

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ


Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный  
университет им. Х.М. Бербекова» (КБГУ)

Институт химии и биологии

Кафедра неорганической и физической химии

СОГЛАСОВАНО

Руководитель образовательной  
программы

 Р.Ч. Бажева

«26» мая 2023 г.

УТВЕРЖДАЮ

Директор института

 Р.Ч. Бажева

«26» мая 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Квантовая химия»

**04.03.01 - Химия**

(код и наименование направления подготовки)

Профиль подготовки

Органическая химия

(наименование профиля подготовки)

Квалификация (степень) выпускника

«Бакалавр»

Форма обучения

очная

Нальчик 2023

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия»

Составитель Х.Б Кушхов - Нальчик: ФГБОУ ВО КБГУ, 2023. – 44 с.

Рабочая программа предназначена для преподавания дисциплины части формируемой участниками образовательных отношений студентам очной формы обучения по направлению подготовки 04.03.01 Химия, 7 семестр, 4 курса.

Рабочая программа составлена с учетом федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению 04.03.01 Химия и профилю подготовки «Неорганическая химия и химия координационных соединений» утвержденного приказом Минобрнауки Российской Федерации от 17.07.2017 N 671

(Зарегистрировано в Минюсте России 02.08.2017 N 47644)

## Содержание

1.Цели и задачи освоения дисциплины .....	4
2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО.....	4
3.Требования к результатам освоения дисциплины (модуля).....	5
4. Содержание и структура дисциплины (модуля).....	6
5. Оценочные материалы для текущего и рубежного контроля успеваемости.....	12
и промежуточной аттестации .....	12
5.1.Оценочные материалы для текущего контроля.....	12
5.1.1. Вопросы по темам дисциплины «Квантовая химия» контролируемые компетенции ПК-1, ПК-4.....	13
5.1.2.Основные материалы для самостоятельной работы обучающегося ( типовые задачи)(контролируемые компетенции ПК-1, ПК-4).....	17
5.2. Оценочные материалы для рубежного контроля.....	18
5.2.1. Оценочные материалы для контрольной работы контролируемые компетенции ПК-1, ПК-4).....	19
5.2.2.Оценочные материалы: Типовые тестовые задания по дисциплине «Квантовая химия» <a href="http://open.kbsu.ru/moodle/course/view.php?id=4343#section-1">http://open.kbsu.ru/moodle/course/view.php?id=4343#section-1</a> .....	21
5.2.3.Оценочные материалы для промежуточной аттестации.....	24
5.2.4.Список вопросов к экзамену(контролируемые компетенции ПК-1, ПК-4) .....	24
6.Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности .....	25
7. Учебно-методическое обеспечение дисциплины .....	27
7.1. Нормативно-законодательные акты.....	27
7.2. Основная литература .....	27
7.3. Дополнительная литература .....	28
7.4. Периодические издания .....	29
7.5. Интернет – ресурсы .....	29
7.6. Методические указания по проведению различных учебных занятий и самостоятельной работы .....	33
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины .....	38
8.1.Требования к материально-техническому обеспечению .....	39
Приложение 1.....	42
ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ (ДОПОЛНЕНИЙ) .....	42
Приложение 2.....	43
Приложение 3.....	Ошибка! Закладка не определена.

## 1. Цели и задачи освоения дисциплины

**Целью** курса является изложение основ квантовой химии – раздела теоретической химии, в котором строение и свойства химических соединений, их взаимодействия и превращения рассматриваются на основе представлений квантовой механики и экспериментально установленных закономерностей, в том числе описываемых классической теорией химического строения. Одно из наиболее важных её направлений – изучение элементарных актов химических превращений, выделяемых в последние годы отдельно как химическая динамика. Квантовая химия использует математический аппарат и методы квантовой механики для описания и расчета свойств химических соединений, начиная с атомов и простейших молекул и кончая такими высокомолекулярными соединениями, как, белки, и конденсированными средами, в которых уже невозможно рассматривать отдельные низкомолекулярные фрагменты.

В последние десятилетия, особенно после внедрения ЭВМ, квантово-химические расчеты стали важным элементом химических исследований. В связи с этим возникла проблема обучения химиков дисциплине «квантовая химия» в объеме, позволяющим не только производить расчеты молекул по заданным схемам, но и творчески использовать в своей работе количественные и качественные выводы квантовой химии.

**Задача** дисциплины – познакомить студентов с основами квантовой механики и квантовой химии в том минимальном объеме, который совершенно необходим для понимания современной химии.

Формирование умений и навыков ведения научной и педагогической работы удовлетворяющих требования профессионального стандарта «Педагог (педагогическая деятельность в сфере дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования) (воспитатель, учитель)» утвержденный приказом Минтруда России от 18 октября 2013 г. N 544н

## 2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплина «Квантовая химия» является дисциплиной части формируемая участниками образовательных отношений, модуля "Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела» Блока 1 «Дисциплины (модули)» основной образовательной программы по направлению подготовки 04.03.01 Химия.

Изучение дисциплины «Квантовая химия» базируется на сумме знаний, полученных студентами в ходе освоения следующих дисциплин: «Математика», «Физика», «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Строение вещества».

Для освоения данной дисциплины, студенты должны владеть следующими знаниями: уметь владеть математическим аппаратом дифференциального и интегрального вычисления и теоретических основ курса физики, разделов строения атома, оптики и квантовой механики.

Дисциплина «Квантовая химия» является предшествующей для таких дисциплин как: «Коллоидная химия», «ВМС», «Физические методы исследования», «Физическая химия», «Химическая технология».

Дисциплина позволит расширить теоретическую подготовку бакалавра, получить теоретические знания при описании электронного строения молекулярных систем и реакционной способности молекул.

Изучение данной дисциплины направлено на освоение обобщенных трудовых функций

ПС «Педагог (педагогическая деятельность в сфере дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования) (воспитатель, учитель)» утвержденный приказом Минтруда России от 18 октября 2013 г. N 544н ОТФ - Педагогическая деятельность по проектированию и реализации образовательного процесса в образовательных организациях дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования

### 3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)

В совокупности с другими дисциплинами профиля «Неорганическая химия и химия координационных соединений» дисциплина «Квантовая химия» направлена на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по направлению подготовки 04.03.01-Химия (уровень бакалавриата)

#### Профессиональных компетенций (ПК) по видам профессиональной деятельности:

##### Научно-исследовательская, педагогическая деятельность:

**ПК-3.** Способен проектировать и осуществлять направленный синтез неорганических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации

В результате изучения дисциплины «Квантовая химия» студент должен:

- **знать** основные приближения квантовой химии и принципы методов, используемых при расчетах электронной структуры, строения и реакционной способности химических соединений;
- **уметь** использовать теоретические модели для обоснования строения и реакционной способности веществ различной природы, планирования синтетических работ
- **владеть** навыками применения теоретических основ традиционных и новых разделов химии при решении учебных и научных задач химической направленности, навыками повышения значимости своей будущей профессии (ПС «Педагог (педагогическая деятельность в сфере дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования) (воспитатель, учитель)» утвержденный приказом Минтруда России от 18 октября 2013 г. N 544н ТФ - А/01.6 Общепедагогическая функция, А/02.6 Воспитательная деятельность, А/03.6 Развивающая деятельность,

В/03.6 Педагогическая деятельность по реализации программ основного и среднего общего образования).

#### 4. Содержание и структура дисциплины (модуля)

Таблица 1. Содержание дисциплины(модуля) «Квантовая химия»

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Код контролируемой компетенции	Форма текущего контроля
1.	<b>Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики.</b>	Излучение абсолютно черного тела,Боровская модель атома,Внешний фотоэффект,Гипотеза Луи де Бройля,Операторы. Свойства операторов. Самосопряженные операторы,Собственные значения. Собственные функции. Теоремы о собственных значениях и собственных функциях,Матричное представление операторов	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
2.	<b>Основные постулаты квантовой механики. Операторы физических величин</b>	Основные законы квантовой механики,Операторы координат и импульса,Операторы момента импульса Оператор момента импульса в сферической системе координат,Оператор кинетической энергии,Оператор кинетической энергии в сферической системе координат Оператор полной энергии,Экспериментальные доказательства существования спина электрона. Операторы спина	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК)..
3.	<b>Эволюция состояний и уравнение</b>	Принцип причинности в квантовой механике, уравнение Шредингера	ПК-3	Тестирование (Т), коллокви-

	<b>Шредингера. Уравнение непрерывности</b>	ра,Стационарное уравнение Шредингера Уравнение непрерывности		ум (К), рубежный контроль (РК).
4.	<b>Точно решаемые задачи квантовой механики</b>	Свободная частица,Частица в потенциальной яме Потенциальный барьер,Гармонический осциллятор Частица в поле потенциальных сил,Частица в кулоновском поле ядра,Спектр и волновые функции атома водорода	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
5.	<b>Приближенные методы решения квантовомеханических задач</b>	Теория возмущения при отсутствии вырождения,Теория возмущения при наличии вырождения,Вариационный принцип,Вариационный принцип Ритца	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
6.	<b>Расщепление энергетических уровней атома в постоянном электрическом и магнитных полях</b>	Расщепление энергетических уровней атома в электрическом поле. Эффект Штарка,Расщепление энергетических уровней атома в постоянном магнитном поле. Эффект Зеемана	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК)..
7.	<b>Система тождественных частиц. Уравнение Шредингера</b>	Волновая функция системы тождественных частиц. Фермионы и бозоны, Антисимметризация волновой функции,Детерминантный вид волновой	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль

	<b>ра для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движения</b>	функции. Детерминант Слейтера		(РК).
8.	<b>Состояние молекул и уравнение Шредингера для атомов и молекул. метод самосогласованного поля Хартри-Фока</b>	Электронные , колебательные и вращательные состояния молекул, Уравнение Шредингера для атомов и молекул,Разделение электронного и ядерного движений  Электронная энергия системы электронов,Электронные и орбитальные энергии молекул с закрытыми оболочками,Обитали Хартри-Фока	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
9.	<b>Представление молекулярных орбиталей в виде линейных комбинаций атомных орбиталей. Метод ССП, МО ЛКАО</b>	Молекулярные обитали как линейные комбинации базисных функций (атомных орбиталей ),Закрытые оболочки,Открытые оболочки. Ограниченный метод Хартри-Фока,Открытые оболочки. Неограниченный метод Хартри-Фока,Теорема Купманса	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
10.	<b>Классификация квантово-химических методов и базисных наборов</b>	Одноэкспоненциальная орбиталь Слейтеровского типа, Эффективный заряд ядра и экранирование электронов  Релаксация орбиталей, Базисные функции. Функции Слейтеровского типа,Базисные функции. Функции Гаусова типа,Классификация базисных наборов	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
11.	<b>Электронная корреляция</b>	Значение корреляционных эффектов,Типы корреляционных эффек-	ПК-3	Тестирование (Т), коллокви-



		тов, Методы учета электронной корреляции Корреляционные методы. Конфигурационное взаимодействие, Корреляционное взаимодействие. Метод теории возмущения		ум (К), рубежный контроль (РК).
12.	<b>Метод функционала электронной плотности</b>	Основные положения метода функционала электронной плотности, Метод Кона-Шэма, Квантовые методы Монте Карла	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
13.	<b>Полуэмпирические квантово-химические методы</b>	Основные черты полуэмпирического метода, Нулевое дифференциальное перекрывание. Метод ППДП, ЧПДП, МПДП., Расширенный метод Хюккеля, Простой метод Хюккеля, Этилен, алил и бутадиен	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
14.	<b>Симметрия и свойство молекул</b>	Точечные операции симметрии: а) вращение вокруг оси б) отражение в плоскости симметрии в) зеркально поворотное преобразование г) операции инверсии Точечные группы симметрии и их представления Классификация молекулярных орбиталей по симметрии и их изображения, Классификация электронных состояний по симметрии	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
15.	<b>Квантово-химическое моделирование как метод ис-</b>	Проблемы осуществления квантово-химических расчетов. Квантово-химические про-	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный

	следования	граммы		контроль (РК).
16.	<b>Расчеты электронного строения и свойств атомов и молекул</b>	Атомы и ионы. Типы связи электронов в атомах, Термы атомов, Электронные энергии, Орбитальные энергии Молекулярный ион водорода, Гомоядерные молекулы Молекула азота, Гетероядерные молекулы, Характеристика состояния атомов в молекуле	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).
17.	<b>Реакционная способность</b>	Метод поверхностей потенциальной энергии, Метод индексов реакционной способности, Параболическая модель переходного состояния и реакция радикального отрыва водорода	ПК-3	Тестирование (Т), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК).

Таблица 2. Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 часа)

Вид работы	Трудоемкость часов/ зачетных единиц	
	5 семестр	всего
Общая трудоемкость (в часах)	144	144
<b>Контактная работа (в часах)</b>	<b>60</b>	<b>60</b>
Лекции (Л)	30	30
Практические занятия (ПЗ)	30	30
<b>Самостоятельная работа (в часах)</b>	<b>57</b>	<b>57</b>
Самостоятельное изучение разделов	51	51
Контрольная работа (К)	6	6
Подготовка и прохождение промежуточной аттестации	27	27
<b>Вид промежуточной аттестации</b>	<b>Экзамен</b>	

Таблица 3. Лекционные занятия

№ п/п	Тема
1.	Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики.
2.	Основные постулаты квантовой механики. Операторы физических величин.
3.	Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Уравнение непрерывности.
4.	Точно решаемые задачи квантовой механики.
5.	Приближенные методы решения квантово-механических задач
6.	Расщепление энергетических уровней атома в постоянном электрическом и магнитных полях.
7	Система тождественных частиц. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движения.
8	Состояние молекул и уравнение Шредингера для атомов и молекул. Метод самосогласованного поля Хартри - Фока
9	Представление молекулярных орбиталей в виде линейных комбинаций атомных орбиталей. Метод ССП, МО ЛКАО.
10	Классификация квантово-химических методов и базисных наборов
11	Электронная корреляция
12	Метод функционала электронной плотности
13	Полуэмпирические квантово-химические методы
14	Симметрия и свойство молекул
15	Квантово-химическое моделирование как метод исследования
16	Расчеты электронного строения и свойств атомов и молекул
17	Реакционная способность

Таблица 4. Практические занятия

№ п/п	Тема
1	Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики.
2	Операторы физических величин.

3	Уравнение Шредингера. Уравнение непрерывности
4	Точно решаемые задачи квантовой механики. Водородоподобный атом.
5	Теория возмущений и вариационный метод. Эффект Штарка и Зеймана.
6	Спин элементарных частиц и связанные с ним магнитные моменты.
7	Система многих частиц. Система тождественных частиц.
8	Уравнение Шредингера для атомов и молекул.
9	Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока.
10	Понятие о методе конфигурационного взаимодействия.
11	Метод валентных схем.
12	Представление молекулярных орбиталей в виде линейных комбинаций атомных орбиталей.
13	Метод ССП, МО ЛКАО.
14	Учет симметрии и ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи.
15	Классификации электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии.
16	Гибридизация и гибридные орбитали. Полуэмпирические методы квантовой химии.
17	Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.

Таблица 5. Самостоятельное изучение разделов дисциплины

№	Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение
1.	Орбитали-волновые функции
2.	Основы методов расчета строения молекул.
3.	Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета строения молекул

## 5. Оценочные материалы для текущего и рубежного контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Конечными результатами освоения программы дисциплины являются сформированные когнитивные дескрипторы «знать», «уметь», «владеть», расписанные по отдельным компетенциям. Формирование этих дескрипторов происходит в течение всего семестра по этапам в рамках различного вида занятий и самостоятельной работы.

В ходе изучения дисциплины предусматриваются *текущий, рубежный контроль и промежуточная аттестация*.

**5.1. Оценочные материалы для текущего контроля.** Цель текущего контроля – оценка результатов работы в семестре и обеспечение своевременной обратной связи, для коррекции обучения, активизации самостоятельной работы обучающегося. Объектом текущего контроля являются конкретизированные результаты обучения (учебные достижения) по дисциплине

*Текущий контроль* успеваемости обеспечивает оценивание хода освоения дисциплины «Квантовая химия» и включает: ответы на теоретические вопросы на практическом занятии, решение практических задач и выполнение заданий на практическом занятии, самостоятельное вы-

полнение индивидуальных домашних заданий (например, решение задач) с отчетом (защитой) в установленный срок. Оценка качества подготовки на основании выполненных заданий ведется преподавателем (с обсуждением результатов), баллы начисляются в зависимости от сложности задания.

### **5.1.1. Вопросы по темам дисциплины «Квантовая химия» контролируемые компетенции ПК-3.**

**Тема 1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Математический аппарат квантовой механики.**

1. Излучение абсолютно черного тела
2. Боровская модель атома
3. Внешний фотоэффект
4. Гипотеза Луи де Бройля
5. Операторы. Свойства операторов. Самосопряженные операторы
6. Собственные значения. Собственные функции. Теоремы о собственных значениях и собственных функциях
7. Матричное представление операторов

**Тема 2. Основные постулаты квантовой механики. Операторы физических величин**

1. Основные законы квантовой механики
2. Операторы координат и импульса
3. Операторы момента импульса
4. Оператор момента импульса в сферической системе координат
5. Оператор кинетической энергии
6. Оператор кинетической энергии в сферической системе координат
7. Оператор полной энергии.
8. Экспериментальные доказательства существования спина электрона. Операторы спина

**Тема 3. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Уравнение непрерывности**

1. Принцип причинности в квантовой механике, уравнение Шредингера
2. Стационарное уравнение Шредингера
3. Уравнение непрерывности

**Тема 4. Точно решаемые задачи квантовой механики**

1. Свободная частица
2. Частица в потенциальной яме
3. Потенциальный барьер
4. Гармонический осциллятор
5. Частица в поле потенциальных сил
6. Частица в кулоновском поле ядра

7. Спектр и волновые функции атома водорода

**Тема 5. Приближенные методы решения квантово-механических задач**

1. Теория возмущения при отсутствии вырождения
2. Теория возмущения при наличии вырождения
3. Вариационный принцип
4. Вариационный принцип Ритца

**Тема 6. Расщепление энергетических уровней атома в постоянном электрическом и магнитных полях**

1. Расщепление энергетических уровней атома в электрическом поле. Эффект Штарка
2. Расщепление энергетических уровней атома в постоянном магнитном поле. Эффект Зеемана.

**Тема 7. Система тождественных частиц. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движения**

1. Волновая функция системы тождественных частиц. Фермионы и бозоны
2. Антисимметризация волновой функции
3. Детерминантный вид волновой функции. Детерминант Слейтера

**Тема 8. Состояние молекул и уравнение Шредингера для атомов и молекул. метод самосогласованного поля Хартри-Фока**

1. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
2. Уравнение Шредингера для атомов и молекул
3. Разделение электронного и ядерного движений
4. Электронная энергия системы электронов
5. Электронные и орбитальные энергии молекул с закрытыми оболочками
6. Обитали Хартри-Фока

**Тема 9. Представление молекулярных орбиталей в виде линейных комбинаций атомных орбиталей. Метод ССП, МО ЛКАО**

1. Молекулярные обитали как линейные комбинации базисных функций (атомных орбиталей )
2. Закрытые оболочки
3. Открытые оболочки. Ограниченный метод Хартри-Фока
4. Открытые оболочки. Неограниченный метод Хартри-Фока
5. Теорема Купманса

## **Тема 10. Классификация квантово-химических методов и базисных наборов**

1. Одноэкспоненциальная орбиталь Слейторовского типа
2. Эффективный заряд ядра и экранирование электронов
3. Релаксация орбиталей
4. Базисные функции. Функции Слейтеровского типа
5. Базисные функции. Функции Гаусова типа
6. Классификация базисных наборов

## **Тема 11. Электронная корреляция**

1. Значение корреляционных эффектов
2. Типы корреляционных эффектов
3. Методы учета электронной корреляции
4. Корреляционные методы. Конфигурационное взаимодействие
5. Корреляционное взаимодействие. Метод теории возмущения

## **Тема 12. Метод функционала электронной плотности**

1. Основные положения метода функционала электронной плотности
2. Метод Кона-Шэма
3. Квантовые методы Монте Карла

## **Тема 13. Полуэмпирические квантово-химические методы**

1. Основные черты полуэмпирического метода
2. Нулевое дифференциальное перекрывание. Метод ППДП, ЧПДП, МПДП.
3. Расширенный метод Хюккеля
4. Простой метод Хюккеля
5. Этилен, алил и бутадиен

## **Тема 14. Симметрия и свойство молекул**

1. Точечные операции симметрии
  - а) вращение вокруг оси
  - б) отражение в плоскости симметрии
  - в) зеркально поворотное преобразование
  - г) операции инверсии
2. Точечные группы симметрии и их представления
3. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии и их изображения
4. Классификация электронных состояний по симметрии

## **Тема 15. Квантово-химическое моделирование как метод исследования**

1. Проблемы осуществления квантово-химических расчетов
2. Квантово-химические программы

### **Тема 16. Расчеты электронного строения и свойств атомов и молекул**

1. Атомы и ионы. Типы связи электронов в атомах
2. Термы атомов
3. Электронные энергии
4. Орбитальные энергии
5. Молекулярный ион водорода
6. Гомоядерные молекулы
7. Молекула азота
8. Гетероядерные молекулы
9. Характеристика состояния атомов в молекуле

### **Тема 17. Реакционная способность**

1. Метод поверхностей потенциальной энергии
2. Метод индексов реакционной способности
3. Параболическая модель переходного состояния и реакция радикального отрыва водорода

#### *Критерии формирования оценок (оценивания) устного опроса*

Устный опрос является одним из основных способов учёта знаний обучающегося по дисциплине « Квантовая химия ». Развёрнутый ответ студента должен представлять собой связное, логически последовательное сообщение на заданную тему, показывать его умение применять определения.

***В результате устного опроса знания, обучающегося оцениваются по следующей шкале:***  
***от 5 до 6 балл***, ставится, если обучающийся:

- 1) полно излагает изученный материал, даёт правильное определенное квантово- химических понятий;
- 2) обнаруживает понимание материала, может обосновать свои суждения, применить знания на практике, привести необходимые примеры не только по учебнику, но и самостоятельно составленные;
- 3) излагает материал последовательно и правильно с точки зрения норм научного и литературного языка.

***от 3 до 4 балла***, ставится, если обучающийся даёт ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, что и для балла «1», но допускает 1-2 ошибки, которые сам же исправляет, и 1-2 недочёта в содержательной части квантово – химической направленности, последовательности и языковом оформлении излагаемого.

***От 1 до 2 балла***, ставится, если обучающийся обнаруживает знание и понимание основных положений данной темы, но:

- 1) излагает материал неполно и допускает неточности в определении понятий;
- 2) не умеет достаточно глубоко и доказательно обосновать свои суждения и привести свои примеры;



- 3) излагает материал непоследовательно и допускает ошибки и в языковом оформлении излагаемого.

**0 баллов**, ставится, если обучающийся обнаруживает незнание большей части соответствующего раздела изучаемого материала, допускает ошибки в формулировках квантово – химической направленности .

Баллы «5-6 \_\_\_\_\_», « 3-4 \_\_\_\_\_», « 1-2 \_\_\_\_\_» могут ставиться не только за единовременный ответ, но и за рассредоточенный во времени, т.е. за сумму ответов, данных студентом на протяжении занятия

### **5.1.2.Основные материалы для самостоятельной работы обучающегося ( типовые задачи)(контролируемые компетенции ПК-3)**

Перечень типовых задач для самостоятельной работы сформирован в соответствии с тематикой практических занятий по дисциплине «Квантовая химия».

#### **Задачи**

##### **Тема «Орбитали – волновые функции»**

1. Почему появилась квантовая механика?
2. Как описывают волновые свойства электромагнитных волн или просто волн по классической механике?
3. Какие есть конкретные экспериментальные данные, которые не объясняются классической механикой?
4. Какой смысл для электронов имеет волновая функция согласно эксперименту?
5. Можно ли говорить о траектории движения электронов?
6. В квантовой механике говорят про операторы, как их понимать?
7. Можно ли найти по свойствам операторов две физические величины, которые одновременно точно измеряется?
8. Как убирают время в уравнение Шредингера и превращать ее в стационарное?
9. Уравнение Шредингера справедливо для любых электронов в любом атоме?
10. Какие бывают атомные орбитали и в чем они различаются?
11. Насколько в пространстве растянуты атомы орбитали ?
12. Какой угловой момент электрона атома водорода связан с квантовыми числами  $l$  и  $m$ ?
13. Что такое спин электрона?
14. Как обозначают терм атома?

##### **Тема «Основы метода расчета, строение молекул»**

1. Как решается электронное стационарное уравнение Шредингера для атома или молекулы, где ни один, а несколько электронов?
2. Говорят, что для расчета молекул в квантовой химии пользуются методом Хартри Фокка Рутаана. А что такое метод Хартри?
3. В квантовой химии используют для расчета строение молекул не метод Хартри, а метод Хартри Фокка, чем они отличаются?
4. Что такое слейтеровский детерминант?
5. Что из себя представляет метод МОЛКО?
6. Какой самый простой метод Хартри Фокка Рутаана?
7. Что из себя представляет  $\pi$ -связи,  $\sigma$ -связи?
8. Как сосчитать электронную плотность на атомах и связях молекул?
9. Часто говорят: «молекулярная орбиталь обладает симметрией». Что из себя представляет понятие «симметрия»?

##### **Тема «Неэмперические и полуэмперические методы расчета строения моле-**

кул»

1. На чем основаны неэмперические методы расчета строения молекул?
2. Что такое  $F_{\mu\nu}$ ,  $S_{\mu\nu}$ ?
3. Как выглядит выражение для энергии, если имеем занятые настоящие молекулярные орбитали или молекулярная орбиталь в виде линейной комбинации базисных функций?
4. Какими методами приближенно решает уравнение Хартри Фокка Рутаана?
5. Что из себя представляет вариационный метод?
6. Как понимать метод теории возмущений?
7. Если в молекуле нечетное число электронов, то говорят про открытую электронную оболочку. Какое решает уравнение для определения строения такой молекулы?
8. Чем НХФ отличается ОХФ?
9. Как выбирают базисные атомные функции для неэмпирических расчетов?
10. В чем преимущество использования в расчетах гауссовых функций вместо слейтеровских?
11. Какие используют гауссовы базисы?
12. Зачем нужно учитывать электронную корреляцию?
13. Какие методы учета учитывают электронную корреляцию?
14. Метод конфигурационного взаимодействия что значит?
15. В чем особенность метода функционала плотности?
16. Какие есть полуэмпирические методы?
17. Что из себя представляет метод CNDO?
18. Какая выгода в расчетах молекул в приближении НДП?
19. Как в НДП выглядит уравнение Рутаана?
20. В каких случаях метод CNDO/2 дает хорошие результаты?
21. Что такое метод INDO?
22. Что из себя представляет метод MINDO/3?
23. Что из себя представляет метод MNDO?
24. Каково относительное время расчета одной и той же молекулы методами CNDO, INDO, MINDO, MNDO и неэмпирические методы?

**Критерии формирования оценок по заданиям для самостоятельной работы студента (типовые задачи):**

**«отлично»** ( \_4\_ баллов) - обучающийся показал глубокие знания материала по поставленным вопросам, грамотно, логично его излагает, структурировал и де-тализовал информацию, избегая простого повторения информации из текста, информация представлена в переработанном виде. Свободно использует необходимые формулы при решении задач;

**«хорошо»** ( \_3\_ балл) - обучающийся твердо знает материал, грамотно его излагает, не допускает существенных неточностей в процессе решения задач;

**«удовлетворительно»** ( \_2\_\_ балла) - обучающийся имеет знания основного материала по поставленным вопросам, но не усвоил его деталей, допускает отдельные неточности при решении задач;

**«неудовлетворительно»** (менее \_\_1\_\_ баллов) – обучающийся допускает грубые ошибки в ответе на поставленные вопросы и при решении задач

## **5.2. Оценочные материалы для рубежного контроля. Рубежный контроль осу-**

ществляется по более или менее самостоятельным разделам – учебным модулям курса и проводится по окончании изучения материала модуля в заранее установленное время. Рубежный контроль проводится с целью определения качества усвоения материала учебного модуля в целом. В течение семестра проводится *три таких контрольных мероприятия по графику*.

В качестве форм рубежного контроля можно использовать тестирование (письменное или компьютерное), проведение коллоквиума или контрольных работ. Выполняемые работы должны храниться на кафедре течения учебного года и по требованию предоставляться в Управление контроля качества. На рубежные контрольные мероприятия рекомендуется выносить весь программный материал (все разделы) по дисциплине.

### **5.2.1. Оценочные материалы для контрольной работы контролируемые компетенции ПК-3)**

#### *Типовые Варианты контрольных работ:*

##### *Вариант 1.*

##### *Задание 1.*

1. Излучение абсолютно черного тела
2. Собственные значения и собственные функции. Теорема 3
3. Оператор момента импульса
4. Докажите, что оператор  $d/dx$  не самосопряженный

##### *Задание 2.*

1. Оператор полной энергии
2. Различные представления операторов. Маточное представление оператора
3. Гипотеза Луи де Бройля
4. Докажите, что оператор  $i\hbar d/dx$  самосопряженный

##### *Задание 3.*

1. Собственные значения и собственные функции оператора
2. Оператор кинетической энергии
3. Статистическое толкование волн де Бройля
4. Является ли оператор  $d^2/dx^2$  самосопряженным?

##### *Задание 4.*

1. Волновая механика Шредингера
2. Основные законы квантовой механики
3. Собственные значения и собственные функции оператора. Теорема 4
4. Докажите, что  $d^2f/dx^2 = -k^2f$  удовлетворяет функциям  $f = \cos kx$ , а также линейная комбинация вида  $f = c_1 \sin kx + c_2 \cos kx$

##### *Задание 5.*

1. Оператор момента импульса в сферической системе координат
2. Оператор полной энергии
3. Собственные значения и собственные функции оператора. Теорема 2
4. Найдите матрицу единичного оператора

##### *Задание 6.*

1. Оператор импульса
2. Собственные значения и собственные функции оператора. Теорема 2
3. Самосопряженные операторы
4. Запишите условия информированности функции  $f(x)$

**Задание 7.**

1. Частица в поле потенциальных сил
2. Собственные значения и собственные функции оператора. Теорема 1
3. Гармонический осциллятор
4. Запишите условия коммутирования двух операторов

**Задание 8.**

1. Частица в кулоновском поле ядра
2. Уравнение Шредингера для стационарного состояния
3. Адиабатический инвариант в классической и квантовой механике
4. Что понимается под термином «вырожденные собственные функции»?

**Задание 9.**

1. Прямоугольный потенциальный барьер
2. Оператор момента импульса
3. Суть гипотезы Планка
4. В чем заключается свойство линейности и самосопряженности операторов?

**Задание 10.**

1. Частица в потенциальной яме
2. Вероятность местонахождения микрочастицы
3. Матрицы и свойства матриц
4. Какой должна быть волновая функция  $\Psi$ , чтобы некоторая физическая характеристика  $L$  не давала разброса значений?

**Критерии формирования оценок по контрольным точкам (контрольные работы; коллоквиум)**

(\_\_7\_\_ баллов) - ставится за работу, выполненную полностью без ошибок и недочетов; обучающийся демонстрирует знание теоретического и практического материала по теме практической работы, решено 100% задач;

(от 5 до 6 \_\_ баллов) – ставится за работу, выполненную полностью, но при наличии в ней не более одной негрубой ошибки и одного недочета, не более трех недочетов. Обучающийся демонстрирует знание теоретического и практического материала по теме практической работы, допуская незначительные неточности при решении задач, решено 70% задач;

(\_\_ от 3 до 4 \_\_ балла) – ставится за работу, если бакалавр правильно выполнил не менее 2/3 всей работы или допустил не более одной грубой ошибки и двух недочетов, не более одной грубой и одной негрубой ошибки, не более трех негрубых ошибок, одной негрубой. Обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, дает неполный ответ, решено 55% задач

(менее \_\_2\_\_ баллов) – ставится за работу, если число ошибок и недочетов превысило норму для оценки 3 или правильно выполнено менее 2/3 всей работы. Обучающийся дает неверную оценку ситуации, решено менее 50% задач.

**5.2.2.Оценочные материалы: Типовые тестовые задания по дисциплине «Квантовая химия»** Полный перечень тестовых заданий представлен в <http://open.kbsu.ru/moodle/course/view.php?id=4343#section-1>

*Тест* – система стандартизированных заданий, позволяющая автоматизировать процедуру измерения уровня знаний и умений студента.

**Выберите правильный ответ**

**Тест1.** Объект который с равной вероятностью испускает и поглощает электромагнитное излучение всех частот называется:

- абсолютно черным телом
- абсолютно светлым телом
- электромагнитным генератором
- квантовым генератором

**Тест2.** Закон Стефана-Больцмана позволяет определить:  
площадь под кривыми распределения интенсивности излучения  
форму кривых распределения интенсивности излучения  
плотность энергии приходящей на единицу интервала частот  
мощность испускания в единичном интервале частот

**Тест3.** Энергия колебаний атомов может принимать:  
не любые значения, но только кратные некоторому наименьшему количеству энергии  
любые отрицательные значения  
любые положительные значения  
нулевые значения

**Тест4.** Оператор  $\hat{AB}$  действует на функцию так:  
сначала на функцию действует оператор В, образуя новую функцию f, на которую затем действует оператор А  
сначала на функцию действует оператор А, образуя новую функцию кси, на которую затем действует оператор В  
каждый оператор действует на функцию f, а затем результаты перемножаются  
каждый оператор действует на функцию f, а затем результаты складываются

**Тест5.** Оператор  $\frac{d^2}{dx^2}$  :

- самосопряженный
- не эрмитов
- не линейен
- не самосопряженный

**Тест6.** В поле центральных сил оператор момента импульса является:  
интегралом движения  
энергией взаимодействия  
адиабатическим инвариантом  
энергией отталкивания

**Тест7.** Штерн и Герлах наблюдали:  
+: расщепление надвое пучка атомов водорода, заведомо находящихся в s-состоянии  
-: расщепление надвое пучка атомов водорода, заведомо находящихся в p-состоянии  
-: расщепление потока электронов на два пучка  
-: дифракцию пучка электронов при прохождении кристаллических веществ

**Тест8.** Свободной называется частица:  
+: потенциальная энергия которой в любой точке пространства одинакова

- : полная энергия которой в любой точке пространства одинакова
- : кинетическая энергия которой в любой точке одинакова
- : разность потенциальной и кинетической энергий в любой точке пространства одинакова

**Тесм9.** Коэффициентом отражения барьера называется отношение величин токов:

+: отраженной и падающей волны

-: прошедшей и падающей волны

-: отраженной и прошедшей волны

-: прошедшей и отраженной волны

**Тесм10.** Переходы на уровень  $n=1$  образуют серию:

+: Лаймана

-: Больмера

-: Пашена

-: Брекета

-: Пфунда

**Тесм11.** Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции в кулоновском поле ядра:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R - \frac{ze^2}{r} R = ER$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{ze^2}{r} R = ER$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R + \frac{ze^2}{r} R = ER$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R + \frac{ze^2}{r} R = ER$$

**Тесм12.** В поле потенциальных сил вероятность найти частицу между  $r$  и  $r+dr$  при  $E>0$ :

$$+: \omega(r)dr \approx 4\pi |C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr}|^2 dr$$

$$-: \omega(r)dr \approx 4\pi |C_1|^2 e^{-2\lambda r} dr$$

$$-: \omega(r)dr \approx 4\pi |C_1 e^{ikr} - C_2 e^{-ikr}|^2 dr$$

$$-: \omega(r)dr \approx 4\pi |C_1|^2 e^{-\lambda r}$$

**Тесм13.** Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{\mu W_0^2}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{\mu W_0^2}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\hat{H} \psi(x) - \frac{\mu W_0^2}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{\mu W_0^2}{2} x^2 \psi(x) = \hat{H} \psi$$

**Тест 14.** Плотность тока отраженной волны:

$$j_r = -\left(\frac{\hbar k_0}{\mu}\right) |B|^2$$

$$j_d = \left(\frac{\hbar k_0}{\mu}\right) |a|^2$$

$$j_0 = \left(\frac{\hbar k_0}{\mu}\right) |A|^2$$

**Тест 15.** При  $0 < x < a$  уравнение Шредингера для частицы в потенциальной яме имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \infty \psi = E \psi$$

$$-\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{dx^2}{d\psi^2} = E \psi$$

$$-\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E \psi = \infty \psi$$

**Критерии формирования оценок по тестовым заданиям:**

(3 балла) – получают обучающиеся с правильным количеством ответов на тестовые вопросы. Выполнено 100 % предложенных тестовых вопросов;

(до 3 балла) – получают обучающиеся с правильным количеством ответов на тестовые вопросы – 80–99 % от общего объема заданных тестовых вопросов;

(\_\_2\_\_ балла) – получают обучающиеся с правильным количеством ответов на тестовые вопросы – 60 –79% от общего объема заданных тестовых вопросов;

(\_\_1\_\_ балл) – получают обучающиеся правильным количеством ответов на тестовые вопросы – менее 40-59 % от общего объема заданных тестовых вопросов.

### **5.2.3.Оценочные материалы для промежуточной аттестации.** *Целью промежуточных аттестаций по дисциплине является оценка качества освоения дисциплины обучающимися.*

Промежуточная аттестация предназначена для объективного подтверждения и оценивания достигнутых результатов обучения после завершения изучения дисциплины. Осуществляется в конце семестра и представляет собой итоговую оценку знаний по дисциплине «УРФА» в виде проведения экзамена.

Промежуточная аттестация может проводиться в устной, письменной форме, и в форме тестирования. На промежуточную аттестацию отводится до 30 баллов.

### **5.2.4.Список вопросов к экзамену(контролируемые компетенции ПК-3)**

1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории.
2. Математический аппарат квантовой механики.
3. Основные постулаты квантовой механики.
4. Операторы физических величин.
5. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Уравнение непрерывности
6. Точно решаемые задачи квантовой механики.
7. Водородоподобный атом.
8. Приближенные методы решения квантово-механических задач.
9. Молекула в постоянном электрическом и магнитных полях.
10. Спин элементарных частиц и связанные с ним магнитные моменты.
11. Система многих частиц.
12. Система тождественных частиц.
13. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движения.
14. Поверхность потенциальной энергии.
15. Электронное волновое уравнение.
16. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока
17. Понятие о методе конфигурационного взаимодействия. Метод валентных схем
18. Электронные конфигурации и термы атомов
19. Учет симметрии и ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи.
20. Гибридизация и гибридные орбитали.
21. Полуэмпирические методы квантовой химии.



22. Классификации электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии.
23. Представление молекулярных орбиталей в виде линейных комбинаций атомных орбиталей. Метод ССП, МО ЛКАО.
24. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.

***Критерии формирования оценок по промежуточной аттестации:***

**«отлично»** (30баллов) – получают обучающиеся, которые свободно ориентируются в материале и отвечают без затруднений. Обучающийся способен к выполнению сложных заданий, постановке целей и выборе путей их реализации. Работа выполнена полностью без ошибок, решено 100% задач;

**«хорошо»** (25балла) – получают обучающиеся, которые относительно полно ориентируются в материале, отвечают без затруднений, допускают незначительное количество ошибок. Обучающийся способен к выполнению сложных заданий. Работа выполнена полностью, но имеются не более одной негрубой ошибки и одного недочета, не более трех недочетов. Допускаются незначительные неточности при решении задач, решено 70% задач;

**«удовлетворительно»** (20 баллов) – получают обучающиеся, у которых недостаточно высок уровень владения материалом. В процессе ответа на экзамене допускаются ошибки и затруднения при изложении материала. Обучающийся правильно выполнил не менее 2/3 всей работы или допустил не более одной грубой ошибки и двух недочетов, не более одной грубой и одной негрубой ошибки, не более трех негрубых ошибок, одной негрубой. Обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, дает неполный ответ, решено 55% задач;

**«неудовлетворительно»** (менее 20 баллов) – получают обучающиеся, которые допускают значительные ошибки. Обучающийся имеет лишь начальную степень ориентации в материале. В работе число ошибок и недочетов превысило норму для оценки 3 или правильно выполнено менее 2/3 всей работы. Обучающийся дает неверную оценку ситуации, решено менее 50% задач.

**6.Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

Максимальная сумма (100 баллов), набираемая студентом по дисциплине включает две составляющие:

– *первая составляющая* – оценка регулярности, своевременности и качества выполнения студентом учебной работы по изучению дисциплины в течение периода изучения дисциплины (семестра, или нескольких семестров) (сумма – не более 70 баллов). Баллы, характеризующие успеваемость студента по дисциплине, набираются им в течение всего периода обучения за изучение отдельных тем и выполнение отдельных видов работ.

– *вторая составляющая* – оценка знаний студента по результатам промежуточной аттестации (не более 30 –баллов).

Критерием оценки уровня сформированности компетенций в рамках учебной дисциплины «Квантовая химия» в V семестре является экзамен.

Общий балл текущего и рубежного контроля складывается из следующих составляющих приложение 2.

***Целью промежуточных аттестаций*** по дисциплине является оценка качества освоения дисциплины обучающимися.

***Критерии оценки качества освоения дисциплины (Приложение)***

**Оценка «отлично»– от 91 до 100 баллов** – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сфор-

мированы. Все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному. На экзамене студент демонстрирует глубокие знания предусмотренного программой материала, умеет четко, лаконично и логически последовательно отвечать на поставленные вопросы.

**Оценка «хорошо» – от 81 до 90 баллов** – теоретическое содержание курса освоено, необходимые практические навыки работы сформированы, выполненные учебные задания содержат незначительные ошибки. На экзамене студент демонстрирует твердое знание основного (программного) материала, умеет четко, грамотно, без существенных неточностей отвечать на поставленные вопросы.

**Оценка «удовлетворительно» – от 61 до 80 баллов** – теоретическое содержание курса освоено не полностью, необходимые практические навыки работы сформированы частично, выполненные учебные задания содержат грубые ошибки. На экзамене студент демонстрирует знание только основного материала, ответы содержат неточности, слабо аргументированы, нарушена последовательность изложения материала

**Оценка «неудовлетворительно» – от 36 до 60 баллов** – теоретическое содержание курса не освоено, необходимые практические навыки работы не сформированы, выполненные учебные задания содержат грубые ошибки, дополнительная самостоятельная работа над материалом курса не приведет к существенному повышению качества выполнения учебных заданий. На экзамене студент демонстрирует незнание значительной части программного материала, существенные ошибки в ответах на вопросы, неумение ориентироваться в материале, незнание основных понятий дисциплины.

**Таблица 7. Результаты освоения учебной дисциплины, подлежащие проверке**

<b>Результаты обучения (компетенции)</b>	<b>Код и наименование индикаторов достижения компетенции</b>	<b>Основные показатели оценки результатов обучения</b>	<b>Вид оценочного материала, обеспечивающие формирование компетенций</b>
<b>ПК-3.</b> Способен проектировать и осуществлять направленный синтез неорганических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	<b>ПК-3.1.</b> Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры неорганических соединений	<b>Знать:</b> основные экспериментальные методы применяемые для определения структуры неорганических соединений <b>Уметь:</b> Калибровать приборы для проведения лабораторного анализа проб (образцов) сырья и полуфабрикатов; строить калибровочные кривые <b>Владеть:</b> навыками работы на лабораторном оборудовании для установления структуры неорганических материалов	Оценочные материалы для самостоятельной работы (типовые задачи раздел 5.1.2.); Типовые оценочные материалы для устного опроса (раздел 5.1.1); ); типовые тестовые задания (раздел 5.2.2.)
	<b>ПК-3.2.</b> Способен изучать реакционную способность неорганических соединений с применением типовых экспериментальных	<b>Знать:</b> характеристики влияющие на реакционную способность химических соединений <b>Уметь:</b> Проводить градуировку средств измерений; строить градуиро-	Оценочные материалы для самостоятельной работы (типовые задачи раздел 5.1.2.); Типовые оценочные материалы для устного опроса (раздел

	и расчётных методов	вочные кривые (таблицы) <b>Владеть:</b> использования компьютерных программ и экспериментальных методов для построения химических и стереохимических формул соединений и других видов иллюстративного материала.	5.1.1); ); типовые тестовые задания (раздел 5.2.2.)
	<b>ПК-3.3.</b> Способен выбрать оптимальный метод синтеза неорганических соединений и методику обработки полученных результатов	<b>Знать:</b> технология производства неорганических соединений; оборудование лаборатории и правила его эксплуатации <b>Уметь:</b> подготавливать исходное сырье, основные и вспомогательные материалы с учетом требований охраны труда <b>Владеть:</b> технологиями оценки научно-практической значимости выбранного метода синтеза неорганических соединений	Оценочные материалы для самостоятельной работы ( типовые задачи раздел 5.1.2.); Типовые оценочные материалы для устного опроса (раздел 5.1.1); ); типовые тестовые задания (раздел 5.2.2.)

## 7. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

### 7.1. Нормативно-законодательные акты

Приказ Минобрнауки России от 17.07.2017 N 671  
(Зарегистрировано в Минюсте России 02.08.2017 N 47644)

1. <http://fgosvo.ru/uploadfiles/fgosvob/040301.pdf>
2. Федеральный закон "Об образовании в Российской Федерации" от 29.12.2012 N 273-ФЗ  
[http://www.consultant.ru/document/cons\\_doc\\_LAW\\_140174/](http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_140174/)

### 7.2. Основная литература

1. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979. 504 с.
2. Мелёшина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1980. 215 с.
3. Мелёшина А.М. Курс квантовой химии: Учеб. пособие. Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та, 1981. -198 с.

4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высш. шк., 1979. 407 с.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул /Серия «Учебники и учебные пособия»ю Ростов-на-Дону: «Феникс» 1997. 560 с.
6. Соколов А.А., Тернов И.М., Жуковский В.Ч. Квантовая механика. М.: Наука, 1979. 6 с.
7. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. –М.: Мир, 2001, - 519 с.
8. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985. 472 с.
9. Физические методы исследования неорганических веществ: Учебное пособие для студентов высших учебных заведений / [Т.Г. Баличева и др.].- под ред. А.Б. Никольского, М.: Издательский центр «академия», 2006.- 448 с.
10. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии. Учебное пособие для химических специальностей вузов.- 330 с.
11. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. Киев: Вища шк., 1975. 304 с.

### **7.3. Дополнительная литература**

1. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. Учебное пособие. М.: Высш.шк., 1989. 303 с.
2. Балашов В.В., Долинов В.К. Курс квантовой механики. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1982. 280 с.
3. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений: Введение в теорию. 3-е изд. Л.: Химия, 1986. 288 с.
4. Болотин А.Б., Степанов Н.Ф. Теория групп и ее применение в квантовой механике молекул. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1973. 227 с.
5. Дей К., Селбин Д. Теоретическая неорганическая химия. 3-е изд. М.: Химия, 1976. 568 с.
6. Дьюар М., Догерти Р. Теория возмущенных молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1977. 695 с.
7. Жидомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Абронин А.И. Прикладная квантовая химия. – М. : Химия, 1979 – 295 с.
8. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990. 381 с.
9. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь: Учеб. пособие. 2-е изд. М.: Высш. шк., 1984. 275 с.
10. Марелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Химическая связь. - М: Мир, 1980. – 386 с.
11. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия рганических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия. 1986. 248 с.
12. Пирсон Р. Правила симметрии в химических реакциях. М.: Мир, 1979. 592 с.
13. Салем Л. Электроны в химических реакциях. М.: Мир, 1985. 285 с.

14. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по квантовой теории молекул. Ростов-на-Дону: Изд-во Ростов. ун-та, 1992.
15. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия: Учеб. пособие. М.: Изд-во Моск ун-та, 1991. 384 с.
16. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения М.: Мир, 1983. 396 с.
17. Флениген М., Коморницки Э., Мак-Ивер Дж. // Полуэмпирические методы расчета электронной структуры./ под ред. Дж. Сигала, Т. 2. – М. : Мир, 1980. С. 5-64.
18. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир, 1989. 494 с.
19. Хофман Р. Строение твердых тел и поверхностей: Взгляд химика-теоретика. М.: Мир, 1990. 214 с.
20. Эткинс П. Кванты: Справочник концепций. М.: Мир, 1977. 496 с.
21. Atkins P.W. Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Press. : Oxford 1990.-471 с.

#### 7.4. Периодические издания

1. Журнал неорганической химии
2. Журнал «Неорганические материалы»
3. Научно-технический журнал <http://www.ofmg.ru>

#### 7.5. Интернет – ресурсы

<http://www.qchem.ru/lectures/>

<http://quant.distant.ru/program.htm>

<http://sukhno.kubsu.ru/index.files/course2.files/course27.htm>

При изучении дисциплины «Квантовая химия», обучающиеся обеспечены доступом (удаленный доступ) к ресурсам:

- **общие информационные, справочные и поисковые:**
  1. Справочная правовая система «Гарант». URL: <http://www.garant.ru>.
  2. Справочная правовая система «Консультант Плюс». URL: <http://www.consultant.ru>
- **к современным профессиональным базам данных:**

№п/п	Наименование электронного ресурса	Краткая характеристика	Адрес сайта	Наименование организации-владельца; реквизиты договора	Условия доступа
1.	ЭБД РГБ	Электронные версии 885898 полных текстов диссертаций и авторефератов из фонда Российской государственной библиотеки	<a href="http://www.diss.rsl.ru">http://www.diss.rsl.ru</a>	ФГБУ «Российская государственная библиотечная»	Авторизованный доступ из библиотеки (к. 112-113)

				лиотека» (РГБ)  <b>Договор №095/04/0 011</b> от 05.02.2022 г.	
2.	<b>«Web of Science» (WOS)</b>	Авторитетнаяполите- матическая рефератив- но-библиографическая и наукометрическая база данных, в которой индексируются око- ло 12,5 тыс. журналов	<a href="http://www.isiknowledge.com/">http://www. isiknowledge e.com/</a>	Компания <u>Thomson Reuters</u> <b>Субли- цензион- ный дого- вор</b> №WoS/558 от 02.04.2018 г.	Доступ по IP- адресам КБГУ
3.	<b>Sciverse Scopus</b> из- дательства «Эльзе- вир. Наука и техно- логии»	Реферативная и анали- тическая база данных, содержащая 21.000 рецензи- руемых журналов; 100.000 книг; 370 книжный серий (про- должающихся изда- ний); 6,8 млн. докла- дов из трудов конфе- ренций	<a href="http://www.scopus.com">http://www. scopus.com</a>	Издатель- ство «Else- vier. Наука и техноло- гии» Контракт №7E/223 от 01.02.2022 г.	Доступ по IP- адресам КБГУ
4.	<b>Научная элек- тронная библио- тека (НЭБ РФФИ)</b>	Электронная библиоте- ка научных публикаций - полнотекстовые вер- сии около 4000 ино- странных и 3900 отече- ственных научных журналов, рефераты публикаций 20 тысяч журналов, а также опи- сания 1,5 млн. зару- бежных и российских диссертаций. 2800 российских жур- налов на безвозмездной основе	<a href="http://elibrary.ru">http://elibrar y.ru</a>	ООО «НЭБ»	Полный доступ
5.	<b>БазаданныхScien- ceIndex (РИНЦ)</b>	Национальная инфор- мационно- аналитическая система,	<a href="http://elibrary.ru">http://elibrar y.ru</a>	ООО «НЭБ» Лицензи-	Авторизованный доступ. Позволяет до-

		аккумулирующая более 6 миллионов публикаций российских авторов, а также информацию об их цитировании из более 4500 российских журналов.		онный договор ScienceIndex №SIO-741/2022 15.03.2022 г.	полнять и уточнять сведения о публикациях ученых КБГУ, имеющихся в РИНЦ
6.	ЭБС «Консультант студента»	13800 изданий по всем областям знаний, включает более чем 12000 учебников и учебных пособий для ВО и СПО, 864 наименований журналов и 917 монографий.	<a href="http://www.studmedlib.ru">http://www.studmedlib.ru</a> <a href="http://www.medcollegelibrary.ru">http://www.medcollegelibrary.ru</a>	ООО «Политехресурс» (г. Москва) <b>Договор №138СЛ/01-2022</b> От 13.02.2022 г.	Полный доступ (регистрация по IP-адресам КБГУ)
7.	ЭБС «Лань»	электронные версии книг ведущих издательств учебной и научной литературы (в том числе университетских издательств), так и электронные версии периодических изданий по различным областям знаний.	<a href="https://e.lanbook.com/">https://e.lanbook.com/</a>	ООО «ЭБС ЛАНЬ» (г. Санкт-Петербург) <b>Договор №3Е/223</b> от 01.02.2022 г.	Полный доступ (регистрация по IP-адресам КБГУ)
8.	Национальная электронная библиотека РГБ	Объединенный электронный каталог фондов российских библиотек, содержащий 4 331 542 электронных документов образовательного и научного характера по различным отраслям знаний	<a href="https://nab.ru">https://nab.ru</a>	ФГБУ «Российская государственная библиотека»	Доступ с электронного читального зала библиотеки КБГУ
9.	ЭБС «АйПиЭр-букс»	107831 публикаций, в т.ч.: 19071 – учебных изданий, 6746 – научных изданий, 700 кол-лекций, 343 журнала ВАК, 2085 аудиоизданий.	<a href="http://iprbookshop.ru/">http://iprbookshop.ru/</a>	ООО «Ай Пи Эр Медиа» (г. Саратов) <b>Договор №4839/19</b> от 01.02.2022 г.	Полный доступ (регистрация по IP-адресам КБГУ)
10.	Международная система библиографических ссылок Crossref	Цифровая идентификация объектов (DOI)	<a href="http://Crossref.com">http://Crossref.com</a>	НП «НЭИКОН» <b>Договор</b>	Авторизованный доступ

				<b>№CRNA-1060-19</b> от 07.05.2022 г.	
11.	<b>Polpred.com. Новости. Обзор СМИ. Россия и зарубежье</b>	Обзор СМИ России и зарубежья. Полные тексты + аналитика из 600 изданий по 53 отраслям	<a href="http://polpred.com">http://polpred.com</a>	ООО «Полпред справочники»	Доступ по IP-адресам КБГУ
12.	<b>Президентская библиотека им. Б.Н. Ельцина</b>	Более 500 000 электронных документов по истории Отечества, российской государственности, русскому языку и праву	<a href="http://www.prilib.ru">http://www.prilib.ru</a>	ФГБУ «Президентская библиотека им. Б.Н. Ельцина» (г. Санкт-Петербург)	Авторизованный доступ из библиотеки (ауд. №214)

– Кроме того, обучающиеся могут воспользоваться профессиональными поисковыми системами:

1. Служба тематических толковых словарей <http://glossary.ru/>
2. Словари и энциклопедии <https://dic.academic.ru/>
3. Википедия <http://ru.wikipedia.org/wiki/>
4. Современные профессиональные базы данных (в том числе международные реферативные базы данных научных изданий) и информационные справочные системы

1	<u>Nature</u>	Один из самых старых и авторитетных <u>общенаучных журналов</u> . Публикует исследования, посвящённые широкому кругу вопросов, в основном <u>естественно-научной</u> тематики. С 2005 года журнал публикует <u>подкасты</u> , где вкратце обсуждаются достижения науки и публикации за последнюю неделю – две.	Доступ <b>свободный</b> <a href="http://www.nature.com">www.nature.com</a> <a href="http://archive.neicon.ru">archive.neicon.ru</a>
2	<u>SpringerMaterials</u>	Springer Materials – это самая полная база данных, описывающая свойства и характеристики материалов. Она аккумулирует информацию из таких дисциплин, как материаловедение, физика, физическая и неорганическая химия, машиностроение и др.	Ресурс доступен по IP-адресам ТУСУРа <a href="http://materials.springer.com">materials.springer.com</a>
3	<u>Журналы издательства Annual Reviews</u>	Является некоммерческим академическим издательством, печатающим около 40 серий (журналов, ежегодников), публикующих крупные обзорные статьи о достижениях в области естественных и	<a href="http://archive.neicon.ru">archive.neicon.ru</a>



		социальных наук. Более половины из этих журналов имеют высочайший уровень цитирования по Импакт-фактор (Science Citation Index), занимая первые места в своих категориях наук.	
4	<u>Журналы издательства Oxford University Press</u>	Это полнотекстовая база данных журналов издательства Оксфордского университета. Ресурс англоязычный, содержит материалы по общественным и гуманитарным, естественным и техническим наукам, информатике, медицине, здравоохранению и др.	<a href="http://archive.neicon.ru">archive.neicon.ru</a>
5	<u>Цифровой архив журналов издательства Royal Society of Chemistry</u>	Журналы Royal Society of Chemistry – авторитетные научные издания, что подтверждается их высокими показателями в Journal Citation Reports. В категории «Химия. Мультидисциплинарные исследования» среди первых по рангу 20 журналов 6 издаются Royal Society of Chemistry. Все другие издательства представлены меньшим количеством журналов в топ-20.	<a href="http://pubs.rsc.org">pubs.rsc.org</a>
6	<u>Патентная база USPTO</u>	Эти базы данных предназначены для использования широкой публикой. Из-за ограничений оборудования и пропускной способности они не предназначены для массового скачивания данных USPTO. Для получения дополнительной информации об объемных данных USPTO, посетите страницу <u>Электронные продукты данных</u> .	<a href="http://patft.uspto.gov">patft.uspto.gov</a>

- 2.
- 3.

## 7.6. Методические указания по проведению различных учебных занятий и самостоятельной работы

Учебная работа по дисциплине Квантовая химия состоит из контактной работы (лекции, практические занятия) и самостоятельной работы. Соотношение лекционных, семинарских, лабораторных и практических занятий к общему количеству часов соответствует учебному плану Направления 04.03.01 – Химия, профиль «Профиль «Неорганическая химия и химия координационных соединений», «Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность».

Для подготовки к практическим занятиям необходимо рассмотреть контрольные вопросы, при необходимости обратиться к рекомендуемой литературе, записать непонятные моменты в вопросах для уяснения их на предстоящем занятии.

**Методические рекомендации по изучению дисциплины «Квантовая химия» для обучающихся**

Цель курса «Квантовая химия» - является формировать и раскрыть смыслы основных законов и знаний у студентов в области квантовой химии, научить студентов видеть области применения этих законов и знаний, понимать их принципиальные возможности при решении конкретных задач.

Приступая к изучению дисциплины, обучающемуся необходимо ознакомиться с тематическим планом занятий, списком рекомендованной учебной литературы. Следует уяснить последовательность выполнения индивидуальных учебных заданий, занести в свою рабочую тетрадь темы и сроки проведения семинаров, написания учебных и творческих работ. При изучении дисциплины обучающиеся выполняют следующие задания: изучают рекомендованную учебную и научную литературу; пишут контрольные работы, готовят доклады и сообщения к практическим занятиям; выполняют самостоятельные творческие работы, участвуют в выполнении практических заданий. Уровень и глубина усвоения дисциплины зависят от активной и систематической работы на лекциях, изучения рекомендованной литературы, выполнения контрольных письменных заданий

Курс изучается на лекциях, семинарах, и при самостоятельной и индивидуальной работе обучающихся. Обучающийся для полного освоения материала должен не пропускать занятия и активно участвовать в учебном процессе. Для максимальной эффективности изучения необходимо постоянно вести конспект лекций, знать рекомендуемую преподавателем литературу, позволяющую дополнить знания и лучше подготовиться к семинарским занятиям.

В соответствии с учебным планом на каждую тему выделено необходимое количество часов практических занятий, которые проводятся в соответствии с вопросами, рекомендованными к изучению по определенным темам. Обучающиеся должны регулярно готовиться к семинарским занятиям и участвовать в обсуждении вопросов. При подготовке к занятиям следует руководствоваться конспектом лекций и рекомендованной литературой. Тематический план дисциплины, учебно-методические материалы, а также список рекомендованной литературы приведены в рабочей программе

#### ***Методические рекомендации при работе над конспектом во время проведения лекции***

В процессе лекционных занятий целесообразно конспектировать учебный материал. Для этого используются общие и утвердившиеся в практике правила, и приемы конспектирования лекций:

Конспектирование лекций ведется в специально отведенной для этого тетради, каждый лист которой должен иметь поля, на которых делаются пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений.

Целесообразно записывать тему и план лекций, рекомендуемую литературу к теме. Записи разделов лекции должны иметь заголовки, подзаголовки, красные строки. Для выделения разделов, выводов, определений, основных идей можно использовать цветные карандаши и фломастеры.

Названные в лекции ссылки на первоисточники надо пометить на полях, чтобы при самостоятельной работе найти и вписать их. В конспекте дословно записываются определения понятий, категорий и законов. Остальное должно быть записано своими словами.

Каждому студенту необходимо выработать и использовать допустимые сокращения наиболее распространенных терминов и понятий.

#### ***Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям***

Практические (семинарские) занятия – составная часть учебного процесса, групповая форма занятий при активном участии студентов. Практические занятия способствуют углубленному изучению наиболее сложных проблем науки и служат основной формой подведения итогов самостоятельной работы обучающихся. Целью практических занятий является углубление и закрепление теоретических знаний, полученных обучающимися на лекциях и в процессе самостоятельного изучения учебного материала, а, следовательно, формирование у них определенных умений и навыков.

В ходе подготовки к семинарскому занятию необходимо прочитать конспект лекции, изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, выполнить выданные преподавателем практические задания. При этом учесть рекомендации преподавателя и требования программы. Дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы.

Желательно при подготовке к практическим занятиям по дисциплине одновременно использовать несколько источников, раскрывающих заданные вопросы.

На практических занятиях обучающиеся учатся грамотно излагать проблемы, свободно высказывать свои мысли и суждения, рассматривают ситуации, способствующие развитию профессиональной компетентности. Следует иметь в виду, что подготовка к практическому занятию зависит от формы, места проведения семинара, конкретных заданий и поручений. Это может быть написание доклада, эссе, реферата (с последующим их обсуждением), коллоквиум.

### ***Методические рекомендации по организации самостоятельной работы***

Самостоятельная работа обучающихся - способ активного, целенаправленного приобретения студентом новых для него знаний и умений без непосредственного участия в этом процесса преподавателей. Повышение роли самостоятельной работы обучающихся при проведении различных видов учебных занятий предполагает:

- оптимизацию методов обучения, внедрение в учебный процесс новых технологий обучения, повышающих производительность труда преподавателя, активное использование информационных технологий, позволяющих обучающемуся в удобное для него время осваивать учебный материал;
- широкое внедрение компьютеризированного тестирования;
- совершенствование методики проведения практик и научно-исследовательской работы обучающихся, поскольку именно эти виды учебной работы в первую очередь готовят обучающихся к самостоятельному выполнению профессиональных задач;
- модернизацию системы курсового и дипломного проектирования, которая должна повышать роль студента в подборе материала, поиске путей решения задач.

Самостоятельная работа приводит студента к получению нового знания, упорядочению и углублению имеющихся знаний, формированию у него профессиональных навыков и умений. Самостоятельная работа выполняет ряд функций:

- развивающую;
- информационно-обучающую;
- ориентирующую и стимулирующую;
- воспитывающую;
- исследовательскую.

В рамках курса выполняются следующие виды самостоятельной работы:

1. Проработка учебного материала (по конспектам, учебной и научной литературе);
2. Выполнение разноуровневых задач и заданий;
3. Работа с тестами и вопросами для самопроверки;

#### 4. Выполнение итоговой контрольной работы.

Студентам рекомендуется с самого начала освоения курса работать с литературой и предлагаемыми заданиями в форме подготовки к очередному аудиторному занятию. При этом актуализируются имеющиеся знания, а также создается база для усвоения нового материала, возникают вопросы, ответы на которые студент получает в аудитории.

Необходимо отметить, что некоторые задания для самостоятельной работы по курсу имеют определенную специфику. При освоении курса студент может пользоваться библиотекой вуза, которая в полной мере обеспечена соответствующей литературой. Значительную помощь в подготовке к очередному занятию может оказать имеющийся в учебно-методическом комплексе краткий конспект лекций. Он же может использоваться и для закрепления полученного в аудитории материала. Самостоятельная работа студентов предусмотрена учебным планом и выполняется в обязательном порядке. Задания предложены по каждой изучаемой теме и могут готовиться индивидуально или в группе. По необходимости студент может обращаться за консультацией к преподавателю. Выполнение заданий контролируется и оценивается преподавателем.

Для успешного самостоятельного изучения материала сегодня используются различные средства обучения, среди которых особое место занимают информационные технологии разного уровня и направленности: электронные учебники и курсы лекций, базы тестовых заданий и задач. Электронный учебник представляет собой программное средство, позволяющее представить для изучения теоретический материал, организовать апробирование, тренаж и самостоятельную творческую работу, помогающее студентам и преподавателю оценить уровень знаний в определенной тематике, а также содержащее необходимую справочную информацию. Электронный учебник может интегрировать в себе возможности различных педагогических программных средств: обучающих программ, справочников, учебных баз данных, тренажеров, контролирующих программ.

Для успешной организации самостоятельной работы все активнее применяются разнообразные образовательные ресурсы в сети Интернет: системы тестирования по различным областям, виртуальные лекции, лаборатории, при этом пользователю достаточно иметь компьютер и подключение к Интернету для того, чтобы связаться с преподавателем, решать вычислительные задачи и получать знания. Использование сетей усиливает роль самостоятельной работы студента и позволяет кардинальным образом изменить методику преподавания.

Студент может получать все задания и методические указания через сервер, что дает ему возможность привести в соответствие личные возможности с необходимыми для выполнения работ трудозатратами. Студент имеет возможность выполнять работу дома или в аудитории. Большое воспитательное и образовательное значение в самостоятельном учебном труде студента имеет самоконтроль. Самоконтроль возбуждает и поддерживает внимание и интерес, повышает активность памяти и мышления, позволяет студенту своевременно обнаружить и устранить допущенные ошибки и недостатки, объективно определить уровень своих знаний, практических умений. Самое доступное и простое средство самоконтроля с применением информационно-коммуникационных технологий - это ряд тестов «on-line», которые позволяют в режиме реального времени определить свой уровень владения предметным материалом, выявить свои ошибки и получить рекомендации по самосовершенствованию.

#### ***Методические рекомендации по работе с литературой***

Всю литературу можно разделить на учебники и учебные пособия, оригинальные научные монографические источники, научные публикации в периодической печати. Из них можно выделить литературу основную (рекомендуемую), дополнительную и литературу для углубленного изучения дисциплины.

Изучение дисциплины следует начинать с учебника, поскольку учебник – это книга, в которой изложены основы научных знаний по определенному предмету в соответствии с целями и задачами обучения, установленными программой.

При работе с литературой необходимо учитывать, что имеются различные виды чтения, и каждый из них используется на определенных этапах освоения материала.

*Предварительное* чтение направлено на выявление в тексте незнакомых терминов и поиск их значения в справочной литературе. В частности, при чтении указанной литературы необходимо подробнейшим образом анализировать понятия.

*Сквозное чтение* предполагает прочтение материала от начала до конца. Сквозное чтение литературы из приведенного списка дает возможность студенту сформировать свод основных понятий из изучаемой области и свободно владеть ими.

*Выборочное* – наоборот, имеет целью поиск и отбор материала. В рамках данного курса выборочное чтение, как способ освоения содержания курса, должно использоваться при подготовке к практическим занятиям по соответствующим разделам.

*Аналитическое чтение* – это критический разбор текста с последующим его конспектированием. Освоение указанных понятий будет наиболее эффективным в том случае, если при чтении текстов студент будет задавать к этим текстам вопросы. Часть из этих вопросов сформулирована в ФОС в перечне вопросов для собеседования. Перечень этих вопросов ограничен, поэтому важно не только содержание вопросов, но сам принцип освоения литературы с помощью вопросов к текстам.

Целью *изучающего* чтения является глубокое и всестороннее понимание учебной информации. Есть несколько приемов изучающего чтения:

1. Чтение по алгоритму предполагает разбиение информации на блоки: название; автор; источник; основная идея текста; фактический материал; анализ текста путем сопоставления имеющихся точек зрения по рассматриваемым вопросам; новизна.

2. Прием постановки вопросов к тексту имеет следующий алгоритм:

- медленно прочитать текст, стараясь понять смысл изложенного;
- выделить ключевые слова в тексте;
- постараться понять основные идеи, подтекст и общий замысел автора.

3. Прием тезирования заключается в формулировании тезисов в виде положений, утверждений, выводов.

К этому можно добавить и иные приемы: прием реферирования, прием комментирования.

Важной составляющей любого солидного научного издания является список литературы, на которую ссылается автор. При возникновении интереса к какой-то обсуждаемой в тексте проблеме всегда есть возможность обратиться к списку относящейся к ней литературы. В этом случае вся проблема как бы разбивается на составляющие части, каждая из которых может изучаться отдельно от других. При этом важно не терять из вида общий контекст и не погружаться чрезмерно в детали, потому что таким образом можно не увидеть главного.

Подготовка к экзамену должна проводиться на основе лекционного материала, материала практических занятий с обязательным обращением к основным учебникам по курсу. Это позволит исключить ошибки в понимании материала, облегчит его осмысление, прокомментирует материал многочисленными примерами.

### ***Методические рекомендации для подготовки к экзамену:***

Экзамен в V-м семестре является формой итогового контроля знаний и умений обучающихся по данной дисциплине, полученных на лекциях, практических занятиях и в процессе самостоятельной работы. Основой для определения оценки служит уровень усвоения обучающимися материала, предусмотренного данной рабочей программой. К экзамену допускаются студенты, набравшие 36 и более баллов по итогам текущего и промежуточного контроля. На экзамене студент может набрать от 15 до 30 баллов.

В период подготовки к экзамену обучающиеся вновь обращаются к учебно-методическому материалу и закрепляют промежуточные знания.

Подготовка обучающегося к экзамену включает три этапа:

- самостоятельная работа в течение семестра;
- непосредственная подготовка в дни, предшествующие экзамену по темам курса;
- подготовка к ответу на экзаменационные вопросы.

При подготовке к экзамену обучающимся целесообразно использовать материалы лекций, учебно-методические комплексы, нормативные документы, основную и дополнительную литературу.

На экзамен выносится материал в объеме, предусмотренном рабочей программой учебной дисциплины за семестр. Экзамен проводится в письменной / устной форме.

При проведении экзамена в письменной (устной) форме, ведущий преподаватель составляет экзаменационные билеты, которые включают в себя: тестовые задания; теоретические задания; задачи или ситуации. Формулировка теоретических задания совпадает с формулировкой перечня экзаменационных вопросов, доведенных до сведения обучающихся накануне экзаменационной сессии. Содержание вопросов одного билета относится к различным разделам программы с тем, чтобы более полно охватить материал учебной дисциплины.

В аудитории, где проводится устный экзамен, должно одновременно находиться не более шести студентов на одного преподавателя, принимающего экзамен. На подготовку ответа на билет на экзамене отводится 40 минут.

При проведении письменного экзамена на работу отводится 60 минут.

Результат устного (письменного) экзамена выражается оценками:

**Оценка «отлично» – от 91 до 100 баллов** – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы. Все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному. На экзамене студент демонстрирует глубокие знания предусмотренного программой материала, умеет четко, лаконично и логически последовательно отвечать на поставленные вопросы.

**Оценка «хорошо» – от 81 до 90 баллов** – теоретическое содержание курса освоено, необходимые практические навыки работы сформированы, выполненные учебные задания содержат незначительные ошибки. На экзамене студент демонстрирует твердые знания основного (программного) материала, умеет четко, грамотно, без существенных неточностей отвечать на поставленные вопросы.

**Оценка «удовлетворительно» – от 61 до 80 баллов** – теоретическое содержание курса освоено не полностью, необходимые практические навыки работы сформированы частично, выполненные учебные задания содержат грубые ошибки. На экзамене студент демонстрирует знание только основного материала, ответы содержат неточности, слабо аргументированы, нарушена последовательность изложения материала

**Оценка «неудовлетворительно» – от 36 до 60 баллов** – теоретическое содержание курса не освоено, необходимые практические навыки работы не сформированы, выполненные учебные задания содержат грубые ошибки, дополнительная самостоятельная работа над материалом курса не приведет к существенному повышению качества выполнения учебных заданий. На экзамене студент демонстрирует незнание значительной части программного материала, существенные ошибки в ответах на вопросы, неумение ориентироваться в материале, незнание основных понятий дисциплины

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

## 8.1. Требования к материально-техническому обеспечению

Для реализации рабочей программы дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы и помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования. Специальные помещения укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления информации большой аудитории.

Для проведения занятий лекционного типа имеются демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия. По дисциплине «Квантовая химия» имеются презентации по отдельным темам курса, позволяющие наиболее эффективно освоить представленный учебный материал.

При проведении занятий лекционного/ семинарского типа занятий используются:

**лицензионное программное обеспечение:**

### **Перечень лицензионного программного обеспечения КБГУ 2022**

№	Наименование программы, право использования которой предоставляется	Страна происхождения	Срок действия программного обеспечения	Кол-во
1.	Лицензия на программное обеспечение средств антивирусной защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный Russian Edition. 1000-1500 Node 1 year Educational Renewal License (KL4863RAVFQ)	Российская Федерация	12 месяцев	1300
2.	Лицензия на офисное программное обеспечение МойОфис Стандартный	Российская Федерация	бессрочно	1300
3.	Лицензия на программное обеспечение для поиска заимствований в текстовых документах распространённых форматов Антиплагиат ВУЗ (2000 проверок)	Российская Федерация	12 месяцев	1
4.	Лицензия на учебную систему автоматизированного проектирования (САПР) «Грация»	Российская Федерация	12 месяцев	8
5.	CRM-система Программа для ЭВМ "1С-Битрикс: Управление сайтом". Лицензия Старт	Российская Федерация	12 месяцев	19
6.	Права на программное обеспечение универсальная система для всестороннего статистического анализа и визуализации данных на 500 пользователей. Statistica Ultimate Academic for Windows 10 Russian/13 English на 500 пользователей Локальная версия (Named User) Годовая лицензия	США	12 месяцев	1
7.	Права на программное обеспечение средство разработки Embarcadero RAD Studio Concurrent Academic Edition 1Year Term License	США	12 месяцев	34

8.	Права на программное обеспечение для работы с PDF-документами. ABBYY FineReader 15 Business	Российская Федерация	12 месяцев	15
9.	Права на программное обеспечение для ведения бухгалтерского и налогового учета 1С:Бухгалтерия государственного учреждения 8 ПРОФ. Электронная поставка	Российская Федерация	12 месяцев	16
10.	Лицензия на программное средство-видеоредактор Movavi видеоредактор 15 SE Academic Edition	Российская Федерация	бессрочно	70
11.	Лицензия на программное средство для записи (захвата) видео с экрана Movavi Screen Capture Pro (Movavi Screen Recorder)	Российская Федерация	бессрочно	70
12.	Платформа для проведения вебинаров Vuebinar	Российская Федерация	12 месяцев	1
<b>Итого общий размер лицензионного вознаграждения:</b>				

## 8.2 Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Для студентов с ограниченными возможностями здоровья созданы специальные условия для получения образования. В целях доступности получения высшего образования по образовательным программам инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья университетом обеспечивается:

1. Альтернативная версия официального сайта в сети «Интернет» для слабовидящих;
2. Для инвалидов с нарушениями зрения (слабовидящие, слепые)
  - присутствие ассистента, оказывающего обучающемуся необходимую помощь, дублирование вслух справочной информации о расписании учебных занятий; наличие средств для усиления остаточного зрения, брайлевской компьютерной техники, видеоувеличителей, программ не визуального доступа к информации, программ-синтезаторов речи и других технических средств приема-передачи учебной информации в доступных формах для студентов с нарушениями зрения;
  - задания для выполнения на экзамене зачитываются ассистентом;
  - письменные задания выполняются на бумаге, надиктовываются ассистенту обучающимся;
3. Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху (слабослышащие, глухие):
  - на зачете/экзамене присутствует ассистент, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (он помогает занять рабочее место, передвигаться, прочитать и оформить задание, в том числе записывая под диктовку);
  - зачет/экзамен проводится в письменной форме;
4. Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, созданы материально-технические условия обеспечивающие возможность беспрепятственного доступа обучающихся в учебные помещения, объекты питания, туалетные и другие помещения университета, а также пребывания в указанных помещениях (наличие расширенных дверных проемов, поручней и других приспособлений).
  - письменные задания выполняются на компьютере со специализированным программным обеспечением или надиктовываются ассистенту;



- по желанию студента экзамен проводится в устной форме.

Обучающиеся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья обеспечены электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

**Приложение 1**  
**ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ (ДОПОЛНЕНИЙ)**

в рабочую программу по дисциплине «Квантовая химия» по направлению  
подготовки 04.03.01 –Химия на 2023-2024 учебный год

№п/п	Элемент (пункт) РПД	Перечень вносимых изменений (дополнений)	Примечание

Обсуждена и рекомендована на заседании кафедры Неорганической и физической химии протокол № \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2022г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / Х.Б.Кушхов /

## Приложение 2

### Распределение баллов текущего и рубежного контроля (на усмотрение автора)

№п /п	Вид контроля	Сумма баллов			
		Общая сумма	1-я точка	2-я точка	3-я точка
1	Посещение занятий	до 10 баллов	до 3 б.	до 3б.	до 4б.
2	Текущий контроль:	до 30 баллов	до 10 б.	до 10 б.	до 10 б.
	Практические занятия	от 0 до 18 б.	от 0 до 6 б.	от 0 до 6 б.	от 0 до 6 б.
	Выполнение самостоятельных заданий (решение задач )	от 0 до 12б.	от 0 до 4 б.	от 0 до 4 б	от 0 до 4 б
3	Рубежный контроль	до 30 баллов	до 10 б.	до 10 б.	до 10 б.
	тестирование	от 0- до 9б.	от 0- до 3б.	от 0- до 3б.	от 0- до 3б.
	коллоквиум	от 0 до 21б.	от 0 до 7 б.	от 0 до 7 б.	от 0 до 7 б.
	<b>Итого сумма текущего и рубежного контроля</b>	<b>до 70баллов</b>	<b>до 23б.</b>	<b>до 23б</b>	<b>до 24б</b>
	<b>оценка «удовлетворительно»</b>	не менее 36 б.	не менее 12 б.	не менее 12 б	не менее 12 б
	<b>оценка «хорошо»</b>	менее 70 б. (51-69 б.)	менее 23 б	менее 23 б	менее 24б
	<b>оценка «отлично»</b>	не менее 70 б.	не менее 23 б.	не менее 23 б	не менее 24б

Шкала оценивания планируемых результатов обучения

Текущий и рубежный контроль

Семестр	Шкала оценивания			
	0-35 баллов	36-50 баллов	51-60 баллов	61-70 баллов
Второй	Частичное посещение аудиторных занятий. Неудовлетворительное выполнение домашнего задания. Плохая подготовка к балльно-рейтинговым мероприятиям. Студент не допускается к промежуточной аттестации	Полное или частичное посещение аудиторных занятий. Частичное выполнение домашнего задания. Частичное выполнение заданий для самостоятельной работы, тестовых заданий, ответы на коллоквиуме на оценку «удовлетворительно».	Полное или частичное посещение аудиторных занятий. Полное выполнение домашнего задания. Выполнение заданий для самостоятельной работы, тестовых заданий, ответы на коллоквиуме на оценку «хорошо».	Полное посещение аудиторных занятий. Полное выполнение домашнего задания. Выполнение заданий для самостоятельной работы, тестовых заданий, ответы на коллоквиуме на оценку «отлично».

Промежуточная аттестация

Семестр	Шкала оценивания			
	Неудовлетворительно (36-60 баллов)	Удовлетворительно (61-80 баллов)	Хорошо (81-90 баллов)	Отлично (91-100 баллов)
Второй	Студент имеет 36-60 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене не дал полного ответа ни на один вопрос. Студент имеет 36-45 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене дал полный ответ только на один вопрос	Студент имеет 36-50 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене дал полный ответ на один вопрос и частично ответил на второй. Студент имеет 46-60 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене дал полный ответ на один вопрос или частично ответил на оба вопроса. Студент имеет по итогам текущего и рубежного контроля 61-70 бал-	Студент имеет 51-60 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене дал полный ответ на один вопрос и частично ответил на второй. Студент имеет 61 – 65 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене дал полный ответ на один вопрос и частично ответил на второй. Студент имеет 66-70	Студент имеет 61-70 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене дал полный ответ на оба вопроса.

		лов на экзамене не дал полного ответа ни на один вопрос.	баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене дал полный ответ только на один вопрос.	
--	--	----------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------	--