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

Декан естественнонаучного факультета

Муродзода Д.С.

2025 г.

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

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования РФ №891 от 07.08.2020 г.

При разработке рабочей программы учитываются

- требования работодателей, профессиональных стандартов по направлению;
- 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 « В » августа 2025 г.

Рабочая программа утверждена УМС естественнонаучного факультета, протокол № 1 от «  $\mathcal{L}$  » августа 2025 г.

Рабочая программа утверждена Ученым советом естественнонаучного факультета, протокол № 1 от « 29 » августа 2025 г.

Заведующий кафедрой, к.б.н., доцент Зам. председателя УМС факультета, ст. преподаватель Разработчик, к.ф.-м.н., доцент Разработчик от организации, преподаватель химии и биологии СОШ №20

Файзиева С.А.

Мирзокаримов О.А.

Насруллоев Х.

Гадоева Р.А.

Расписание занятий дисциплины

Ф.И.О.	Аудиторные занятия			
преподавателя			Приём СРС	Место работы
	Лекция	Практ.	_	преподавателя
		занятия и		_
		КРС		
Насруллоев Х.				РТСУ, кафедра
				математики и
				физики, основной
				корпус, 203 каб.

#### 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИЗУЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### 1.1. Цели изучение 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 квантмеханических законов микроскопических систем; а также знакомство с возможностями их использования в профессиональной научно-педагогической деятельности.

#### 1.2. Задачи изучение 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.

## 1.3. Компетенции студентов, формируемые в результате освоения дисциплины

В результате изучения дисциплины «Квантовая механики и квантовая химия» у обучающихся формируются следующие общекультурные (универсальные)/ общепрофессиональные/ профессиональные / профессионально-специализированные, професссонально-дополнительные компетенции (элементы компетенций)

Таблица 1.\*

Коды ком- петенции	Результаты освоения ООП Содержание	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине	Вид оценочного средства
ПК(У)-2	компетенций владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	И.ПК(У)-2.1. знает возможности 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. И.ПК(У)-2.2. проводит калибровку и настройку серийного оборудования химических лабораторий; анализировать химические вещества и объекты и контролировать протекание процессов на серийном и сложном научном оборудовании. И.ПК(У)-2.3. владеет практическими навыками работы на серийном научном оборудовании химических лабораторий (фотометры, иономеры, рН-метры, весы, термостаты); теоретическими основами и практическими навыками работы на сложном научном оборудовании химических лабораторий (хроматографы, полярографы, спектрофотометры, флуориметры, кулонометры)	Выступление
ПК(У)-3	способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	И.ПК(У)-3.1 знает 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. И.ПК(У)-3.2 объясняет использование логических операций для систематизации и прогнозирования химической информации; проводить анализ, мониторинг и экспертизу объектов различного класса. И.ПК(У)-3.3 владеет 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	

#### 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия» относится к вариативной части учебного плана (Б2.В.03) направления подготовки бакалавра «Химия».

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

Данная дисциплина изучается на 6-7 семестре и содержательно методически взаимосвязана с дисциплинами ООП, 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.

2.2

Таблица 2\*.

			Место
$N_{\underline{0}}$	Название дисциплины	Семестр	дисциплины в
			структуре ООП
1.	Строения вещества	5	Б1.В.07
2.	Хроматографические методы анализа	8	Б1.В.10
3.	Физические методы исследования	8	Б1. В.11
4.	Кристаллохимия	8	Б1. В.14
5.	Основы химической термодинамики	7	Б1. В.ДВ.04.01
6.	Основные законы химии	4	Б1. В.ДВ.05.02

#### 3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ КУРСА, КРИТЕРИИ НАЧИСЛЕНИЕ БАЛЛОВ

Объем дисциплины Квантовая механика и квантовая химия составляет:

6 семестр: 2 зачетных единиц, всего 72-часов, из которых: лекции 20час., практические занятия 10-час., КСР 10-час., всего часов аудиторной нагрузки 40-час., самостоятельная работа 62- час. Форма контроля — зачет.

7 семестр: 3 зачетных единиц, всего 108-часов, из которых: лекции 32-час., практические занятия 16-час., КСР 16-час., всего часов аудиторной нагрузки 64-час., самостоятельная работа 44- час. Форма контроля — зачет.

#### 3.1. Структура и содержание теоретической части курса VI семестр

Тема 1. Основные постулаты квантовой механики. 2 час.

Эксперименты, ставящие истоками возникновение 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. 2 час.

Операторы Алгебра операторов. Линейные и эрмитовые операторы. Собственные значение 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. 2 час.

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

Тема 4. Операторы физических величин. 2 час.

Составление (введение) операторов основных физических величин. Оператор вектора импульса его компонентов, оператор вектора момента импульса его компонентов. Оператор энергии. Гамилтониан.

Тема 5. Соотношения неопределенностей. 2 час.

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

Тема 6. Соотношения неопределенностей (продолжение). 2 час.

Соотношение неопределенности – как следствие двоякой (корпускулярной и волновой) природы квантовых объектов. Соотношение

неопределенности Гейзенбарга и ее смысл. Критерий одновременной изменяемости физических величин.

Тема 7. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. 2 час.

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

Тема 8. Эволюция состояний и уравнение Шредингера (продолжение). 2 час.

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

Тема 9. Простейшие примеры применения квантовой механики. 2 час.

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

Тема 10. Простейшие примеры применения квантовой механики (продолжение). 2 час.

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

Итого 20 час.

#### VII семестр

Тема 1. Задачи о прямоугольном потенциальном яме.

Составления гамильтониана случая нахождение 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.

Тема 3. Теория атома водорода.

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

Тема 4. Орбитали водородоподобные атомов. Функции состояний атома водорода. Электронные оболочки атома водорода. s – оболочки.

Тема 5. Вырождение одноэлектронных состояний.

Вырожденные и невырожденные состояний. Математический смыл вырождености - соответствие нескольких собственных функции состояний одному и тому значению собственной значении оператора.

Тема 6. Приближенные методы решения квантово-механических задач.

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

- Тема 7. Вариационный принцип квантовой механики
- Тема 8. Теория возмущений для стационарных состояний 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

  Расщепление спектральных линий атома в магнитном поле.

  Нормальный и аномальный эффект Зеемана.
- Тема 10. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц.
  Магнитный момент атома. Магнитное квантовое число. Магнетон Бора.
- Тема 11. Атом в постоянном электрическом поле. Снятие вырождения. Теория эффекта Штарка (атом в слабом электрическом поле). Теория аномального эффекта Зеемана. Расщепление энергетических уровнейснятие вырождения.
- Тема 12. Спин элементарных частиц.

  Опытное явление тонкое расщепление спектральных линий. Гипотеза
  Уленбека и Гоудсммита. Спин электрона- собственный момент
  механического движения электрона. Спиновое квантовое число.
- Тема 13.Операторы спина и коммутационные соотношения.

  Введение оператора спина. Коммутационные соотношение для спиновых операторов. Спиновые функции состояний.
- Тема 14. Квантовая система в переменном электромагнитном поле.

  Переменные электрические и магнитные поля. Одноэлектронная система в электромагнитном поле. Элементы теории излучения.
- Тема 15. Теория возмущений нестационарных состояний.
   Нестационарное состояние. Возмущения, зависящая от времени.
   Элементы теории возмущений для нестационарных состояний.
- Тема 16. Переходы под влиянием излучения и правила отбора.

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

Итого 32 час.

#### 3.2. Структура и содержание практической части курса 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.

Итого 10 час.

#### VII семестр

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

Занятие 2. Элементы и операции симметрии -2ч.

Занятие 3. Симметрия и свойства молекул. -2ч.

Занятие 4. Классификация электронных состояний молекул -2ч.

Занятие 5. Связывающие и разрыхляющие орбитали.

Занятие 6. Локализованные молекулярные орбитали

Занятие 7. Связывающие и разрыхляющие орбитали.

Занятие 8. Связывающие и разрыхляющие орбитали.

Итого 16 час.

#### 3.3. Структура и содержание КСР VI семестр

**Занятие 1.** Анализ методов. Простейшие модели описания на основе методов молекулярных орбиталей и валентных схем молекулярных орбиталей и валентных схем - 2 час.

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

**Занятие 3.** Качественный анализ геометрического строения малых многоатомных молекул - 2 час.

Занятие 4. Теория кристаллического поля. - 2 час.

**Занятие 5.** Приближения, используемые при расчетах и при интерпретации электронного строения органических соединений. - 2 час.

#### Итого 10 час.

#### VII семестр

- Занятие 1. Перенос заряда при образовании химических соединений
- Занятие 2. Комплексы с переносом заряда.
- **Занятие 3.** Качественная теория реакционной способности органических сединений.
- 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. Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности.

Итого 16 час.

Таблица 4.

<b>№</b> π/π	Раздел дисциплины	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Лит- ра	Кол-во баллов в неделю	
		Лек.	Пр.	Лаб.	КСР	CPC		
	l .	6- семес	тр				1	
1.	Основные постулаты квантовой механики.	2				3	1-5	12,5
2.	Уравнение Шредингера для атомов и молекул		2			3	1-5	
3.	Математический аппарат квантовой механики.	2				3	1-5	12,5
4.	Анализ методов. Простейшие модели описания на основе методов молекулярных орбиталей и валентных схем молекулярных орбиталей и валентных схем				2	3	1-5	
5.	Плотность вероятности состояний квантовых систем	2				3	1-5	12,5
6.	Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул		2			3	1-5	
7.	Операторы физических величин	2				3	1-5	12,5
8.	Анализ волновых функций молекулярного иона и молекулы водорода				2	3	1-5	
9.	Соотношения неопределенностей	2				3	1-5	12,5

10.	Роль представлений о поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории		2			3	1-5	
	химии							
1.1		2				3	1.5	12.5
11.	Соотношения неопределенностей (продолжение)	2				3	1-5	12,5
12.	Качественный анализ				2	3	1-5	
	геометрического строения малых							
	многоатомных молекул							
13.	Эволюция состояний и уравнение	2				3	1-5	12,5
	Шредингера							
14.	Электронное волновое уравнение		2			3	1-5	
15.	Эволюция состояний и уравнение	2				3	1-5	12,5
	Шредингера (продолжение)							
16.	Теория кристаллического поля.				2	3	1-5	
17.	Простейшие примеры применения	2				3	1-5	12,5
	квантовой механики							
18.	Электронное строение атомов		2			3	1-5	
19.	Простейшие примеры применения	2				4	1-5	12,5
	квантовой механики (продолжение)							
20.	Приближения, используемые при				2	4	1-5	
	расчетах и при интерпретации							
	электронного строения органических							
	соединений							
	ИТОГО:	20	10		10	62		200
		7 семес	тр	I		ı		
1.	Задачи о прямоугольном	2				3	1-5	12,5
	потенциальном яме							,
2.	Электронное строение атомов и		2				1-5	
	периодическая система							
3.	Перенос заряда при образовании	2				3	1-5	12,5
	химических соединений							,-
4.	Перенос заряда при образовании				2	1	1-5	
]	химических соединений				_			
5.	Теория атома водорода	2				3	1-5	12,5
	Теерий штемш ведереди	_						12,0
6.	Элементы и операции симметрии		2				1-5	
7.	Орбитани ранаранананабина атамар	2				3	1-5	12.5
/.	Орбитали водородоподобные атомов	2				3	1-3	12,5
8.	Комплексы с переносом заряда				2		1-5	
	Transference of the period of the suprification of				-			
9.	Вырождение одноэлектронных	2				3	1-5	12,5
	состояний							,
	•							

10.	Симметрия и свойства молекул		2			1-5	
11.	Приближенные методы решения квантово-механических задач	2			3	1-5	12,5
12.	Качественная теория реакционной способности органических сединений			2		1-5	
13.	Вариационный принцип квантовой механики	2			3	1-5	12,5
14.	Классификация электронных состояний молекул		2			1-5	
15.	Теория возмущений для стационарных состояний	2			3	1-5	12,5
16.	Индексы реакционной способности			2		1-5	
17.	Атом в магнитном поле	2			3	1-5	12,5
18.	Связывающие и разрыхляющие орбитали		2			1-5	
19.	Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц	2			3	1-5	12,5
20.	Концепция жестких и мягких кислот и оснований			2		1-5	
21.	Атом в постоянном электрическом поле. Снятие вырождения	2			3	1-5	12,5
22.	Локализованные молекулярные орбитали		2			1-5	
23.	Спин элементарных частиц	2			3	1-5	12,5
24.	Электростатическое поле и его влияние на реакционную способность			2		1-5	
25.	Операторы спина и коммутационные соотношения	2			2	1-5	12,5
26.	Связывающие и разрыхляющие орбитали		2			1-5	
27.	Квантовая система в переменном электромагнитном поле	2			2	1-5	12,5
28.	Квантово химическое описание элементарного акта химических реакций			2		1-5	
29.	Теория возмущений нестационарных состояний	2			2	1-5	12,5
30.	Связывающие и разрыхляющие орбитали		2			1-5	
31.	Переходы под влиянием излучения и правила отбора	2			2	1-5	12,5
32.	Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности			2		1-5	
	Итого:	32	16	16	44		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.

Итоговая форма контроля по дисциплине (экзамен) проводится в форме тестирования.

Недел я	Активное участие на лекционных занятиях, написание конспекта и выполнение других видов работ*	Активное участие на практическ их (семинарск их) занятиях, КСР	СРС Написание реферата, доклада, эссе Выполнение других видов работ	Выполнение положения высшей школы (установленная форма одежды, наличие рабочей папки, а также других пунктов устава высшей школы)	Администра тивный балл за примерное поведение	Всего
1	2	3	4	5	6	7
1	2,5	4	2,5	2,5	-	12,5
2	2,5	4	2,5	2,5	-	12,5
3	2,5	4	2,5	2,5	-	12,5
4	2,5	4	2,5	2,5	-	12,5
5	2,5	4	2,5	2,5	-	12,5
6	2,5	4	2,5	2,5	-	12,5
7	2,5	4	2,5	2,5	-	12,5
8	2,5	4	2,5	2,5	-	12,5
9					8	12,5
Перв ый рейти нг	20	32	20	20	8	100

Формула вычисления результатов дистанционного контроля и итоговой формы контроля по дисциплине за семестр <u>для студентов 4-х курсов</u>:

$$ME = \left[ \frac{(P_1 + P_2)}{2} \right] \cdot 0,49 + 3u \cdot 0,51 ,$$

где ИБ —  $umoroвый балл, <math>P_1$ - итоги первого рейтинга,  $P_2$ - итоги второго рейтинга, Эu — результаты итоговой формы контроля (зачет, зачет с оценкой, экзамен).

#### 4. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Самостоятельная работа позволяет оптимально сочетать теоретическую и обеспечивается практическую составляющие обучения. При ЭТОМ упорядочивание теоретических знаний, что, в конечном счёте, приводит к повышению мотивации обучающихся в их освоении. Самостоятельная работа планируется и организуется с целью углубления и расширения теоретических знаний, формирования самостоятельного логического мышления. Организация этой работы позволяет оперативно обновлять содержание образования, создавая предпосылки для формирования базовых (ключевых) компетенций категории интеллектуальных (аналитических) и обеспечивая, таким образом, качество подготовки специалистов на конкурентоспособном уровне. Из всех ключевых компетенций, которые формируются в процессе выполнения самостоятельных работ, следует выделить следующие: умение учиться, умение осуществлять поиск и интерпретировать информацию, повышение ответственности за собственное обучение.

Самостоятельная работа студентов проводится с целью:

- систематизации и закрепления полученных теоретических знаний и практических умений студентов;
  - углубления и расширения теоретических знаний;
- формирования умений использовать справочную и специальную литературу;
  - развития познавательных способностей и активности студентов:
- творческой инициативы, самостоятельности, ответственности и организованности;
- формирования самостоятельности мышления, способностей к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации;
  - развития исследовательских умений.
    - По дисциплине «Радиофизика» используется самостоятельной работы:
- аудиторная;
- внеаудиторная.
  - К основным аудиторным видам относятся:
- Активная работа на лекциях
- Активная работа на практических занятиях
- Контрольно-обучающие программы тестирования (КОПТ).
- Выполнение контрольных работ.
  - Внеаудиторная работа проводится в следующих видах:
- Проработка лекционного материала,
- Подготовка к практическим занятиям,

- Подготовка к аудиторным контрольным работам,
- Выполнение СРС,
- Подготовка к защите СРС,
- Подготовка к зачету, экзамену.

## 4.1. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Радиофизика» включает в себя:

#### 4.1 План-график выполнения СРС по дисциплине

#### «Квантовая механика и квантовая химия»

В процессе изучения дисциплины, студенты должны выполнять следующие виды самостоятельной работы указанной форме контроля:

Таблица 5а.

$N_{\underline{0}}$	К-	Темы самостоятельной	Форма	Форма
ПП	во	работы студентов (СРС)	CPC	контроля
	час.			
		VI семестр		
1-2	9	Квантовые состояния и волновые функции, основные	Конспект	Доклад
		свойства волновых функций.		
3-4	9	Операторы физических величин в квантовой механике.	Конспект	Доклад
5-6	9	Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.	Реферат	Выступление
7-8	9	Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения.	Конспект	Опрос
9-	9	Разложение по собственным функциям эрмитова	Презентация	Выступление
10		оператора.	_	-
11-	9	Оператор Гамильтона (гамильтониан)	Конспект	Опрос
12				
13-	8	Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение	Реферат	Выступление
14		непрерывности		
ИТС	ого:	62 ч.		
		VII семестр		
1	2	Качественные особенности волновых функций	Конспект	Опрос
2	2	Теория момента импульса.	Конспект	Коллоквиум
3	2	Физический смысл соотношении неопределенностей.	Конспект	Доклад
4	2	Приближения, используемые при интерпретации	Конспект	Доклад
		электронного строения органических соединений		
5	2	Вариационный метод Ритца.	Конспект	Доклад

6	2	Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.	Реферат	Выступление
7	2	Представление волновой функции системы электронов	Конспект	Опрос
		в виде определителя.		
8	2	Разделение электронного и ядерного движений.	Презентация	Выступление
9	2	Роль представлений о поверхности потенциальной	Конспект	Опрос
		энергии в современной структурной теории химии.		_
10	2	Электронная плотность и ее изменения при переходе от	Реферат	Выступление
		разделенных атомов к молекуле.		
11	3	Построение приближенных решений электронного	Конспект	Опрос
		волнового уравнения		
12	3	Метод Хартри - Фока (самосогласованного поля	Конспект	Коллоквиум
13	3	Пределы применимости метода Хартри - Фока	Конспект	Доклад
14	3	Электронные конфигурации и термы атомов.	Конспект	Доклад
15	3	Классификация молекулярных орбиталей по симметрии.	Реферат	Выступление
16	3	Полуэмпирические методы квантовой химии	Конспект	Опрос
17	3	Дисперсионное взаимодействие. Ван-дер-Ваальсовы	П	D
		комплексы.	Презентация	Выступление
18	3	Возможности и ограничения применения	Конспект	Опрос
		полуэмпирических методов квантовой химии.		
ИТС	ГО:	44 час		

## 4.2. Характеристики заданий для самостоятельной работы и методические рекомендации по их ваыполнению

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 нормативную, правовую,
   справочную документацию и специальную литературу;
- развития познавательных способностей и активности обучающихся: творческой инициативы, ответственности и организованности;

- развития исследовательских умений.

Образовательное учреждение самостоятельно планирует объем внеаудиторной самостоятельной работы по каждой учебной дисциплине и профессиональному модулю, исходя из объемов максимальной и обязательной учебной нагрузки обучающегося.

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.

Объем времени, отведенный на внеаудиторную самостоятельную работу, находит отражение:

- в учебном плане, в целом по теоретическому обучению, по циклам, дисциплинам, по профессиональным модулям и входящим в их состав междисциплинарным курсам;
- в программах учебных дисциплин и профессиональных модулей с распределением по разделам или темам.

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

Методические указания к выполнению реферата:

- Тема реферата; - Цель реферата: привить обучающимся навыки самостоятельного исследования той или иной проблемы естествознания. - Исходные требования. Выбор темы реферата определяется обучающимися самостоятельно в соответствии с "Перечнем тем рефератов" (Приложение 1) и утверждается преподавателем профессионального модуля.

Перечень тем реферата периодически обновляется и дополняется.

Обучающиеся вправе самостоятельно выбрать любую тему реферата.

При написании доклада по заданной теме следует составить план, подобрать основные источники. Работая с источниками, следует систематизировать полученные сведения, сделать выводы и обобщения. К докладу по крупной теме привлекается несколько студентов, между которыми распределяются темы для выступления. В учебных заведениях доклады содержательно практически ничем не отличаются от рефератов и являются зачётной работой.

Реферат — краткое изложение в письменном виде или в форме публичного доклада содержания научного труда или трудов, обзор литературы по теме. Это самостоятельная научно-исследовательская работа студента, в которой раскрывается суть исследуемой проблемы. Изложение материала носит проблемно-тематический характер, показываются различные точки зрения, а также собственные взгляды автора на проблему.

Содержание реферата должно быть логичным. Объём реферата, как правило, от 5 до 10 страниц от руки. Темы реферата разрабатывает преподаватель, ведущий данную дисциплину. Перед началом работы над рефератом следует наметить план и подобрать литературу. Прежде всего, следует пользоваться литературой, рекомендованной учебной программой, а затем расширить список источников, включая и использование специальных журналов, где имеется новейшая научная информация.

#### Структура реферата:

- Титульный лист.
- Оглавление.
- Введение (дается постановка вопроса, объясняется выбор темы, её значимость и актуальность, указываются цель и задачи реферата, даётся характеристика используемой литературы).

#### 4.4. Критерии оценки результатов самостоятельной работы

Критерии оценки выполнения самостоятельной работы представлены в Фонде оценочных средств.

#### 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, 2024. 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, 2024. 402 с.
- 3. *Доломатов*, *М. Ю*. Физико-химия наночастиц: учебное пособие для вузов / М. Ю. Доломатов, Р. 3. Бахтизин, М. М. Доломатова. 2-е изд., перераб. и доп. Москва: Издательство Юрайт, 2024. 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.
  - 8.Мелёшина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1980. 215 с.
  - 10. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985. 472 с.

#### 5.3 Нормативно-правовые материалы (по мере необходимости)

## 5.4 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет

- 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 Serwer 2019;
- 2. ILO:
- 3. ESET NOD32

#### 6. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Студенты, изучающие курс «Квантовая физика и квантовая химия»

должны обратить внимание на современных подходах изучения процессов и явлений природы. Необходимо больше внимание уделять использованию возможностей практических и лабораторных работ. Четко представлять основные понятия ООП. Структура и свойства объектов природы отражать на модули особого вида, объединяющие данные и процедуры их обработки. Кроме того студенты должны достаточно хорошо владеть размерностями физических величин. Знать основные и вспомогательные единицы измерения. Создать модели объектов природы, математически описать их и получить данные. Обратить внимание на основные постулаты принципы и концепции физики. Логически и теоретически связать микро- и макропараметров. Найти связь между структурой и свойством объекта. Отличить классического подхода от неклассического. При решении задач и исследование объектов применять системного метода.

Общую схему изучения предмета «Квантовая физика и квантовая химия» можно представить в следующем виде:

- Приобретение необходимых знаний по общим методологиям естествознанием.
- Приобретение необходимых знаний и навыков по решению задач и проведение лабораторных работ.
- Приобретение необходимых знаний и навыков по использованию основных принципов и концепции естествознании.
- Приобретение необходимых знаний и навыков для решения тестовых задач.
- Приобретение необходимых умений по оценки погрешностей опыта.

#### 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

При проведении занятий по дисциплине «Квантовая физика и квантовая химия» используются как классические формы и методы обучения (лекции, практические занятия), так и активные методы обучения (контрольно-обучающие программы тестирования по всем разделам изучаемого материала, работа с ЭУК при подготовке к занятиям, контрольным работам и рейтингового контроля.). Применение любой формы обучения предполагает также использование новейших IT-обучающих технологий.

При проведении лекционных занятий по дисциплине «Аналитическая геометрия» целесообразно использовать мультимедийное презентационное оборудование, чтобы сделать более наглядными и понятными доказательства теорем, методики и алгоритмы решения задач и примеров, иллюстрирующих теоретические выводы и их прикладную направленность. Преподаватель использует компьютерные и мультимедийные средства обучения (презентации,

содержащиеся в ЭУК), а также наглядно-иллюстрационные (в том числе раздаточные) материалы.

Университете созданы специальные условия обучающихся ограниченными возможностями здоровья - специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы, специальные технические средства обучения коллективного и индивидуального пользования, предоставление услуг (помощника), оказывающего обучающимся ассистента 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.

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

Оценка по буквенной системе	Диапазон соответствующих наборных баллов	Численное выражение оценочного балла	Оценка по традиционной системе
A			
	10	95-100	Отлично
<b>A-</b>	9	90-94	
B+	8	85-89	Хорошо

В	7	80-84	
В-	6	75-79	
<b>C</b> +	5	70-74	
C	4	65-69	
C-	3	60-64	Vuonuottoonutalliuo
D+	2	55-59	Удовлетворительно
D	1	50-54	
Fx	0	45-49	Неудовлетворительно

Содержание текущего контроля, промежуточной аттестации, итогового контроля раскрываются в фонде оценочных средств, предназначенных для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям  $\Phi \Gamma OC\ BO$ .

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