

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ ТАДЖИКИСТАН  
МЕЖГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«РОССИЙСКО-ТАДЖИКСКИЙ (СЛАВЯНСКИЙ) УНИВЕРСИТЕТ»



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«Квантовая механика и квантовая химия»

Направление подготовки - 04.03.01 «Химия»  
Профиль подготовки «Общая химия»

Форма подготовки-очная

Уровень подготовки-бакалавриат

Душанбе 2024

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от «17» июля 2017 г, № 671

При разработке рабочей программы учитываются

- требования работодателей;
- содержание программ дисциплин, изучаемых на предыдущих и последующих этапах обучения;
- новейшие достижения в данной предметной области.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры математики и физики, протокол № 1 от 28 августа 2024г.

Рабочая программа утверждена УМС естественнонаучного факультета, протокол № 1 от 29 августа 2024 г.

Рабочая программа утверждена Ученым советом естественнонаучного факультета, протокол № 1 от 30 августа 2024 г.

Заведующий кафедрой математики и ифзики,

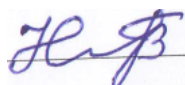
к.ф.-м.н, доцент



Гулбоев Б.Дж.

Зам. председателя УМС

естественнонаучного факультета



Халимов И.И.

Разработчик: к.ф.-м.н., доцент



Насруллоев Х.

## Расписание занятий дисциплины

Ф.И.О. преподавателя	Аудиторные занятия		Приём СРС	Место работы преподавателя
	лекция	Практические занятия, КСР/ лаб.		
Насруллоев Х.	Вторник, 11 <sup>00</sup> -12 <sup>30</sup>	Среда 12 <sup>40</sup> -14 <sup>00</sup>	Пятница, 12 <sup>40</sup> -14 <sup>00</sup>	РТСУ, кафедра математики и физики, старый корпус, 203 каб.

## . ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИЗУЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 1.1. Цели изучения дисциплины

**Целью** изучения дисциплины "Квантовая механика и квантовая химия" является овладение основными понятиями, общими принципами, законами квантовой механики и методами решения квантово-механических задач, применение и понимание основ квантовой химии, вытекающие из квантомеханических законов микроскопических систем; а также знакомство с возможностями их использования в профессиональной научно-педагогической деятельности.

### 1.2. Задачи изучения дисциплины:

- ознакомить студентов с основами квантовой механики и квантовой химии в том минимальном объеме, который необходим для понимания современной химии;
- уметь интерпретировать основные законы химии с точки зрения физики элементарных частиц;
- научиться применять математические методы для решения физико-химических задач;
  - владеть основами фундаментальной теории физическо-химических процессов, происходящих в веществе.

13. В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие универсальные и общепрофессиональные компетенции (элементы компетенций)

Таблица 1

Код компетенции	Содержание компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (индикаторы достижения компетенций)	Виды оценочных средств
<b>ПК-2</b>	Способен использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	ИПК-2.1. способность применения оборудования для физических и физико-химических методов анализа простых химических объектов; возможности и ограничения применения современных физических и физико-химических методов анализа сложных химических объектов ИПК-2.2. проводить калибровку и настройку серийного оборудования химических лабораторий; анализировать химические вещества и объекты и контролировать протекание процессов на серийном и сложном научном оборудовании ИПК-2.3. владение практическими навыками работы на серийном научном оборудовании химических лабораторий (фотометры, ионометры, рН-метры, весы, термостаты); теоретическими основами и практическими навыками работы на сложном научном оборудовании химических лабораторий (хроматографы, полярографы, спектрофотометры, флуориметры, кулонометры)	Реферат Доклад Презентация

ПК-3	Способен применять основные естественно-научные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	ИПК-3.1 применять методы, средства и приемы применения логических операций для систематизации и прогнозирования химической информации; основные естественнонаучные законы и закономерности в области аналитической химии и химической экспертизы. ИПК-3.2 объяснять использование логических операций для систематизации и прогнозирования химической информации; проводить анализ, мониторинг и экспертизу объектов различного класса. ИПК-3.3 владение навыками применения логических операций (анализа, синтеза, сравнения, обобщения, доказательства) для систематизации и прогнозирования химической информации; навыками использования законов и закономерностей химических наук для интерпретации результатов анализа, мониторинга и экспертизы объектов различного класса.	Реферат Доклад Презентация
------	--	--	----------------------------------

## 2. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» относится к вариативной части учебного плана (Б1.В.03) направления подготовки бакалавров направления «Химия».

Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее следующим дисциплинам: строения вещества, физическая химия, физические методы исследования, спектральные методы анализа, кристаллохимия.

Данная дисциплина изучается на 6-7 семестре и содержательно методически взаимосвязана с дисциплинами ОПОП, указанных в таблице 2.

При освоении данной дисциплины необходимы умения и готовность («входные» знания) обучающегося по дисциплинам 1,3,7). Дисциплины 5-7 взаимосвязаны с данной дисциплиной и изучаются параллельно. Теоретическими дисциплинами и практиками, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее являются: 2-4.

Таблица 2\*.

№	Название дисциплины	Семестр	Место дисциплины в структуре ООП
1.	Строения вещества	5	Б1.В.02
2.	Хроматографические методы анализа	8	Б1.В.05
3.	Физические методы исследования	8	Б1. В.06
4.	Кристаллохимия	8	Б1. В.09

## 3. Структура и содержание дисциплины, критерии начисления баллов

*Объем дисциплины в 6 семестре составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых: лекции 20 часов, практические занятия 10 часов, КСР 10 часов, всего часов аудиторной нагрузки 40 час., самостоятельная работа 32 час., в том числе в интерактивной форме – 32 часов. Зачет в 6 семестре.*

*Объем дисциплины в 7 семестре составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых: лекции 32 часов, практические занятия 32 часов, КСР 16 часов, всего часов аудиторной нагрузки 80 час., самостоятельная работа 28 час., в том числе в интерак-*

тивной форме – 32 часов. Зачет в 7 семестре.

### 3.1. Структура и содержание теоретической части курса (32 час.)

#### VI семестр

Тема 1. Основные постулаты квантовой механики. – 2ч

*Эксперименты, ставящие истоками возникновения квантовых представлений. Гипотезы Н. Бора, Планка, Эйнштейна и Луи де Бройля. Квантовые состояния и волновые функции, основные свойства волновых функций.*

Тема 2. Математический аппарат квантовой механики. – 2ч

*Операторы Алгебра операторов. Линейные и эрмитовые операторы. Собственные значения и собственные функции операторов. Дискретные и непрерывные спектры значений операторов. Коммутационные свойства операторов. Критерий одновременной изменяемости физических величин..*

Тема 3. Плотность вероятности состояний квантовых систем. – 2ч

*Функция состояний (волновой функции) квантовых систем. Борновская трактовка функции состояний (физический смысл функции состояний). Конечность, ортонормированность функции состояний.*

Тема 4. Операторы физических величин. – 2ч

*Составление (введение) операторов основных физических величин. Оператор вектора импульса его компонент, оператор вектора момента импульса его компонент. Оператор энергии. Гамильтониан.*

Тема 5. Соотношения неопределенностей. – 2ч

*Соотношение неопределенности – как следствие двойкой (корпускулярной и волновой) природы квантовых объектов. Соотношение неопределенности Гейзенбарга и ее смысл. Критерий одновременной изменяемости физических величин..*

Тема 6. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. – 2ч

*Изменение состояние квантовых систем по времени. Вывод уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера.*

Тема 7. Простейшие примеры применения квантовой механики. – 2ч

*Прохождение квантовой частицы через потенциальный барьер. Гармонический осциллятор. Энергия нулевых колебаний- чисто квантовая величина..*

Тема 8. Анализ электронных спектров и магнитных свойств комплексов на основе теории кристаллического поля Интерпретация электронного строения органических соединений – 2ч

Тема 9. Интерпретация электронного строения органических соединений – 2ч

Тема 10. Сложение моментов для атомов – 2ч

## VII семестр

Тема 1. Задачи о прямоугольном потенциальном яме. -2ч.

*Составления гамильтониана случая нахождения квантовой частицы в потенциальной яме. Решение уравнение Шредингера. Выводы. Туннельный эффект. Холодная эмиссия в металлах.*

Тема 2. Перенос заряда при образовании химических соединений.

*Перенос электрического заряда. Роль электрического заряда в химических реакциях Ионная связь. -2ч*

Тема 3. Теория атома водорода.

*Гамильтониан атома Решение уравнение Шредингера для атома водорода. Энергия атома. Главное квантовое число.*

Тема 4. Орбитали водородоподобные атомов. -2ч

*Функции состояний атома водорода. Электронные оболочки атома водорода. s – оболочки.*

Тема 5. Вырождение одноэлектронных состояний. -2ч

*Вырожденные и невырожденные состояний. Математический смысл вырожденности - соответствие нескольких собственных функции состояний одному и тому значению собственной значению оператора.*

Тема 6. Приближенные методы решения квантово-механических задач. -2ч

*Сложности многоэлектронных систем. Применение приближенных методов для решение уравнение Шредингера. Гамильтониан основной состояний. Гамильтониан возмущений.*

Тема 7. Вариационный принцип квантовой механики-2ч

Тема 8. Теория возмущений для стационарных состояний-2ч

*Введение оператора возмущения. Теория возмущения I и II порядка для невырожденных систем. Поправки I и II порядка для энергии. Элементы теория возмущений для вырожденных систем.*

Тема 9. Атом в магнитном поле -2ч

*Расщепление спектральных линий атома в магнитном поле. Нормальный и аномальный эффект Зеемана.*

Тема 10. Механический (орбитальный) и магнитный моменты системы частиц. -2ч

*Орбитальный момент атома Магнитный момент атома. Орбитальное и магнитное квантовые числа. Магнетон Бора.*

Тема 11. Атом в постоянном электрическом поле. Снятие вырождения . -2ч

*Теория эффекта Штарка (атом в слабом электрическом поле). Теория аномального эффекта Зеемана. Расщепление энергетических уровней-снятие вырождения.*

Тема 12. Спин элементарных частиц. -2ч

*Опытное явление - тонкое расщепление спектральных линий. Гипотеза Уленбека и Гоудсмита. Спин электрона- собственный момент механического движения электрона. Спиновое квантовое число.*

Тема 13. Операторы спина и коммутационные соотношения. -2ч

*Введение оператора спина. Коммутационные соотношения для спиновых операторов . Спиновые функции состояний.*

Тема 14. Квантовая система в переменном электромагнитном поле. -2ч

*Переменные электрические и магнитные поля. Одноэлектронная система в*

*электромагнитном поле. Элементы теории излучения.*

Тема 15. Теория возмущений нестационарных состояний. -2ч

*Нестационарное состояние. Возмущения, зависящая от времени. Элементы теории возмущений для нестационарных состояний.*

Тема 16. Переходы под влиянием излучения и правила отбора. -2ч

Излучения квантов электромагнитного излучения –фонов. Квантовая теория излучений. Правила отбора для квантовых чисел

### **3.2 Структура и содержание практической части курса (32 часов).**

#### **VI семестр**

**Занятие 1.** Уравнение Шредингера для атомов и молекул. -2 ч.

**Занятие 2.** Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. -2ч

**Занятие 3.** Роль представлений о поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории химии.-2 ч

**Занятие 4.** Электронное волновое уравнение.-2ч.

**Занятие 5.** Электронное строение атомов.-2 ч.

#### **VII семестр**

**Занятие 1.** Электронное строение атомов и периодическая система -2ч

**Занятие 2.** Связь в атомах. LS и JJ связи -2ч.

**Занятие 3.** Оптические термы атомов -2ч.

**Занятие 4.** Симметрия и свойства молекул. -2ч.

**Занятие 5.** Атом гелия. Орто- и парагелий. -2ч.

**Занятие 6.** Система тождественных частиц. Бозоны и фермионы. -2ч.

**Занятие 7.** Молекула водорода. Ковалентный связь. -2ч.

**Занятие 8.** Химические связи. Полярные и неполярные ковалентные связи. -2ч.

**Занятие 9.** Гибридные связи -2ч.

**Занятие 10.** Спин и валентность-2ч.

**Занятие 11.** Классификация электронных состояний молекул -2ч.

**Занятие 12.** Связывающие и разрыхляющие орбитали. -2ч.

**Занятие 13.** Локализованные молекулярные орбитали-2ч.

**Занятие 14.** Различные приближения в квантовой химии-2ч.

**Занятие 15.** Вариационный метод . Метод молекулярных орбит -2ч.

**Занятие 16.** Современное программное обеспечение квантовохимических расчетов -2ч.

### **3.3 Структура и содержание КСР (16 часов)**

#### **VI семестр**

**Занятие 1.** методов Простейшие модели описания на основе методов молекулярных орбиталей и валентных схем молекулярных орбиталей и валентных схем

**Занятие 2.** Анализ волновых функций молекулярного иона и молекулы водорода.

**Занятие 3.** Качественный анализ геометрического строения малых многоатомных молекул

**Занятие 4.** Теория кристаллического поля.

**Занятие 5.** Приближения, используемые при расчетах и при интерпретации электронного строения органических соединений.

### VII семестр

**Занятие 1.** Перенос заряда при образовании химических соединений

**Занятие 2.** Комплексы с переносом заряда.

**Занятие 3.** Качественная теория реакционной способности органических соединений.

**Занятие 4.** Индексы реакционной способности

**Занятие 5.** Концепция жестких и мягких кислот и оснований.

**Занятие 6.** Электростатическое поле и его влияние на реакционную способность.

**Занятие 7.** Квантово химическое описание элементарного акта химических реакций

**Занятие 8.** Роль туннелирования в химических реакциях.

Таблица 3.

### Структура и содержание теоретической, практической, лабораторной части, КСР и СРС, критерии начисление баллов

№ нед.	Раздел дисциплины	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Лит-ра	Кол-во баллов в неделю
		Лек.	Пр.	КСР	Лаб.	СРС		
<b>VI семестр</b>								
1.	Основные постулаты квантовой механики	2				3	1-3	12,5
	Уравнение Шредингера для атомов и молекул		2				1-3	
2.	Простейшие модели описания на основе методов молекулярных орбиталей и валентных схем			2		3	1-3	12,5
	Математический аппарат квантовой механики	2					1-3	
3.	Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул		2			3	1-3	12,5
	Анализ волновых функций молекулярного иона и молекулы водорода			2			1-3	
4.	Плотность вероятности состояний квантовых систем	2				3	1-3	12,5
	Роль представлений о поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории химии		2				1-3	
5.	Качественный анализ геометрического строения малых многоатомных молекул			2		3	1-3	12,5
	Операторы физических величин	2					1-3	
6.	Электронное волновое уравнение		2			4	1-3	12,5
	Теория кристаллического поля			2			1-3	



7.	Соотношения неопределенностей	2				3	1-3	12,5
	Электронное строение атома		2				1-3	
8.	Приближения, используемые при расчетах и при интерпретации электронного строения органических соединений			2		3	1-3	12,5
	Эволюция состояний и уравнение Шредингера	2					1-3	
9.	Анализ электронных спектров и магнитных свойств комплексов на основе теории кристаллического поля	2				4	1-3	12,5
	Простейшие примеры применения квантовой механики	2					1-3	
10.	Сложение моментов для атомов	2				3	1-3	12,5
	Интерпретация электронного строения органических соединений	2					1-3	
	<b>Итого:</b>	20	10	10		32		
<b>VII семестр</b>								
1.	Задачи о прямоугольном потенциальном яме	2				2	1-3	12,5
	Перенос заряда при образовании химических соединений			2			1-3	
2.	Перенос заряда при образовании химических соединений	2				1	1-3	12,5
	Электронное строение атомов и периодическая система		2				1-3	
	Теория атома водорода	2					1-3	
3.	Комплексы с переносом заряда			2		2	1-3	12,5
	Водородо-подобные орбитали	2					1-3	
4.	Связь в атомах. LS и JJ связи		2			2	1-3	12,5
	Вырождение одноэлектронных состояний	2					1-3	
	Качественная теория реакционной способности органических соединений			2			1-3	
5.	Приближенные методы решения квантово-механических задач	2				2	1-3	12,5
	Оптические термы атомов		2				1-3	
6.	Вариационный принцип квантовой механики	2				2	1-3	12,5
	Индексы реакционной способности			2			1-3	
	Теория возмущений для стационарных состояний	2					1-3	
7.	Симметрия и свойства молекул		2			2	1-3	12,5
	Атом в магнитном поле	2					1-3	
8.	Концепция жестких и мягких кислот и оснований			2		2	1-3	12,5
	Механический (орбитальный) и магнитный моменты системы частиц	2					1-3	
	Атом гелия. Орто- и парагелий		2				1-3	
9.	Атом в постоянном электрическом поле. Снятие вырождения	2				2	1-3	12,5
	Электростатическое поле и его влияние на реакционную способность			2			1-3	

10.	Спин элементарных частиц	2				1	1-3	12,5
	Система тождественных частиц. Бозоны и фермионы		2				1-3	
	Операторы спина и коммутационные соотношения	2					1-3	
11.	Квантово химическое описание элементарного акта химических реакций			2		2	1-3	12,5
	Квантовая система в переменном электромагнитном поле	2					1-3	
12.	Молекула водорода. Ковалентный связь		2			2	1-3	12,5
	Теория возмущений для нестационарных состояний	2					1-3	
	Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности			2			1-3	
13.	Переходы под влиянием излучения и правила отбора	2				1	1-3	12,5
	Химические связи. Полярные и неполярные ковалентные связи		2				1-3	
14.	Роль туннелирования в химических реакциях		2			2	1-3	12,5
	Гибридные связи		2				1-3	
	Спин и валентность		2				1-3	
15.	Классификация электронных состояний молекул		2			2	1-3	12,5
	Связывающие и разрыхляющие орбитали		2				1-3	
16.	Локализованные молекулярные орбитали		2			1	1-3	12,5
	Различные приближения в квантовой химии		2				1-3	
	Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов		2				1-3	
<b>Итого:</b>		32	32	8		28		200

### Формы контроля и критерии начисления баллов

Контроль усвоения студентом каждой темы осуществляется в рамках балльно-рейтинговой системы (БРС), включающей текущий, рубежный и итоговый контроль. Студенты **3-го и 4-го курсов**, обучающиеся по кредитно-рейтинговой системе обучения, могут получить максимально возможное количество баллов - 300. Из них на текущий и рубежный контроль выделяется 200 баллов или 49% от общего количества.

На итоговый контроль знаний студентов выделяется 51% или 100 баллов.

Порядок выставления баллов: 1-й рейтинг (1-7 недели до 12,5 баллов+12,5 баллов (8 неделя – Рубежный контроль №1) = 100 баллов), 2-й рейтинг (9-15 недели до 12,5 баллов+12,5 баллов (16 неделя – Рубежный контроль №2) = 100 баллов), итоговый контроль 100 баллов.

К примеру, за текущий и 1-й рубежный контроль выставляется 100 баллов: лекционные занятия – 21 балл, за практические занятия (КСР, лабораторные) – 31,5 балл, за СРС – 17,5 баллов, требования ВУЗа – 17,5 баллов, рубежный контроль – 12,5 баллов.

В случае пропуска студентом занятий по уважительной причине (при наличии подтверждающего документа) в период академической недели деканат факультета обращается к проректору по учебной работе с представлением об отработке студентом баллов за пропущенные дни по каждой отдельной дисциплине с последующим внесением их в электронный журнал.

Итоговая форма контроля по дисциплине (зачет, экзамен) проводится как в форме тестирования, так и в традиционной (устной) форме. Тестовая форма итогового контроля по дисциплине предусматривает: для естественнонаучных направлений – 10 тестовых вопросов на одного студента, где правильный ответ оценивается в 10 баллов, для гуманитарных направлений – 25 тестовых

вопросов, где правильный ответ оценивается в 4 балла. Тестирование проводится в электронном виде, устный экзамен на бумажном носителе с выставлением оценки в ведомости по аналогичной системе с тестированием.

Таблица 4.

Неделя	Активное участие на лекционных занятиях, написание конспекта и выполнение других видов работ*	Активное участие на практических (семинарских) занятиях, КСР	КСР Написание реферата, доклада, эссе Выполнение других видов работ	Выполнение положений высшей школы (установленная форма одежды, наличие рабочей папки, а также других пунктов устава высшей школы)	РК №1	Всего
1	2	3	4	5	6	7
1	3	4,5	2,5	2,5	-	12,5
2	3	4,5	2,5	2,5	-	12,5
3	3	4,5	2,5	2,5	-	12,5
4	3	4,5	2,5	2,5	-	12,5
5	3	4,5	2,5	2,5	-	12,5
6	3	4,5	2,5	2,5	-	12,5
7	3	4,5	2,5	2,5	-	12,5
8	-	-	-	-	12,5	12,5
<b>Первый рейтинг</b>	<b>21</b>	<b>31,5</b>	<b>17,5</b>	<b>17,5</b>	<b>12,5</b>	<b>100</b>

Формула вычисления результатов дистанционного контроля и итоговой формы контроля по дисциплине за семестр:

$$ИБ = \left[ \frac{(P_1 + P_2)}{2} \right] \cdot 0,49 + Эи \cdot 0,51$$

, где ИБ – итоговый балл,  $P_1$ - итоги первого рейтинга,  $P_2$ - итоги второго рейтинга,  $Эи$  – результаты итоговой формы контроля (экзамен).

#### 4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» включает в себя:

1. план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе нормы времени на выполнение по каждому заданию;
2. характеристика заданий для самостоятельной работы обучающихся и методические рекомендации по их выполнению;
3. требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;
4. критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

##### 4.1. План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

Таблица 5

№ п/п	Объем КСР в ч.	Тема КСР	Форма и вид результатов самостоятельной работы	Форма контроля
1	3	Квантовые состояния и волновые функции, основные свойства волновых функций		
2	3	Операторы физических величин в квантовой механике		

3	3	Плотность вероятности распределения частиц в пространстве		
4	3	Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения		
5	3	Разложение по собственным функциям эрмитова оператора		
6	4	Оператор Гамильтона (гамильтониан)		
7	3	Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности		
8	3	Качественный анализ геометрического строения малых многоатомных молекул		
9	4	Теория кристаллического поля		
10	3	Приближения, используемые при расчетах и при интерпретации электронного строения органических соединений		
<b>Всего за семестр: 32 часов</b>				
VII - семестр				
1	2	Качественные особенности волновых функций	Конспект	Опрос
2	2	Теория момента импульса.	Конспект, презентация	Защита работы. Выступление Доклад
3	2	Физический смысл соотношения неопределенностей.	Конспект	Выступление Доклад
4	1	Приближения, используемые при интерпретации электронного строения органических соединений	Выполнение задания	Защита работы. Выступление Доклад
5	2	Вариационный метод Ритца.	Презентация	Опрос, Выступление Доклад
6	2	Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.	Конспект	Выступление Доклад
7	2	Представление волновой функции системы электронов в виде определителя.	Конспект, презентация	Опрос, Выступление Доклад
8	1	Разделение электронного и ядерного движений.	Презентация	Выступление Доклад
9	2	Роль представлений о поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории химии.	Конспект	Опрос
10	2	Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле.	реферат	Защита реферата Доклад
11	2	Построение приближенных решений электронного волнового уравнения	Выполнение задания	Защита работы. Выступление Доклад
12	1	Метод Хартри - Фока (самосогласованного поля)	реферат	Защита реферата Доклад
13	2	Пределы применимости метода Хартри - Фока	Конспект	Защита работы. Выступление Доклад
14	2	Электронные конфигурации и термы атомов.	Конспект, презентация	Защита реферата Доклад
15	2	Классификация молекулярных орбиталей по симметрии.	Конспект	Защита работы. Выступление Доклад
16	1	Полуэмпирические методы квантовой химии	Конспект	Защита реферата Доклад
<b>Всего за семестр: 28 часов</b>				

#### **4.2. Характеристика заданий для самостоятельной работы обучающихся и методические рекомендации по их выполнению**

Самостоятельная работа является одним из видов учебной деятельности обучающихся, способствует развитию самостоятельности, ответственности и организованности, творческого подхода к решению проблем учебного и профессионального уровня.

Самостоятельная работа проводится с целью:

- систематизации и закрепления полученных теоретических знаний и практических умений обучающихся;
- углубления и расширения теоретических знаний;
- формирования умений использовать справочную документацию и специальную литературу;
- развития познавательных способностей и активности обучающихся: творческой инициативы, ответственности и организованности;
- формирования самостоятельности мышления, способностей к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации;
- развития исследовательских умений.

Аудиторная самостоятельная работа по учебной дисциплине и профессиональному модулю выполняется на учебных занятиях под непосредственным руководством преподавателя и по его заданию.

Внеаудиторная самостоятельная работа выполняется по заданию преподавателя без его непосредственного участия.

#### **4.3. Требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы**

*Написание реферата.*

Цель самостоятельной работы: расширение научного кругозора, овладение методами теоретического исследования, развитие самостоятельности мышления студента.

*Виды рефератов:* реферат-конспект, содержащий фактическую информацию в обобщенном виде, иллюстративный материал, различные сведения о методах исследования, результатах исследования и возможностях их применения; реферат-резюме, содержащий только основные положения данной темы; реферат-обзор, составляемый на основе нескольких источников, в котором сопоставляются различные точки зрения по данному вопросу; реферат-доклад, содержащий объективную оценку проблемы.

*Выполнение задания:* 1) выбрать тему, если она не определена преподавателем; 2) определить источники, с которыми придется работать; 3) изучить, систематизировать и обработать выбранный материал из источников; 4) составить план; 5) написать реферат: обосновать актуальность выбранной темы; указать исходные данные реферируемого текста (название, где опубликован, в каком году), сведения об авторе (Ф. И. О., специальность, ученая степень, ученое звание); сформулировать проблематику выбранной темы; привести основные тезисы реферируемого текста и их аргументацию; - сделать общий вывод по проблеме, заявленной в реферате.

Планируемые результаты самостоятельной работы: способность студентов к обобщению, анализу, восприятию информации, постановке цели и выбору путей ее достижения способность логически верно, аргументированно и ясно строить устную и письменную речь.

*Подготовка доклада*

Цель самостоятельной работы: расширение научного кругозора, овладение методами теоретического исследования, развитие самостоятельности мышления студента.

*Доклад* - публичное сообщение или документ, которые содержат информацию и отражают суть вопроса или исследования применительно к данной ситуации. Виды докладов: 1. Устный доклад - читается по итогам проделанной работы и является эффективным средством разъяснения ее результатов. 2. Письменный доклад: - краткий (до 20 страниц) - резюмирует наиболее важную информацию, полученную в ходе исследования; - подробный (до 60 страниц) - включает не только текстовую структуру с заголовками, но и диаграммы, таблицы, рисунки, фотографии, приложения, сноски, ссылки, гиперссылки.

Выполнение задания: 1) четко сформулировать тему (например, письменного доклад); 2) изучить и подобрать литературу, рекомендуемую по теме, выделив три источника библиографической информации: - первичные (статьи, диссертации, монографии и т. д.); - вторичные (библиография, реферативные журналы, сигнальная информация, планы, граф-схемы, предметные указатели и т. д.); - третичные (обзоры, компилятивные работы, справочные книги и т. д.); 3) написать план, который полностью согласуется с выбранной темой и логично раскрывает ее; 4) написать доклад, соблюдая следующие требования: - к структуре доклада - она должна включать: краткое введение, обосновывающее актуальность проблемы; основной текст; заключение с краткими выводами по исследуемой проблеме; список использованной литературы; - к содержанию доклада - общие положения надо подкрепить и пояснить конкретными примерами; не пересказывать отдельные главы учебника или учебного пособия, а изложить собственные соображения по существу рассматриваемых вопросов, внести свои предложения; 5) оформить работу в соответствии с требованиями.

Планируемые результаты самостоятельной работы: - способность студентов анализировать результаты научных исследований и применять их при решении конкретных образовательных и исследовательских задач; - готовность использовать индивидуальные креативные способности для оригинального решения исследовательских задач; — способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности.

### *Написание конспекта*

Цель самостоятельной работы: выработка умений и навыков грамотного изложения теории и практических вопросов в письменной форме в виде конспекта. Конспект: 1) письменный текст, систематически, кратко, логично и связно передающий содержание основного источника информации (статьи, книги, лекции и др.); 2) синтезирующая форма записи, которая может включать в себя план источника информации, выписки из него и его тезисы. Виды конспектов: - плановый конспект (план-конспект) - конспект на основе сформированного плана, состоящего из определенного количества пунктов (с заголовками) и подпунктов, соответствующих определенным частям источника информации; -текстуальный конспект - подробная форма изложения, основанная на выписках из текста-источника и его цитировании (с логическими связями); - произвольный конспект - конспект, включающий несколько способов работы над материалом (выписки, цитирование, план и др.); - схематический конспект (контекст-схема) -конспект на основе плана, составленного из пунктов в виде вопросов, на которые нужно дать ответ; - тематический конспект - разработка и освещение в конспективной форме определенного вопроса, темы; - сводный конспект — обработка нескольких текстов с целью их сопоставления, сравнения и сведения к единой конструкции; - выборочный конспект - выбор из текста информации на определенную тему.

Формы конспектирования: - план (простой, сложный) - форма конспектирования, которая включает анализ структуры текста, обобщение, выделение логики развития событий и их сути; - выписки - простейшая форма конспектирования, почти дословно воспроизводящая текст; - тезисы - форма конспектирования, которая представляет собой выводы, сделанные на основе прочитанного. Выделяют простые и сложные тезисы (кроме основных положений, включают также второстепенные); - цитирование - дословная выписка, которая используется,

когда передать мысль автора своими словами невозможно.

Выполнение задания: 1) определить цель составления конспекта; 2) записать название текста или его части; 3) записать выходные данные текста (автор, место и год издания); 4) выделить при первичном чтении основные смысловые части текста; 5) выделить основные положения текста; 6) выделить понятия, термины, которые требуют разъяснений; 7) последовательно и кратко изложить своими словами существенные положения изучаемого материала; 8) включить в запись выводы по основным положениям, конкретным фактам и примерам (без подробного описания); 9) использовать приемы наглядного отражения содержания (абзацы «ступеньками», различные способы подчеркивания, ручки разного цвета); 10) соблюдать правила цитирования (цитата должна быть заключена в кавычки, дана ссылка на ее источник, указана страница).

Планируемые результаты самостоятельной работы: - способность студентов анализировать результаты научных исследований и применять их при решении конкретных образовательных и исследовательских задач; - способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности.

Подробно характеристика заданий и требования к их выполнению представлены в ФОС к данной РПД

#### **4.4. Критерии оценки результатов самостоятельной работы**

Критериями оценок результатов внеаудиторной самостоятельной работы студента являются:

-уровень освоения студентами учебного материала;

-умения студента использовать теоретические знания при выполнении практических задач;

-сформированность общеучебных умений;

-умения студента активно использовать электронные образовательные ресурсы, находить требующуюся информацию, изучать ее и применять на практике;

-обоснованность и четкость изложения ответа;

-оформление материала в соответствии с требованиями;

-умение ориентироваться в потоке информации, выделять главное;

-умение четко сформулировать проблему, предложив ее решение, критически оценить решение и его последствия;

-умение показать, проанализировать альтернативные возможности, варианты действий;

-умение сформировать свою позицию, оценку и аргументировать ее.

Критерии оценки самостоятельной работы студентов:

Оценка «5» ставится тогда, когда:

-Студент свободно применяет знания на практике;

-Не допускает ошибок в воспроизведении изученного материала;

-Студент выделяет главные положения в изученном материале и не затрудняется в ответах на видоизмененные вопросы;

-Студент усваивает весь объем программного материала;

-Материал оформлен аккуратно в соответствии с требованиями;

Оценка «4» ставится тогда, когда:

-Студент знает весь изученный материал;

-Отвечает без особых затруднений на вопросы преподавателя;

-Студент умеет применять полученные знания на практике;

-В условных ответах не допускает серьезных ошибок, легко устраняет определенные неточности с помощью дополнительных вопросов преподавателя;

-Материал оформлен недостаточно аккуратно и в соответствии с требованиями;

Оценка «3» ставится тогда, когда:

-Студент обнаруживает освоение основного материала, но испытывает затруднения при его самостоятельном воспроизведении и требует дополнительных дополняющих вопросов преподавателя;

-Предпочитает отвечать на вопросы воспроизводящего характера и испытывает затруднения при ответах на воспроизводящие вопросы;

-Материал оформлен не аккуратно или не в соответствии с требованиями;

Оценка «2» ставится тогда, когда:

-У студента имеются отдельные представления об изучаемом материале, но все, же большая часть не усвоена;

-Материал оформлен не в соответствии с требованиями.

## **5. Список учебной литературы и информационно-методическое обеспечение дисциплины**

### **5.1. Основная литература**

1. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 183 с.
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 402 с.
3. Доломатов, М. Ю. Физико-химия наночастиц : учебное пособие для вузов / М. Ю. Доломатов, Р. З. Бахтизин, М. М. Доломатова. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 285 с.

### **5.2. 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. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия. 1986. 248 с.
5. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по квантовой теории молекул. Ростов-на-Дону: Изд-во Ростов. ун-та, 1992.
6. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия: Учеб. пособие. М.: Изд-во Моск ун-та, 1991. 384 с.
7. Мелёшина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1980. 215 с.
8. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985. 472 с.

### **5.3. Электронные ресурсы:**

1. <http://webmath.exponenta.ru>.
2. <http://mirknig.com>.
3. <http://www.toehelp.ru>.
4. <http://e.lanbook.com>
  - 5 <http://ibooks.ru/>
  6. <https://isu.bibliotech.ru/>



## ЭЛЕКТРОННО-БИБЛИОТЕЧНЫЕ СИСТЕМЫ

1. ЭБС «Издательство Лань» [Электронный ресурс]: электронная библиотечная система / ООО «Издательство Лань». – Режим доступа <https://e.lanbook.com/>;
2. ЭБС «Электронная библиотечная система ЮРАЙТ» [Электронный ресурс]: электронная библиотечная система / ООО «Электронное издательство ЮРАЙТ». – Режим доступа <https://biblio-online.ru/>;

### ПЕРЕЧЕНЬ ЛИЦЕНЗИОННОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

1. Windows Server 2019;
2. ILO;
3. ESET NOD32

#### 5.4. Перечень информационных технологий и программного обеспечения: MS Office.

## 6. Методические рекомендации преподавателям по дисциплине

### *Работа над конспектом лекции*

Основу теоретического обучения студентов составляют лекции. Они дают систематизированные знания студентам о наиболее сложных и актуальных проблемах изучаемой дисциплины. На лекциях особое внимание уделяется не только усвоению студентами изучаемых проблем, но и стимулированию их активной познавательной деятельности, творческого мышления, развитию научного мировоззрения, профессионально-значимых свойств и качеств. Лекции по учебной дисциплине проводятся, как правило, как проблемные в форме диалога (интерактивные).

Осуществляя учебные действия на лекционных занятиях, студенты должны внимательно воспринимать действия преподавателя, запоминать складывающиеся образы, мыслить, добиваться понимания изучаемого предмета, применения знаний на практике, при решении учебно-профессиональных задач. Студенты должны аккуратно вести конспект. В случае недопонимания какой-либо части предмета следует задать вопрос в установленном порядке преподавателю. В процессе работы на лекции необходимо так же выполнять в конспектах модели изучаемого предмета (рисунки, схемы, чертежи и т.д.), которые использует преподаватель.

Работу над конспектом следует начинать с его доработки, желательно в тот же день, пока материал еще легко воспроизводим в памяти (через 10 часов после лекции в памяти остается не более 30-40 % материала). С целью доработки необходимо прочитать записи, восстановить текст в памяти, а также исправить описки, расшифровать не принятые ранее сокращения, заполнить пропущенные места, понять текст, вникнуть в его смысл. Далее прочитать материал по рекомендуемой литературе, разрешая в ходе чтения возникшие ранее затруднения, вопросы, а также дополняя и исправляя свои записи. Записи должны быть наглядными, для чего следует применять различные способы выделений. В ходе доработки конспекта углубляются, расширяются и закрепляются знания, а также дополняется, исправляется и совершенствуется конспект.

Подготовленный конспект и рекомендуемая литература используются при подготовке к семинарским и практическим занятиям. Подготовка сводится к внимательному прочтению учебного материала, к выводу с карандашом в руках всех утверждений и формул, к решению примеров, задач, к ответам на вопросы. Примеры, задачи, вопросы по теме являются средством самоконтроля.

Непременным условием глубокого усвоения учебного материала является знание основ, на которых строится изложение материала. Обычно преподаватель напоминает, какой ранее изученный материал и в какой степени требуется подготовить к очередному занятию. Обращение к ранее изученному материалу не только помогает восстановить в памяти известные положения, выводы, но и приводит разрозненные знания в систему, углубляет и расширяет их. Каждый возврат к старому материалу позволяет найти в нем что-то новое, переосмыслить его с иных позиций, определить для него наиболее подходящее место в уже имеющейся системе знаний. Неоднократное обращение к пройденному материалу является наиболее рациональной формой приобретения и закрепления знаний.

### *Работа с рекомендованной литературой*

При работе с основной и дополнительной литературой целесообразно придерживаться та-

кой последовательности. Сначала прочитать весь заданный текст в быстром темпе. Цель такого чтения заключается в том, чтобы создать общее представление об изучаемом материале, понять общий смысл прочитанного. Затем прочитать вторично, более медленно, чтобы в ходе чтения понять и запомнить смысл каждой фразы, каждого положения и вопроса в целом.

Чтение приносит пользу и становится продуктивным, когда сопровождается записями. Это может быть составление плана прочитанного текста, тезисы или выписки, конспектирование и др. Выбор вида записи зависит от характера изучаемого материала и целей работы с ним. Если содержание материала несложное, легко усваиваемое, можно ограничиться составлением плана. Если материал содержит новую и трудно усваиваемую информацию, целесообразно его законспектировать.

План – это схема прочитанного материала, перечень вопросов, отражающих структуру и последовательность материала.

Конспект – это систематизированное, логичное изложение материала источника. Различаются четыре типа конспектов:

- план-конспект – это развернутый детализированный план, в котором по наиболее сложным вопросам даются подробные пояснения,
- текстуальный конспект – это воспроизведение наиболее важных положений и фактов источника,
- свободный конспект – это четко и кратко изложенные основные положения в результате глубокого изучения материала, могут присутствовать выписки, цитаты, тезисы; часть материала может быть представлена планом,
- тематический конспект – составляется на основе изучения ряда источников и дает ответ по изучаемому вопросу.

В процессе изучения материала источника и составления конспекта нужно обязательно применять различные выделения, подзаголовки, создавая блочную структуру конспекта. Это делает конспект легко воспринимаемым и удобным для работы.

### ***Подготовка к семинару***

Для успешного освоения материала студентам рекомендуется сначала ознакомиться с учебным материалом, изложенным в лекциях и основной литературе, затем выполнить самостоятельные задания, при необходимости обращаясь к дополнительной литературе.

При подготовке к семинару можно выделить 2 этапа:

- организационный,
- закрепление и углубление теоретических знаний.

На первом этапе студент планирует свою самостоятельную работу, которая включает:

- уяснение задания на самостоятельную работу;
- подбор рекомендованной литературы;
- составление плана работы, в котором определяются основные пункты предстоящей подготовки.

Составление плана дисциплинирует и повышает организованность в работе.

Второй этап включает непосредственную подготовку студента к занятию. Начинать надо с изучения рекомендованной литературы. Необходимо помнить, что на лекции обычно рассматривается не весь материал, а только его наиболее важная и сложная часть, требующая пояснений преподавателя в просе контактной работы со студентами. Остальная его часть восполняется в процессе самостоятельной работы. В связи с этим работа с рекомендованной литературой обязательна. Особое внимание при этом необходимо обратить на содержание основных положений и выводов, объяснение явлений и фактов, уяснение практического приложения рассматриваемых теоретических вопросов. В процессе этой работы студент должен стремиться понять и запомнить основные положения рассматриваемого материала, примеры, поясняющие его, разобраться в иллюстративном материале, задачах.

Заканчивать подготовку следует составлением плана (перечня основных пунктов) по изучаемому материалу (вопросу). Такой план позволяет составить концентрированное, сжатое представление по изучаемым вопросам и структурировать изученный материал.

Целесообразно готовиться к семинарским занятиям за 1- 2 недели до их начала, а именно: на основе изучения рекомендованной литературы выписать в контекст основные категории и понятия по учебной дисциплине, подготовить развернутые планы ответов и краткое содержание выполненных заданий.

Студент должен быть готов к контрольным опросам на каждом учебном занятии. Одобряется и поощряется инициативные выступления с докладами и рефератами по темам семинарских занятий.

### ***Подготовка докладов, выступлений и рефератов***

Реферат представляет письменный материал по определённой теме, в котором собрана информация из одного или нескольких источников. В нем в обобщенном виде представляется материал на определенную тему, включающий обзор соответствующих литературных и других источников. Рефераты могут являться изложением содержания какой-либо научной работы, статьи и т.п.

Доклад представляет публичное, развёрнутое сообщение (информирование) по определённому вопросу или комплексу вопросов, основанное на привлечении документальных данных, результатов исследования, анализа деятельности и т.д.

При подготовке к докладу на семинаре по теме, указанной преподавателем, студент должен ознакомиться не только с основной, но и дополнительной литературой, а также с последними публикациями по этой тематике в сети Интернет. Необходимо подготовить текст доклада и иллюстративный материал в виде презентации. Доклад должен включать введение, основную часть и заключение. На доклад отводится 20-25 минут учебного времени. Он должен быть научным, конкретным, определенным, глубоко раскрывать проблему и пути ее решения. Особенно следует обратить внимание на безусловную обязательность решения домашних задач, указанных преподавателем к семинару.

### ***Методические рекомендации студентам по подготовке к зачету и экзамену.***

При подготовке к зачету и экзамену студент должен повторно изучить конспекты лекций и рекомендованную литературу, просмотреть решения основных задач, решенных самостоятельно и на семинарах, а также составить письменные ответы на все вопросы, вынесенные на экзамен.

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

Учебные аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа № 228, 236.

Мультимедийное оборудование для демонстрации презентаций по каждой из тем дисциплины.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.

Также в университете имеется обширный библиотечный фонд, не только печатных, но и электронных изданий, с которыми студенты могут ознакомиться в открытом доступе.

В Университете созданы специальные условия обучающихся с ограниченными возможностями здоровья - специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы, специальные технические средства обучения коллективного и индивидуального пользования, предоставление услуг ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь, проведение групповых и индивидуальных коррекционных занятий, обеспечение доступа в здания организаций и другие условия, без которых невозможно или затруднено освоение дисциплины обучающимися с ограниченными возможностями здоровья.

Обучающимся с ограниченными возможностями здоровья предоставляются бесплатно специальные учебники и учебные пособия, иная учебная литература, а также обеспечивается:

наличие альтернативной версии официального сайта организации в сети "Интернет" для слабовидящих;

присутствие ассистента, оказывающего обучающемуся необходимую помощь;  
обеспечение выпуска альтернативных форматов печатных материалов (крупный шрифт или аудиофайлы);

возможность беспрепятственного доступа обучающихся в учебные помещения, столовые, туалетные и другие помещения организации, а также пребывания в указанных помещениях (наличие пандусов, поручней, расширенных дверных проёмов, лифтов).

### **8. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

*Форма итоговой аттестации:*

*6 семестр – Зачет; 7 семестр -зачет.*

Форма промежуточной аттестации 1 и 2 рубежный контроль проводят в форме – устной форме.

#### **Итоговая система оценок по кредитно-рейтинговой системе с использованием буквенных символов**

<b>Оценка по буквенной системе</b>	<b>Диапазон соответствующих наборных баллов</b>	<b>Численное выражение оценочного балла</b>	<b>Оценка по традиционной системе</b>
<b>A</b>	10	95-100	Отлично
<b>A-</b>	9	90-94	
<b>B+</b>	8	85-89	Хорошо
<b>B</b>	7	80-84	
<b>B-</b>	6	75-79	
<b>C+</b>	5	70-74	Удовлетворительно
<b>C</b>	4	65-69	
<b>C-</b>	3	60-64	
<b>D+</b>	2	55-59	
<b>D</b>	1	50-54	
<b>Fx</b>	0	45-49	Неудовлетворительно
<b>F</b>	0	0-44	

*Содержание текущего контроля, промежуточной аттестации, итогового контроля раскрываются в фонде оценочных средств, предназначенных для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС ВО.*

*ФОС по дисциплине является логическим продолжением рабочей программы учебной дисциплины. ФОС по дисциплине прилагается.*