

МИНПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
"Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого"
(ФГБОУ ВО "ТГПУ им. Л.Н. Толстого")

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
Строение молекул и основы квантовой химии

рабочая программа дисциплины (модуля)

| | |
|------------------------|---|
| Закреплена за кафедрой | кафедра химии |
| ОПОП | Направление 04.03.01 Химия направленность (профиль) Медицинская и фармацевтическая химия |
| Квалификация | Бакалавр |
| Год начала подготовки | 2023 |
| Форма обучения | очная |
| Общая трудоемкость | 3 з.е. |

Виды контроля по семестрам:
зачет 3

| Семестр(Курс.Номер семестра на курсе) | 3(2.1) | | Итого | |
|---------------------------------------|--------|-----|-------|-----|
| | УП | РПД | УП | РПД |
| Лекции | 16 | 16 | 16 | 16 |
| Лабораторные | 44 | 44 | 44 | 44 |
| Итого ауд. | 60 | 60 | 60 | 60 |
| КСР | 4 | 4 | 4 | 4 |
| Контактная работа | 64 | 64 | 64 | 64 |
| Сам. работа | 44 | 44 | 44 | 44 |
| Часы на контроль | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Практическая подготовка | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Семинары | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Консультации | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Итого трудоемкость в часах | 108 | 108 | 108 | 108 |

Программу составил(и):

к.х.н., доцент, Блохин И.В.

Рабочая программа дисциплины

Строение молекул и основы квантовой химии

разработана в соответствии с ФГОС:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия (приказ Минобрнауки России от 17.07.2017 г. № 671)

составлена на основании учебного плана:

Направление 04.03.01 Химия

направленность (профиль) Медицинская и фармацевтическая химия

утвержденного Учёным советом вуза от 27.10.2022 протокол № 13.

РПД утверждена Учёным советом университета

протокол от 27.10.2022 г. № 13

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» является изучение основных положений квантовой химии, необходимых для понимания теоретического аппарата квантовой механики, понятий и современных методов квантовой химии, чтобы ясно представлять, какими способами и на основе каких приближений можно рассчитывать молекулы и интерпретировать результаты химического эксперимента, без которых невозможно глубокое понимание и решение проблем современной химии.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

| | |
|--------------------|--|
| Цикл (раздел) ООП: | Б1.О.11 |
| 2.1 | Требования к предварительной подготовке обучающегося: |
| 1. | Информатика |
| 2. | Хеометрика |
| 3. | История и методология химии |
| 4. | Основы микробиологии |
| 2.2 | Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее: |
| 1. | Неорганический синтез |
| 2. | Физическая химия |
| 3. | Экологическая безопасность |
| 4. | Коллоидная химия |
| 5. | Органическая химия |
| 6. | Основы токсикологической химии |
| 7. | Основы фармакогнозии |
| 8. | Физико-химические методы анализа |
| 9. | Биологически активные вещества |
| 10. | Биохимия |
| 11. | Методы анализа лекарственных веществ |
| 12. | Основы медицинской химии |
| 13. | Основы фармацевтической химии |
| 14. | Практикум по решению задач |
| 15. | Решение задач повышенной сложности |
| 16. | Химическая технология |
| 17. | Анализ объектов окружающей среды |
| 18. | Биотехнология |
| 19. | Органический синтез |
| 20. | Производственная технологическая практика |
| 21. | Химия высокомолекулярных соединений |
| 22. | Молекулярная биология |
| 23. | Производственная преддипломная практика |

3. СООТНЕСЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ) С ИНДИКАТОРАМИ ДОСТИЖЕНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ

3.1 Компетенции обучающегося и индикаторы их достижения:

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

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

| | |
|---------|--|
| ОПК-3.2 | Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности |
|---------|--|

| | |
|--|--|
| | Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности |
|--|--|

ПК-1: Способен применять фундаментальные знания химии для решения профессиональных задач разного уровня

| | |
|--------|--|
| ПК-1.1 | Применяет на практике фундаментальные знания из различных областей химии |
|--------|--|

3.2 Результаты обучения по дисциплине:

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

| | |
|-----|---|
| | Знать: |
| 3.1 | основные законы и приближения квантовой механики, современную теорию строения молекул, понимать природу и особенности химической связи. |
| | Уметь: |
| У.1 | использовать полученные знания для оценки строения молекул, природы химической связи, установления корреляций строение – свойства молекул, объяснять на этой основе реакционную способность молекул и механизм реакций. |
| | Владеть: |
| В.1 | современными квантово-химическими методами расчета молекул на основе программных средств с помощью компьютеров. |

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

| Код занятия | Наименование разделов и тем /вид занятия/ | Семестр / Курс | Часов | Литература | Содержание |
|-------------|---|----------------|-------|--|---|
| | Тема 1. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии | | | | |
| 1.1 | Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии /Лек/ | 3 | 2 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки. Перспективы ее развития и применения при решении прикладных химических задач. Атомные единицы измерения. Относительные энергии физических процессов. Методы компьютерной квантовой химии. Современные основные программные квантово-химические комплексы ChemOffice, Gamess, Gaussian, HyperChem, MOPAC. |
| 1.2 | Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии /Лаб/ | 3 | 4 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Выполнение лабораторных работ из методического пособия |
| 1.3 | Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии /Ср/ | 3 | 4 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение задач и упражнений из методического пособия |
| | Тема 2. Теории строения атомов | | | | |
| 2.1 | Теории строения атомов /Лек/ | 3 | 2 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | История развития представлений о строении атомов и молекул. Открытие явления радиоактивности. Определение радиоактивности Беккерелем. Современное определение. Явление фотоэффекта. Объяснение появления фототока с позиции теории Эйнштейна. Открытие рентгеновских лучей. Атомные спектры. Уравнение Бальмера. Спектральные серии. Теории Резерфорда и Бора. Основы квантовой механики. Работы Луи де Бройля, Гейзенберга, Воображаемый эксперимент, уравнение Шредингера. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновая функция. Математические требования к волновой функции. Основные положения современной теории строения атомов. |

| | | | | | |
|-----|---|---|---|--|--|
| 2.2 | Теории строения атомов /Лаб/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Выполнение лабораторных работ из методического пособия |
| 2.3 | Теории строения атомов /Ср/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение задач и упражнений из методического пособия |
| | Тема 3. Приближенные методы решения уравнения Шредингера | | | | |
| 3.1 | Приближенные методы решения уравнения Шредингера /Лек/ | 3 | 2 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение простейших задач квантовой химии: атом водорода, многоэлектронный атом Принцип решения волнового уравнения для атома водорода. Декартова система координат. Квантовые числа. Принципы заполнения атомных орбиталей электронами. Способы изображения атомных орбиталей. Кривые радиального распределения электронной плотности. Способы изображения атомных орбиталей. Угловое распределение электронной плотности. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод самосогласованного поля. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод констант экранирования. |
| 3.2 | Приближенные методы решения уравнения Шредингера /Лаб/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Выполнение лабораторных работ из методического пособия |
| 3.3 | Приближенные методы решения уравнения Шредингера /Ср/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение задач и упражнений из методического пособия |
| | Тема 4. Описание ковалентной химической связи | | | | |
| 4.1 | Описание ковалентной химической связи /Лек/ | 3 | 2 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Метод ВС. Основные положения метода ВС. Канонические и резонансные структуры. Перекрытие атомных орбиталей. Интеграл перекрытия. Свойства химической связи по методу ВС. Насыщаемость. Понятие ковалентности. Направленность. Гибридизация АО. . Метод отталкивания электронных пар. Теория Геллеспи. Поляризуемость. Поляризующие действие. Виды связи по симметрии. Метод МО. Основные положения метода МО. Образование МО из исходных АО. Принципы заполнения МО электронами. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул (элементы 1 периода). Энергетические диаграммы гомоядерных молекул (элементы 2 периода). Энергетические диаграммы гетероядерных молекул (NO, BeH2, BeF2, H2O, CO, CO2, CH4, CN-, BF3). Энергетические диаграммы электронодефицитных молекул (B2H6). Сравнительная характеристика методов МО и ВС. |

| | | | | | |
|-----|---|---|---|--|---|
| 4.2 | Описание ковалентной химической связи /Лаб/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Выполнение лабораторных работ из методического пособия |
| 4.3 | Описание ковалентной химической связи /Ср/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение задач и упражнений из методического пособия |
| | Тема 5. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Метод самосогласованного поля Хартри – Фока | | | | |
| 5.1 | Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Метод самосогласованного поля Хартри – Фока /Лек/ | 3 | 2 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Метод Хартри – Фока (самосогласованного поля, ССП). Уравнения, определяющие одноэлектронные функции – орбитали. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Электронные оболочки. Молекулы с закрытыми оболочками. Орбитали Хартри-Фока. |
| 5.2 | Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Метод самосогласованного поля Хартри – Фока /Лаб/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Выполнение лабораторных работ из методического пособия |
| 5.3 | Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Метод самосогласованного поля Хартри – Фока /Ср/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение задач и упражнений из методического пособия |
| | Тема 6. Основы неэмпирических квантово-химических расчетов | | | | |
| 6.1 | Основы неэмпирических квантово-химических расчетов /Лек/ | 3 | 2 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Базисные орбитали. Атомные орбитали Слетера–Зенера (слетеровские орбитали). Двухэкспонентные слетеровские орбитали. Гауссовские орбитали. Выбор базисных атомных функций. Базисные наборы. Пределы применимости метода Хартри-Фока. Корреляционная энергия и методы ее расчета. Конфигурационное взаимодействие. Метод многоконфигурационного взаимодействия (МКВ). |
| 6.2 | Основы неэмпирических квантово-химических расчетов /Лаб/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Выполнение лабораторных работ из методического пособия |
| 6.3 | Основы неэмпирических квантово-химических расчетов /Ср/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение задач и упражнений из методического пособия |
| | Тема 7. Полуэмпирические методы квантовой химии | | | | |

| | | | | | |
|-----|---|---|---|--|--|
| 7.1 | Полуэмпирические методы квантовой химии /Лек/ | 3 | 2 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Основные требования к полуэмпирическим методам. Нулевое дифференциальное перекрывание. Инвариантность полуэмпирических методов. Методы полного (ППДП, CNDO) и частичного (ЧПДП, INDO) пренебрежения дифференциальным перекрыванием. Метод модифицированного пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием (МПДП, MNDO). Его модификации – методы AM1 и PM3. Расширенный метод Хюккеля (PMX, EMH). Области применения полуэмпирических методов. σ , π -Приближение, полуэмпирические π -электронные методы. Простой метод Хюккеля (MOX, MOH) для π -электронных систем. |
| 7.2 | Полуэмпирические методы квантовой химии /Лаб/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Выполнение лабораторных работ из методического пособия |
| 7.3 | Полуэмпирические методы квантовой химии /Ср/ | 3 | 6 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение задач и упражнений из методического пособия |
| | Тема 8. Симметрия и свойства молекул | | | | |
| 8.1 | Симметрия и свойства молекул /Лек/ | 3 | 2 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Операции симметрии. Точечные операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представления точечных групп, неприводимые представления. Таблицы характеристик неприводимых представлений. Классификация молекулярных орбиталей и их энергий по симметрии. Разложение приводимых представлений на неприводимые представления. Формула приведения. Ортогонализация орбиталей симметрии по Шмидту. Наглядное изображение молекулярных орбиталей. Классификация электронных состояний молекул по симметрии. Правила отбора для электрических дипольных переходов в молекулах. |
| 8.2 | Симметрия и свойства молекул /Лаб/ | 3 | 4 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Выполнение лабораторных работ из методического пособия |
| 8.3 | Симметрия и свойства молекул /Ср/ | 3 | 4 | Л1.2 Л1.3 Л1.1 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.4 Л2.1 Л2.7 Л2.8 Л2.2 Л2.3 Л2.5 Л2.6 | Решение задач и упражнений из методического пособия |
| 8.4 | Контроль самостоятельной работы /КСР/ | 3 | 4 | | Контроль самостоятельной работы |

5. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

5.1. Типовые задания для проведения текущего контроля

Для элемента с порядковым номером равным номеру варианта провести следующие рас-четы:

1. Написать электронную формулу элемента и показать графически заполнение электронами всех атомных орбиталей.
2. Посчитать энергию внешнего электрона элемента.
3. Определить массу одного атома элемента и его объем.
4. Определить массу одной молекулы простого вещества элемента.

5. Исходя из положения элемента в ПС, перечислить возможные степени окисления атома элемента в соединениях с другими элементами.
6. Написать формулу оксида, хлорида, гидрида, сульфида.
7. Рассчитать длину связи в молекулах оксида, хлорида, гидрида, сульфида, используя спра-вочные значения ковалентных радиусов.
8. Вычислить длину диполя водородного и кислородного соединения элемента.
9. Изобразить связь в молекуле простого вещества элемента с помощью метода ВС.
10. Изобразить связь в молекуле простого вещества элемента с помощью энергетической диаграммы метода МО, указать кратность связи и написать формулу.
11. Указать тип гибридизации атома элемента в молекулах всех возможных оксидов (в слу-чае кислорода – молекулы водородных соединений).
12. Указать все виды связей (σ , π , δ) в молекулах оксидов (в случае кислорода – молекулы водородных соединений).
13. Указать значения валентных углов в молекулах оксидов (в случае кислорода – молекулы водородных соединений).
14. Указать форму молекул оксидов (в случае кислорода – молекулы водородных соедине-ний).
15. Вычислить энергию образования ионного соединения АВ и энергию взаимодействия ионов A^+ и B^- .

5.2. Типовые задания для проведения промежуточной аттестации

1. Открытие явления радиоактивности. Определение радиоактивности Беккерелем. Современное определение.
2. Явление фотоэффекта. Объяснение появления фототока с позиции теории Эйнштейна.
3. Открытие рентгеновских лучей.
4. Атомные спектры. Уравнение Бальмера. Спектральные серии.
5. Модель атома Резерфорда.
6. Модель атома Бора.
7. Теория Луи де Бройля.
8. Принцип неопределенности Гейзенберга. Воображаемый эксперимент.
9. Уравнение Шредингера.
10. Волновая функция. Математические требования к волновой функции.
11. Принцип решения волнового уравнения для атома водорода.
12. Декартова система координат.
13. Квантовые числа.
14. Принципы заполнения атомных орбиталей электронами.
15. Способы изображения атомных орбиталей. Кривые радиального распределения электронной плотности.
16. Способы изображения атомных орбиталей. Угловое распределение электронной плотности.
17. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод самосогласован-ного поля.
18. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод констант экрани-рования.
19. Электронные семейства элементов. Краткая характеристика.
20. Периодический закон. Периодическая система (ПС) элементов. Связь положения элемента в ПС с его электронным строением.
21. Атомный радиус. Закономерности изменения радиуса атома элементов в ПС.
22. Энергия ионизации. Закономерности изменения энергии ионизации элементов в ПС.
23. Энергия сродства к электрону. Закономерности изменения энергии сродства к электрону элемен-тов в ПС.
24. Относительная электроотрицательность. Закономерности изменения относительной электроотри-цательности элементов в ПС.
25. Теория валентных связей (ВС). Основные положения метода ВС. Канонические и резонансные структуры.
26. Теория валентных связей (ВС). Перекрытие атомных орбиталей. Интеграл перекрытия.
27. Свойства химической связи по методу ВС. Насыщаемость. Понятие ковалентности.
28. Свойства химической связи по методу ВС. Направленность. Гибридизация АО.
29. Теория валентных связей (ВС). Поляризуемость. Поляризирующие действие.
30. Теория валентных связей (ВС). Виды связи по симметрии.
31. Метод МО. Основные положения метода МО.
32. Метод МО. Образование МО из исходных АО.
33. Метод МО. Принципы заполнения МО электронами.
34. Метод МО. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул (элементы 1 периода).
35. Метод МО. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул (элементы 2 периода).
36. Метод МО. Энергетические диаграммы гетероядерных молекул (NO , BeH_2 , BeF_2 , H_2O , CO , CO_2 , CH_4 , CN^- , BF_3).
37. Метод МО. Энергетические диаграммы электронодефицитных молекул (B_2H_6).
38. Сравнительная характеристика методов МО и ВС.
39. Применение метода МО к соединениям d – элементов (октаэдрический комплекс).
40. Применение метода МО к соединениям d – элементов (тетраэдрический комплекс).
41. Описание химической связи в координационных соединениях с помощью теории кристаллическо-го поля.
42. Теория кристаллического поля (октаэдрический комплекс).
43. Теория кристаллического поля (тетраэдрический комплекс).
44. Ионная связь. Свойства.
45. Ионная связь. Расчет энергии кристаллической решетки (уравнение Борна).
46. Ионная связь. Расчет энергии кристаллической решетки (по циклу Борна — Габера).
47. Металлическая связь. Свойства.
48. Металлическая связь. Теория электронного газа.

| | |
|--|-------------------------------------|
| 49. | Металлическая связь. Зонная теория. |
| 50. | Металлические типы решеток. |
| 5.3. Перечень видов оценочных средств | |
| 1. Лабораторные работы 2. Контрольные работы 3. Задания для СРС 4. Индивидуально-графическая работа 5. Вопросы для собеседования на зачете | |
| 5.4. Процедура применения оценочных материалов | |
| <p>По дисциплине «Строение молекул и основы квантовой химии» разработан комплекс учебно-методических материалов в печатном и электронном виде, выполняющий обучающую, информационно-справочную и контролирующую функции. В качестве контролирующей функции комплекс используется для текущего и промежуточного контроля успеваемости. Помимо этого он полностью обеспечивает возможность самостоятельной работы студента по материалам курса. В комплекс входят следующие учебно-методические материалы: методические рекомендации по самостоятельной работе студентов (в электронном и печатном виде), краткий курс лекций (в электронном виде), тестовые задания, индивидуальные задания.</p> <p>Учебно-методические материалы комплекса используются выборочно, в зависимости от потребности.</p> <p>Оценивание знаний, умений и навыков студентов происходит согласно бально-рейтинговой системе, которая выложена в электронном пространстве Moodle, для каждого этапа обучения.</p> <p>Контроль и оценка результатов освоения учебной дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольных работ, тестирования, а также выполнения обучающимися самостоятельных работ.</p> <p>Требования к экзамену</p> <p>Подготовка студента к экзамену осуществляется по перечню вопросов, выносимых на эк-замен. Перечень вопросов выдает преподаватель не позднее, чем за месяц до назначенной даты приема экзамена.</p> <p>При проработке вопросов, вынесенных на экзамен, необходимо использовать конспект лекций, а так же учебно-методическую и учебную литературу, рекомендованную преподавателем.</p> <p>Важно понимать, что положительный результат промежуточной аттестации по дисциплине может быть достигнут планомерной работой с материалом дисциплины в течение всего семестра, а не только подготовкой непосредственно перед экзаменом. Эффективная подготовка к экзамену должна включать в себя структурирование и повторение материала, изученного на аудиторных занятиях и в процессе выполнения различных видов самостоятельной работы</p> <p>Подготовка к экзамену заключается в изучении и тщательной проработке студентом учебного материала дисциплины с учетом учебников, лекционных, лабораторных и практических занятий, результатов самостоятельной работы.</p> <p>Преподаватель имеет право задавать дополнительные уточняющие вопросы, если студент недостаточно полно осветил тематику вопроса, если затруднительно однозначно оценить ответ (оценка «между баллами»), если студент отсутствовал на занятиях в семестре.</p> | |

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

| | Авторы, составители | Заглавие | Издательство, год (кол-во экземпляров для печатных изданий) | Ссылка на электронное издание |
|------|--|--|---|---|
| Л1.1 | Цирельсон В. Г. | Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по химико-технологическим направлениям и специальностям | , 2014 (2 шт.) | |
| Л1.2 | Ермаков А. И. | Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 1: Учебник и практикум | , 2019 | https://www.biblio-online.ru/book/kvantovaya-mehhanika-i-kvantovaya-himiya-v-2-ch-chast-1-437641 |
| Л1.3 | Никишина М. Б., Блохин И. В., Половецкая О. С. | Строение молекул и основы квантовой химии: Учебное пособие | , 2013 (49 шт.) | |
| Л1.4 | | | , | |
| Л1.5 | Цирельсон | Квантовая химия | , | |
| Л1.6 | Никишина. | Строение молекул и основы квантовой химии | , | |

6.1.2. Дополнительная литература

| | Авторы, составители | Заглавие | Издательство, год (кол-во экземпляров для печатных изданий) | Ссылка на электронное издание |
|--|---------------------|----------|---|----------------------------------|
|--|---------------------|----------|---|----------------------------------|

| | Авторы, составители | Заглавие | Издательство, год (кол-во экземпляров для печатных изданий) | Ссылка на электронное издание |
|------|---------------------------------|--|---|----------------------------------|
| Л2.1 | Степанов Н. Ф. | Квантовая механика и квантовая химия: Учебник для студентов химических факультетов университетов | , 2001 (1 шт.) | |
| Л2.2 | Степанов | Квантовая механика и квантовая химия | , | |
| Л2.3 | Барановский | Квантовая механика и квантовая химия | , | |
| Л2.4 | Грибов Л.А. | Квантовая химия: Учебник для студентов вузов | , 1999 (3 шт.) | |
| Л2.5 | Гельман | Квантовая химия | , | |
| Л2.6 | Грибов | Квантовая химия | , | |
| Л2.7 | Барановский В. И. | Квантовая механика и квантовая химия: Учебник для студентов вузов | , 2008 (5 шт.) | |
| Л2.8 | Гельман Г. Г., Чугреев А. Л. | Квантовая химия: научное издание | , 2012 (2 шт.) | |

6.3. Информационные технологии

6.3.1 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

| | |
|-----|--|
| 1. | Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian. Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г. |
| 2. | Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian. Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 г. |
| 3. | Операционная система Microsoft Windows 10 Professional Russian. Контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 г. |
| 4. | Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian. Лицензия №46138962 от 16.11.2009 |
| 5. | Программное обеспечение Microsoft Office 2013 Professional. Контракт № 405535 от 2 ноября 2015 года, контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г. |
| 6. | Электронный словарь АБВУД Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, АБВУД Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г. |
| 7. | Комплексная система антивирусной защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License. Лицензия № 13С8-190514-084943-783-1256 от 15.05.2019 |
| 8. | Файловый архиватор 7z. Свободно распространяемое ПО |
| 9. | Браузеры Google Chrome, Mozilla, Opera. Свободно распространяемое ПО |
| 10. | Текстовый редактор NotePad++. Свободно распространяемое ПО |
| 11. | Программа просмотра файлов формата RPD Adobe Acrobat Reader DC. Свободно распространяемое ПО |
| 12. | Файловый менеджер Far manager. Свободно распространяемое ПО |
| 13. | Система облачного хранилища Dropbox. Свободно распространяемое ПО |

6.3.2 Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

| | |
|----|--|
| 1. | Портал «Информационно-коммуникационные технологии в образовании» (http://www.ict.edu.ru) |
| 2. | Web of Science Core Collection – политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных (http://webofscience.com) |
| 3. | Полнотекстовый архив ведущих западных научных журналов на российской платформе Национального электронно-информационного консорциума (НЭИКОН) (http://neicon.ru) |
| 4. | Базы данных издательства Springer (https://link.springer.com) |

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

| Ауд. | Назначение | Оборудование и технические средства обучения | Вид |
|------|--------------------|--|-----|
| 2-15 | Компьютерный класс | компьютеры, рулонный экран, стол преподавателя, столы компьютерные, переносной проектор | |
| 2-16 | Компьютерный класс | интерактивная доска, компьютеры, маркерная доска, принтер, сканер, стол преподавателя, столы учебные | |
| 2-41 | Компьютерный класс | доска учебная, компьютеры, столы компьютерные | |
| 2-58 | Лекционная | доска учебная, интерактивный комплект «SMART Board», ноутбук, стол преподавателя, столы учебные, стул преподавателя, телевизор | |

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии» направлена на формирование у студентов основных теоретических представлений о строении вещества.

Для успешного изучения дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» преподавателям, работающим со студентами по данному курсу, предлагается использовать разработанный комплекс учебно-методических материалов, включающих:

- лекции в виде презентаций, которые разработаны согласно учебно-тематическому плану;
- методическое пособие в электронном и печатном виде для практических занятий с контрольными вопросами и задачами;
- задания для самостоятельной работы студентов;
- для контроля знаний по предмету на практических занятиях и КСРС разработан комплекс текущих тестовых заданий в электронном и печатном виде;
- для контроля знаний и умений предусмотрено проведение контрольных работ.

Варианты контрольных работ в печатном виде находятся у преподавателя, ответственного за данную дисциплину.

Основная цель аудиторных занятий по дисциплине «Строение молекул и основы квантовой химии» состоит в глубоком усвоении наиболее сложных вопросов учебной дисциплины; оказание помощи студенту в изучении, как общетеоретических вопросов, так и в овладении практическими навыками и умениями.

Готовясь к практическим занятиям по дисциплине «Строение молекул и основы квантовой химии», студенту необходимо изучить основную и дополнительную литературу по теме будущего занятия, подвергнуть их анализу, систематизации и обобщению и подготовить план ответа на каждый вопрос, вынесенный на обсуждение; подготовиться к выступлениям в аудитории; выполнить задания для самостоятельной работы.