор Гамильтона (гамильтониан) H точки. Гамильтониан системы частиц. Расчет спектра и волновых функций квантового осциллятора в программе Maple.
2. Оператор спина. Основные законы квантовой механики. Статистический смысл волновой функции. Свойства волновой функции. Вычисление вероятностей результатов измерения. Пример расчета гармонического осциллятора в программе Maple.
3. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин. Соотношение неопределенностей. Координата x и соответствующий ей импульс p_x .

Практическое занятие.

1. Вычисление коммутаторов операторов.
2. Рассмотреть квантовый гармонический осциллятор, с частицей массы m_e , совершающей одномерные колебания. Все расчеты проводить в атомных единицах без указания размерности в коде программы Maple, при этом принимается: $e = m_e = \hbar = 1$.

Задания для самостоятельной работы.

1. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
2. Матричная форма уравнения.
3. Тест для самоподготовки «Математический аппарат»
<https://urait.ru/quiz/run-test/4957F15C-7165-4BBF-859D-D2F888F13CB6/B51FCA01-BF11-4B48-A661-10B0F050A6BA>
4. Просмотр и конспектирование видео -лекции «Полуэмпирические методы»
<https://teach-in.ru/lecture/04-24-Novakovskaya>

Тема 3. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой механики. (ПК-5)

Лекция.

1. Проекция импульса. Импульс. Проекция момента импульса. Квадрат момента импульса. Кинетическая энергия.
2. Спин электрона (оператор). Спин электрона (собственные функции).
3. Полный момент импульса.

Практическое занятие.

1. Вычисление коммутаторов операторов спина.
2. Определение линейности и эрмитовости импульса и спина

Задания для самостоятельной работы.

1. Представление операторов спина в матричной форме. Свойства матриц.
2. Вычисление коммутаторов моментов импульса.

Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле. Расчет с применением цифровых инструментов (ПК-5)

Лекция.

1. Вводные замечания. Одномерная модель свободной частицы. Трехмерное описание свободной частицы. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Одномерный потенциальный барьер. Расчет волновых функций и спектра трехмерного осциллятора.

2. Уравнение Шредингера для частицы в центральном поле. Движение электрона в кулоновском поле ядра. Формы электронных облаков в кулоновском поле ядра.

3. Просмотр и конспектирование видео -лекции «Метод МО ЛКАО»
<https://teach-in.ru/lecture/04-03-Novakovskaya>

Практическое занятие.

Решение заданий с применением цифровых инструментов- компьютерной программы Mathcad

1. Решение уравнения Шрёдингера для одномерной модели в программе Mathcad.
2. Получить спектр и волновые функции гармонического осциллятора. Вычислить квантовую и классическую плотности вероятности обнаружения частицы в основном и возбужденных состояниях осциллятора. Построить графики в программе Maple.

Задания для самостоятельной работы.

1. Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода.
2. Определение термов
3. Тестирование для самоконтроля по теме :
 - «Решение уравнения Шредингера для простейших задач» (Умное тестирование Юрайт)
<https://urait.ru/quiz/run-test/70EE0A81-5C2A-4246-B464-106D304A26D3/11FC6B70-BDD8-4A64-BF4F-0BF3687E333D>
 - «Приближенные методы решения уравнения Шредингера»
<https://urait.ru/quiz/run-test/D80F4093-D764-4CD5-94A8-EF14B9BD33A5/F45F3E30-DA1A-4C97-BEBE-2CF61D6B5252>

Тема 5. Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями (ПК-5)

Лекция.

1. Сущность метода теории возмущений. Возмущение в отсутствие вырождения невозмущенной задачи.
2. Возмущение при наличии вырождения невозмущенного состояния. Расщепление энергетических уровней атома водорода в электрическом поле.
3. Квантовые переходы под влияние световой волны.

Практическое занятие.

1. Периодическая система элементов.
2. Линейный вариационный метод. Корреляционные эффекты.

Задания для самостоятельной работы.

1. Нестационарная теория возмущений. Явление квантового перехода.
2. Правила отбора для электронов в атоме. Интеркомбинационный запрет.

Тема 6. Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные системы. (ПК-5)

Лекция.

1. Моменты системы частиц. Разделение движения ядер и электронов в молекулах. Вариационный принцип. Самосогласованное поле.
2. Антисимметризация волновой функции. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении. Уравнение Хартри-Фока.
3. Квантовые числа многоэлектронных атомов. Периодическая систем элементов. Линейный вариационный метод.

Практическое занятие.

1. Уравнение Хартри. Последовательные приближения. Волновая функция системы тождественных частиц.

2. Средняя энергия в одноэлектронном приближении.

Задания для самостоятельной работы.

1. Корреляционные эффекты. Метод конфигурационного взаимодействия.
2. Конфигурационное взаимодействие при заданных конфигурациях.

**Тема 7. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО.
Корреляция электронов (ПК-5)**

Лекция.

Корреляция электронов.

Практическое занятие.

1. Расщепление спектральных линий в слабом магнитном поле.
2. Линейный вариационный метод. Выбор базиса. Функции.

Задания для самостоятельной работы.

1. Парамагнетизм и диамагнетизм атомов.
2. Уравнение Паули. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.

4. Контроль знаний обучающихся и типовые оценочные средства

4.1. Распределение баллов:

3 семестр

- текущий контроль – 80 баллов
- контрольные срезы – 2 среза по 10 баллов каждый
- премиальные баллы – 10 баллов

Распределение баллов по заданиям:

| № те мы | Название темы / вид учебной работы | Формы текущего контроля / срезы | Мах. кол-во баллов | Методика проведения занятия и оценки |
|---------------|--|--|--------------------------|--------------------------------------|
|---------------|--|--|--------------------------|--------------------------------------|

| | | | | |
|----|---|--------------------|---|--|
| 1. | Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности | Реферат | 5 | <p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы;</p> <ul style="list-style-type: none"> - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений. <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. - 1 балл - соответствие плана теме реферата;</p> <ul style="list-style-type: none"> - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы. <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. - 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме;</p> <ul style="list-style-type: none"> - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.). <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу;</p> <ul style="list-style-type: none"> - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев. <p>5. Грамотность Макс. - 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей;</p> <ul style="list-style-type: none"> - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль. |
| | | работа на семинаре | 5 | <p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p> |
| 2. | Основы квантовой механики. Операторы квантовой механики. Расчеты с применением цифровых инструментов. | работа на семинаре | 5 | <p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p> |

| | | | | |
|--|----|---|---|--|
| | | Реферат | 5 | <p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы;</p> <ul style="list-style-type: none"> - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений. <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. - 1 балл - соответствие плана теме реферата;</p> <ul style="list-style-type: none"> - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы. <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. - 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме;</p> <ul style="list-style-type: none"> - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.). <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу;</p> <ul style="list-style-type: none"> - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев. <p>5. Грамотность Макс. - 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей;</p> <ul style="list-style-type: none"> - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль. |
| | | Расчёты с применением цифровых инструментов (программа Maple) | 5 | <p>5 баллов - расчет выполнен полностью без ошибок, 3-4 балла: расчёт выполнен полностью или с незначительными ошибками;</p> <p>0 - 2 баллов: расчет не выполнен или выполнен с существенными ошибками</p> |
| | 3. | Собственные значения и собственные функции некоторых операторов квантовой механики. | 5 | <p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p> |

| | | | | |
|--|--|---------|---|---|
| | | Реферат | 5 | <p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. – 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. – 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. – 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p> |
|--|--|---------|---|---|

| | | | | |
|----|--|--------------------|---|--|
| 4. | Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле. Расчет с применением цифровых инструментов | Реферат | 5 | <p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы;</p> <ul style="list-style-type: none"> - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений. <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. - 1 балл - соответствие плана теме реферата;</p> <ul style="list-style-type: none"> - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы. <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. - 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме;</p> <ul style="list-style-type: none"> - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.). <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу;</p> <ul style="list-style-type: none"> - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев. <p>5. Грамотность Макс. - 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей;</p> <ul style="list-style-type: none"> - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль. |
| | | работа на семинаре | 5 | <p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p> |

| | | | | |
|----|--|---|----|---|
| | | коллоквиум(контрольный срез) | 10 | <p>Коллоквиум сдается в устной форме по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 10 баллов:</p> <p>9-10 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала, умение свободно выполнять задания, предусмотренные программой, освоивший основную, и знакомый с дополнительной литературой. Ответ построен логично, материал излагается четко, ясно, хорошим языком, аргументировано, уместно используется информационный и иллюстративный материал (примеры из практики, таблицы, графики и т.д.). На вопросы отвечает кратко, аргументировано, уверенно, по существу.</p> <p>8-7 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала, умение использовать ранее полученные знания с вновь приобретенными, применять их на практике. Ответ построен логично, материал излагается хорошим языком, привлекается информативный и иллюстрированный материал, но при ответе допускает некоторые погрешности. Вопросы, задаваемые преподавателем, не вызывают существенных затруднений</p> <p>5-6 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками, чувствует себя неуверенно при ответе на вопросы. В ответе не всегда присутствует логика, аргументы привлекаются недостаточно веские. На поставленные вопросы затрудняется с ответами, показывает недостаточно глубокие знания</p> <p>0-4 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Не может привести примеры из реальной практики. Неуверенно и логически непоследовательно излагает материал. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом.</p> |
| | | Расчёты с применением цифровых инструментов (программа Mathcad) | 5 | <p>5 баллов расчет выполнен полностью без ошибок, 3-4 балла: расчёт выполнен полностью или с незначительными ошибками;</p> <p>0 - 2 баллов: расчет не выполнен или выполнен с существенными ошибками</p> |
| 5. | Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями | работа на семинаре | 5 | <p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала,.</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p> |

| | | | | |
|--|--|---------|---|---|
| | | Реферат | 5 | <p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. – 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. – 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. – 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p> |
|--|--|---------|---|---|

| | | | | |
|----|---|--------------------|---|---|
| 6. | Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные системы. | Реферат | 5 | <p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. - 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. - 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. - 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p> |
| | | работа на семинаре | 5 | <p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p> |
| 7. | Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. Корреляция электронов | работа на семинаре | 5 | <p>Ответ на семинаре по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 5 баллов:</p> <p>4-5 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала.</p> <p>2-3 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала.</p> <p>1-2 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками</p> <p>0-1 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом</p> |

| | | |
|---------|---|---|
| Реферат | 5 | <p>1. Новизна реферированного текста Макс. - 1 балл - актуальность проблемы и темы; - новизна и самостоятельность в постановке проблемы, в формулировании нового аспекта выбранной для анализа проблемы; - наличие авторской позиции, самостоятельность суждений.</p> <p>2. Степень раскрытия сущности проблемы Макс. – 1 балл - соответствие плана теме реферата; - соответствие содержания теме и плану реферата; - полнота и глубина раскрытия основных понятий проблемы; - обоснованность способов и методов работы с материалом; - умение работать с литературой, систематизировать и структурировать материал; - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения по рассматриваемому вопросу, аргументировать основные положения и выводы.</p> <p>3. Обоснованность выбора источников Макс. – 1 балл - круг, полнота использования литературных источников по проблеме; - привлечение новейших работ по проблеме (журнальные публикации, материалы сборников научных трудов и т.д.).</p> <p>4. Соблюдение требований к оформлению 1 балл - правильное оформление ссылок на используемую литературу; - грамотность и культура изложения; - владение терминологией и понятийным аппаратом проблемы; - соблюдение требований к объему реферата; - культура оформления: выделение абзацев.</p> <p>5. Грамотность Макс. – 1 балл - отсутствие орфографических и синтаксических ошибок, стилистических погрешностей; - отсутствие опечаток, сокращений слов, кроме общепринятых; - литературный стиль.</p> |
|---------|---|---|

| | | | |
|-----|--|-----|---|
| | коллоквиум(контрольный срез) | 10 | <p>Коллоквиум сдается в устной форме по предварительно обозначенным теоретическим вопросам и максимально оценивается в 10 баллов:</p> <p>9-10 баллов выставляется, если студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание программного материала, умение свободно выполнять задания, предусмотренные программой, освоивший основную, и знакомый с дополнительной литературой. Ответ построен логично, материал излагается четко, ясно, хорошим языком, аргументировано, уместно используется информационный и иллюстративный материал (примеры из практики, таблицы, графики и т.д.). На вопросы отвечает кратко, аргументировано, уверенно, по существу.</p> <p>8-7 баллов выставляется, если студент обнаружил достаточно глубокие знания программного материала, умение использовать ранее полученные знания с вновь приобретенными, применять их на практике. Ответ построен логично, материал излагается хорошим языком, привлекается информативный и иллюстрированный материал, но при ответе допускает некоторые погрешности. Вопросы, задаваемые преподавателем, не вызывают существенных затруднений</p> <p>5-6 баллов: студент показывает не достаточный уровень знаний учебного и лекционного материала, не в полном объеме владеет практическими навыками, чувствует себя неуверенно при ответе на вопросы. В ответе не всегда присутствует логика, аргументы привлекаются недостаточно веские. На поставленные вопросы затрудняется с ответами, показывает недостаточно глубокие знания</p> <p>0-4 баллов: студент показывает слабый уровень профессиональных знаний, затрудняется при анализе практических ситуаций. Не может привести примеры из реальной практики. Неуверенно и логически непоследовательно излагает материал. Неправильно отвечает на поставленные вопросы или затрудняется с ответом.</p> |
| 8. | Премияльные баллы | 10 | Дополнительные премияльные баллы могут быть начислены за выполнение творческих заданий на выбор студента в зависимости от темы. |
| 9. | Индивидуальные задания, с помощью которых можно набрать дополнительные баллы | 50 | студент может предоставить все задания текущего контроля и контрольные срезы |
| 10. | Итого за семестр | 100 | |

Итоговая оценка по зачету выставляется в 100-балльной шкале и в традиционной четырехбалльной шкале. Перевод 100-балльной рейтинговой оценки по дисциплине в традиционную четырехбалльную осуществляется следующим образом:

| 100-балльная система | Традиционная система |
|----------------------|----------------------|
| 50 - 100 баллов | Зачтено |
| 0 - 49 баллов | Не зачтено |

4.2 Типовые оценочные средства текущего контроля

КОЛЛОКВИУМ

Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле. Расчет с применением цифровых инструментов

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энергия, импульс, момент импульса.
2. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона. Функция Гамильтона.
3. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая закономерность в квантовой механике.
4. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Функция распределения. Коэффициент нормировки.
5. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.
6. Понятие оператора. Свойства операторов.
7. Собственные замечания и собственные функции оператора. Свойства собственных значений и собственных функций операторов.
8. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
9. Матричная форма уравнения.
10. Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Оператор кинетической энергии T .
11. Оператор момента импульса M . Оператор квадрата момента импульса M^2 .
12. Оператор Гамильтона (гамильтониан) H точки. Гамильтониан системы частиц.
13. Оператор спина.
14. Основные законы квантовой механики. Статистический смысл волновой функции.
15. Свойства волновой функции.
16. Вычисление вероятностей результатов измерения.
17. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин. Соотношение неопределенностей. Координата x и соответствующий ей импульс p_x .
18. Проекция импульса. Импульс.
19. Проекция момента импульса. Квадрат момента импульса.
20. Кинетическая энергия.
21. Спин электрона (оператор). Спин электрона (собственные функции). Полный момент импульса.
22. Изменение состояния во времени. Уравнение Шрёдингера в матричной форме.
23. Вектор тока вероятностей для частицы. Волновая функция для постоянных во времени полей.

Тема 7. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. Корреляция электронов

1. Стационарные состояния. Уравнение Шрёдингера для стационарных состояний в матричной форме.
2. Одномерная модель свободной частицы. Трехмерное описание свободной частицы.
3. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
4. Одномерный потенциальный барьер. Линейный гармонический осциллятор.
5. Уравнение Шрёдингера для частицы в центральном поле. Движение электрона в кулоновском поле ядра.
6. Формы электронных облаков в кулоновском поле ядра.
7. Движение электрона в одновалентных атомах. Электронный ток в водородоподобных атомах и ионах.
8. Движение атомов в двухатомной молекуле.
9. Сущность метода теории возмущений.
10. Возмущение в отсутствие вырождения невозмущенной задачи.
11. Возмущение при наличии вырождения невозмущенного состояния.
12. Расщепление энергетических уровней атома водорода в электрическом поле.

13. Нестационарная теория возмущений.
14. Явление квантового перехода. Квантовые переходы под влиянием световой волны.
15. Правила отбора для электронов в атоме. Интеркомбинационный запрет.
16. Моменты системы частиц. Разделение движения ядер и электронов в молекулах.
17. Вариационный принцип.
18. Самосогласованное поле. Уравнение Хартри.
19. Самосогласованное поле. Последовательные приближения.
20. Волновая функция системы тождественных частиц. Антисимметризация волновой функции.
21. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.
22. Средняя энергия в одноэлектронном приближении
23. Уравнение Хартри-Фока. Квантовые числа многоэлектронных атомов.
24. Периодическая система элементов.
25. Линейный вариационный метод. Корреляционные эффекты.
26. Метод конфигурационного взаимодействия. Конфигурационное взаимодействие при заданных конфигурациях.
27. Уравнение Паули. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.
28. Расщепление спектральных линий в слабом магнитном поле. Парамагнетизм и диамагнетизм атомов.
29. Линейный вариационный метод. Выбор базиса. Функции.
30. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО. Корреляция электронов.

работа на семинаре

Тема 1. Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности

вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энергия, импульс, момент импульса.
2. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона. Функция Гамильтона.
3. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая закономерность в квантовой механике.
4. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Функция распределения. Коэффициент нормировки.
5. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.

Тема 2. Основы квантовой механики. Операторы квантовой механики. Расчеты с применением цифровых инструментов.

вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.
2. Понятие оператора. Свойства операторов.
3. Собственные замечания и собственные функции оператора. Свойства собственных значений и собственных функций операторов.
4. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
5. Матричная форма уравнения.

Тема 3. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой механики.

вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Вычисление коммутаторов операторов спина.

2. Определение линейности и эрмитовости импульса и спина.
3. Проекция импульса. Импульс. Проекция момента импульса. Квадрат момента импульса. Кинетическая энергия.
4. Спин электрона (оператор). Спин электрона (собственные функции).
5. Полный момент импульса.

Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле. Расчет с применением цифровых инструментов

вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Одномерная модель свободной частицы.
2. Трехмерное описание свободной частицы.
3. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
4. Одномерный потенциальный барьер.
5. Линейный гармонический осциллятор.

Тема 5. Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями

вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Сущность метода теории возмущений. Возмущение в отсутствие вырождения невозмущенной задачи.
2. Возмущение при наличии вырождения невозмущенного состояния. Расщепление энергетических уровней атома водорода в электрическом поле.
3. Квантовые переходы под влияние световой волны.
4. Периодическая система элементов.
5. Линейный вариационный метод. Корреляционные эффекты.

Тема 6. Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные системы.

вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Моменты системы частиц. Разделение движения ядер и электронов в молекулах.
2. Вариационный принцип. Самосоглазованное поле.
3. Антисимметризация волновой функции. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.
4. Уравнение Хартри-Фока.
5. Квантовые числа многоэлектронных атомов.

Тема 7. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО.

Корреляция электронов

вопросы и задания для семинарских занятий:

1. Уравнение Паули. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.
2. Парамагнетизм и диамагнетизм атомов.
3. Линейный вариационный метод. Выбор базиса. Функции.
4. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО.
5. Корреляция электронов

Расчёты с применением цифровых инструментов (программа Maple)

Тема 2. Основы квантовой механики. Операторы квантовой механики. Расчеты с применением цифровых инструментов.

Рассмотреть квантовый гармонический осциллятор, с частицей массы m , совершающей одномерные колебания. Все расчеты проводить в атомных единицах без указания размерности в коде программы Maple, при этом принимается: $e = m_e = \hbar = 1$.

Расчёты с применением цифровых инструментов (программа Mathcad)

Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле. Расчет с применением цифровых инструментов

1. Решение уравнения Шрёдингера для одномерной модели в программе Mathcad. .
2. Получить спектр и волновые функции гармонического осциллятора. Вычислить квантовую и классическую плотности вероятности обнаружения частицы в основном и возбужденных состояниях осциллятора. Построить графики в программе Maple.

Реферат

Тема 1. Классическая механика. Динамика и статистические закономерности. Основные понятия теории вероятности

Темы рефератов:

1. Исходные положения квантовой механики
2. Центральное поле и момент количества движения
3. Приближенные методы решения задач квантовой механики
4. Одномерная модель свободной частицы. Трехмерное описание свободной частицы.
5. Движение точки в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Тема 2. Основы квантовой механики. Операторы квантовой механики. Расчеты с применением цифровых инструментов.

Темы рефератов:

1. Теория симметрии в квантовой механике
2. Общие вопросы решения молекулярных задач
3. Одноэлектронное приближение
4. Вычисление коммутаторов операторов.
5. Определение линейности и эрмитовости.

Тема 3. Собственные значения и собственные функции некоторых основных операторов квантовой механики.

Темы рефератов:

1. Упрощения при решении электронной задачи.
2. Тонкие взаимодействия и кристаллическое поле.
3. Корреляционные диаграммы и учет симметрии.
4. Представление операторов спина в матричной форме. Свойства матриц.
5. Вычисление коммутаторов моментов импульса.

Тема 4. Движение частиц в поле сил, не зависящих от времени. Движение частиц в центральном поле. Расчет с применением цифровых инструментов

Темы рефератов:

1. Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода.
2. Определение термов.
3. Движение электрона в кулоновском поле ядра.
5. Формы электронных облаков в кулоновском поле ядра.

Тема 5. Теория возмущений. Теория квантовых переходов между стационарными состояниями

Темы рефератов:

1. Движение ядер.
2. Химическая связь.
3. Нестационарная теория возмущений. Явление квантового перехода.
4. Правила отбора для электронов в атоме.
5. Интеркомбинационный запрет.

Тема 6. Система многих частиц. Система тождественных частиц. Многоэлектронные системы.

Темы рефератов:

1. Уравнение Хартри. Последовательные приближения. Волновая функция системы тождественных частиц.
2. Средняя энергия в одноэлектронном приближении.
3. Корреляционные эффекты.
4. Метод конфигурационного взаимодействия.
5. Конфигурационное взаимодействие при заданных конфигурациях.

Тема 7. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирические методы нахождения МО ЛКАО.
Корреляция электронов

Темы рефератов:

1. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.
2. Выбор базиса. Функции.
3. Периодическая систем элементов. Линейный вариационный метод.
4. Движение электрона в одновалентных атомах.
5. Электронный ток в водородоподобных атомах и ионах.

4.3 Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета

Типовые вопросы зачета (ПК-5)

1. Механика Ньютона. Законы Ньютона. Основные характеристики классической механики: энергия, импульс, момент импульса.
2. Потенциальная функция и кинетическая энергия. Системы координат. Механика Лагранжа и Гамильтона. Функция Гамильтона.
3. Область существования динамики и статистических закономерностей. Статистическая закономерность в квантовой механике.
4. Статистическое определение вероятности. Теорема сложения и умножения вероятностей. Функция распределения. Коэффициент нормировки.
5. Предпосылки возникновения квантовой механики и химии.
6. Понятие оператора. Свойства операторов.
7. Собственные замечания и собственные функции оператора. Свойства собственных значений и собственных функций операторов.
8. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
9. Матричная форма уравнения.
10. Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Оператор кинетической энергии T .
11. Оператор момента импульса M . Оператор квадрата момента импульса M^2 .
12. Оператор Гамильтона (гамильтониан) H точки. Гамильтониан системы частиц.
13. Оператор спина.

Типовые задания для зачета (ПК-5)

1. Собственные замечания и собственные функции оператора. Свойства собственных значений и собственных функций операторов.

2. Представление операторов в матричной форме. Свойства матриц.
3. Динамические переменные и задание состояния. Операторы динамических переменных. Оператор кинетической энергии T .
4. Оператор момента импульса M . Оператор квадрата момента импульса M .
5. Оператор Гамильтона (гамильтониан) H точки. Гамильтониан системы частиц.
6. Основные законы квантовой механики. Статистический смысл волновой функции.
7. Свойства волновой функции.
8. Вычисление вероятностей результатов измерения.
9. Условия возможности одновременного измерения разных физических величин. Соотношение неопределенностей. Координата x и соответствующий ей импульс p_x .
10. Кинетическая энергия.

4.4. Шкала оценивания промежуточной аттестации

| Оценка | Компетенции | Дескрипторы (уровни) – основные признаки освоения (показатели достижения результата) |
|---------------------------------|-------------|---|
| «зачтено» (50 - 100 баллов) | ПК-5 | Использует расчетные методы квантовой химии, с применением современных цифровых технологий, для решения различных практических задач. Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований. Решает конкретные расчётные задачи с использованием математических программ. |
| «не зачтено» (0 - 49 баллов) | ПК-5 | Не умеет пользоваться расчётными методами квантовой химии на достаточном уровне для решения конкретных практических задач. Не способен обрабатывать и анализировать научно-техническую информацию и результаты исследований. Не умеет использовать современное программное обеспечение для решения расчётных задач. |

5. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

5.1 Методические указания по организации самостоятельной работы обучающихся:

Приступая к изучению дисциплины, в первую очередь обучающимся необходимо ознакомиться содержанием рабочей программы дисциплины (РПД), которая определяет содержание, объем, а также порядок изучения и преподавания учебной дисциплины, ее раздела, части.

Для самостоятельной работы важное значение имеют разделы «Объем и содержание дисциплины», «Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины» и «Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы».

В разделе «Объем и содержание дисциплины» указываются все разделы и темы изучаемой дисциплины, а также виды занятий и планируемый объем в академических часах.

В разделе «Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины» указана рекомендуемая основная и дополнительная литература.

В разделе «Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы» содержится перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем, необходимых для освоения дисциплины.

5.2 Рекомендации обучающимся по работе с теоретическими материалами по дисциплине

При изучении и проработке теоретического материала необходимо:

- просмотреть еще раз презентацию лекции в системе MOODLe, повторить законспектированный на лекционном занятии материал и дополнить его с учетом рекомендованной дополнительной литературы;
- при самостоятельном изучении теоретической темы сделать конспект, используя рекомендованные в РПД источники, профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

- ответить на вопросы для самостоятельной работы, по теме представленные в пункте 3.2 РПД.
- при подготовке к текущему контролю использовать материалы фонда оценочных средств (ФОС).

5.3 Рекомендации по работе с научной и учебной литературой

Работа с основной и дополнительной литературой является главной формой самостоятельной работы и необходима при подготовке к устному опросу на семинарских занятиях, к дебатам, тестированию, экзамену. Она включает проработку лекционного материала и рекомендованных источников и литературы по тематике лекций.

Конспект лекции должен содержать реферативную запись основных вопросов лекции, в том числе с опорой на размещенные в системе MOODLe презентации, основных источников и литературы по темам, выводы по каждому вопросу. Конспект может быть выполнен в рамках распечатки выдачи презентаций лекций или в отдельной тетради по предмету. Он должен быть аккуратным, хорошо читаемым, не содержать не относящуюся к теме информацию или рисунки.

Конспекты научной литературы при самостоятельной подготовке к занятиям должны содержать ответы на каждый поставленный в теме вопрос, иметь ссылку на источник информации с обязательным указанием автора, названия и года издания используемой научной литературы. Конспект может быть опорным (содержать лишь основные ключевые позиции), но при этом позволяющим дать полный ответ по вопросу, может быть подробным. Объем конспекта определяется самим студентом.

В процессе работы с основной и дополнительной литературой студент может:

- делать записи по ходу чтения в виде простого или развернутого плана (создавать перечень основных вопросов, рассмотренных в источнике);
- составлять тезисы (цитирование наиболее важных мест статьи или монографии, короткое изложение основных мыслей автора);
- готовить аннотации (краткое обобщение основных вопросов работы);
- создавать конспекты (развернутые тезисы).

5.4. Рекомендации по подготовке к отдельным заданиям текущего контроля

Собеседование предполагает организацию беседы преподавателя со студентами по вопросам практического занятия с целью более обстоятельного выявления их знаний по определенному разделу, теме, проблеме и т.п. Все члены группы могут участвовать в обсуждении, добавлять информацию, дискутировать, задавать вопросы и т.д.

Устный опрос может применяться в различных формах: фронтальный, индивидуальный, комбинированный. Основные качества устного ответа подлежащего оценке:

- правильность ответа по содержанию;
- полнота и глубина ответа;
- сознательность ответа;
- логика изложения материала;
- рациональность использованных приемов и способов решения поставленной учебной задачи;
- своевременность и эффективность использования наглядных пособий и технических средств при ответе;
- использование дополнительного материала;
- рациональность использования времени, отведенного на задание.

Устный опрос может сопровождаться презентацией, которая подготавливается по одному из вопросов практического занятия. При выступлении с презентацией необходимо обращать внимание на такие моменты как:

- содержание презентации: актуальность темы, полнота ее раскрытия, смысловое содержание, соответствие заявленной темы содержанию, соответствие методическим требованиям (цели, ссылки на ресурсы, соответствие содержания и литературы), практическая направленность, соответствие содержания заявленной форме, адекватность использования технических средств учебным задачам, последовательность и логичность презентуемого материала;

- оформление презентации: объем (оптимальное количество), дизайн (читаемость, наличие и соответствие графики и анимации, звуковое оформление, структурирование информации, соответствие заявленным требованиям), оригинальность оформления, эстетика, использование возможности программной среды, соответствие стандартам оформления;
- личностные качества: ораторские способности. соблюдение регламента, эмоциональность, умение ответить на вопросы, систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам программы:
- содержание выступления: логичность изложения материала, раскрытие темы, доступность изложения, эффективность применения средств ИКТ, способы и условия достижения результативности и эффективности для выполнения задач своей профессиональной или учебной деятельности, доказательность принимаемых решений, умение аргументировать свои заключения, выводы.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1 Основная литература:

1. Гельман Г. Квантовая химия. - 2-е изд., доп.. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 533 с.
2. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 496 с.

6.2 Дополнительная литература:

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособие. - М.: Академия, 2008. - 383 с.
2. Карапетянц М.Х., Дракин С.И. Строение вещества : учеб. пособие. - 3-е изд., перераб. и доп.. - М.: Высш. шк., 1978. - 304 с.

6.3 Иные источники:

1. Интернет-энциклопедии - <http://www.rubicon.com/>
2. ЭБС «Znaniy.com» - <http://www.znaniy.com/index.php?item=main>
3. Химическая энциклопедия на сайте «Химик.ру» - <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/>
4. учебные материалы на сайте химического факультета МГУ - <http://www.chem.msu.su/rus/chemistry>
5. Электронная библиотека учебников для вузов - <http://4du.ru/>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины, программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Для проведения занятий по дисциплине необходимо следующее материально-техническое обеспечение: учебные аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, помещения для самостоятельной работы.

Учебные аудитории и помещения для самостоятельной работы укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы укомплектованы компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду Университета.

Для проведения занятий лекционного типа используются наборы демонстрационного оборудования, обеспечивающие тематические иллюстрации (проектор, ноутбук, экран/ интерактивная доска).

Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

Microsoft Office Профессиональный плюс 2007

Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный Russian Edition. 1500-2499 Node 1 year Educational Renewal Licence

Adobe Reader XI (11.0.08) - Russian Adobe Systems Incorporated 10.11.2014 187,00 MB 11.0.08
7-Zip 9.20

Операционная система Microsoft Windows 10

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. Научная электронная библиотека Российской академии естествознания. – URL: <https://www.monographies.ru>
2. Электронный каталог Фундаментальной библиотеки ТГУ. – URL: <http://biblio.tsutmb.ru/elektronnyij-katalog>
3. Университетская библиотека онлайн: электронно-библиотечная система. – URL: <https://biblioclub.ru>
4. Юрайт: электронно-библиотечная система. – URL: <https://urait.ru>
5. Цифровой образовательный ресурс IPR SMART. – URL: <http://www.iprbookshop.ru>

Электронная информационно-образовательная среда

https://auth.tsutmb.ru/authorize?response_type=code&client_id=moodle&state=xyz

Взаимодействие преподавателя и студента в процессе обучения осуществляется посредством мультимедийных, гипертекстовых, сетевых, телекоммуникационных технологий, используемых в электронной информационно-образовательной среде университета.