



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ, НАУКИ И МОЛОДЕЖИ РЕСПУБЛИКИ КРЫМ

**Государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
Республики Крым
«Крымский инженерно-педагогический университет имени Февзи Якубова»
(ГБОУВО РК КИПУ имени Февзи Якубова)**

Кафедра технологического образования

СОГЛАСОВАНО

Руководитель ОПОП

_____ Р.И. Сулейманов

21 марта 2024 г.

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

_____ Р.И. Сулейманов

21 марта 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.02.ДВ.02.01 «Основы квантовой химии»**

направление подготовки 44.03.01 Педагогическое образование
профиль подготовки «Химия»

факультет психологии и педагогического образования

Симферополь, 2024

Рабочая программа дисциплины Б1.В.02.ДВ.02.01 «Основы квантовой химии» для бакалавров направления подготовки 44.03.01 Педагогическое образование. Профиль «Химия» составлена на основании ФГОС ВО, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 22.02.2018 № 121.

Составитель
рабочей программы _____ Ю.В. Толстенко
подпись

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры
технологического образования
от 26 февраля 2024 г., протокол № 8

Заведующий кафедрой _____ Р.И. Сулейманов
подпись

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании УМК факультета
психологии и педагогического образования
от 21 марта 2024 г., протокол № 7

Председатель УМК _____ Л.И. Аббасова
подпись

1. Рабочая программа дисциплины Б1.В.02.ДВ.02.01 «Основы квантовой химии» для бакалавриата направления подготовки 44.03.01 Педагогическое образование, профиль подготовки «Химия».

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной

2.1. Цель и задачи изучения дисциплины (модуля)

Цель дисциплины (модуля):

– получение теоретических знаний о современных представлениях квантовой химии, о методах расчета пространственной и электронной структуры молекул, а также приобретение умений и навыков работы с комплексами квантово-химических программ для решения задач.

Учебные задачи дисциплины (модуля):

– формирование способности понимать строение молекул и использовать основные законы квантовой химии в профессиональной деятельности;
– развитие творческого мышления, объединение фундаментальных знаний основ квантовой химии и метода моделирования при проведении практических занятий с последующей обработкой и анализом результатов исследований.

2.2. Планируемые результаты освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины Б1.В.02.ДВ.02.01 «Основы квантовой химии» направлен на формирование следующих компетенций:

ПК-1 - Способен осваивать и использовать теоретические знания и практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать:

– структуру, состав и дидактические единицы предметной области (преподаваемого предмета).

Уметь:

– отбирать учебное содержание для его реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО.

Владеть:

– различными формами учебных занятий, применяет методы, приемы и технологии обучения, в том числе информационные.

3. Место дисциплины в структуре ОПОП.

Дисциплина Б1.В.02.ДВ.02.01 «Основы квантовой химии» относится к дисциплинам по выбору части, формируемой участниками образовательных отношений и входит в модуль "Технологический" учебного плана.

4. Объем дисциплины (модуля)

(в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу

Семестр	Общее кол-во часов	кол-во зач. единиц	Контактные часы						СР	Контроль (время на контроль)
			Всего	лек	лаб. зан.	практ. зан.	сем. зан.	ИЗ		
4	108	3	36	12		24			72	За
Итого по ОФО	108	3	36	12		24			72	

5. Содержание дисциплины (модуля) (структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий)

Наименование тем (разделов, модулей)	Количество часов														Форма текущего контроля
	очная форма							заочная форма							
	Всего	в том числе						Всего	в том числе						
		л	лаб	пр	сем	ИЗ	СР		л	лаб	пр	сем	ИЗ	СР	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Тема 1. История развития представлений о строении атомов и молекул.	9	1		2			6								устный опрос
Тема 2. Теории Резерфорда и Бора	9	1		2			6								практическое задание
Тема 3. Основы квантовой механики. Работы Луи де Бройля, Гейзенберга, Шредингера	9	1		2			6								устный опрос
Тема 4. Основные положения современной теории строения атомов. Квантовые числа. Энергетические диаграммы	11	2		3			6								практическое задание
Тема 5. Строения ядра и ядерный распад	12	1		3			8								практическое задание
Тема 6. Электронные формулы элементов	9	1		2			6								практическое задание

Тема 7. Квантовохимический подход к описанию ковалентной химической связи	9	1		2			6										практическое задание
Тема 8. Метод ВС	9	1		2			6										устный опрос
Тема 9. Метод МО	11	1		2			8										устный опрос
Тема 10. Химическая связь в координационных соединениях	11	1		2			8										устный опрос
Тема 11. Ионная связь. Металлическая связь	9	1		2			6										устный опрос
Всего часов за 4 семестр	108	12		24			72										
Форма промеж. контроля	Зачет																
Всего часов дисциплине	108	12		24			72										
часов на контроль																	

5. 1. Тематический план лекций

№ лекц	Тема занятия и вопросы лекции	Форма проведения (актив., интерак.)	Количество часов	
			ОФО	ЗФО
1.	Тема 1. История развития представлений о строении атомов и молекул. <i>Основные вопросы:</i> Открытие явления радиоактивности. Определение радиоактивности Беккерелем Современное определение. Явление фотоэффекта. Объяснение появления фототока с позиции теории Эйнштейна Открытие рентгеновских лучей Атомные спектры	Акт.	1	
2.	Тема 2. Теории Резерфорда и Бора <i>Основные вопросы:</i> Теории Резерфорда и Бора	Акт.	1	
3.	Тема 3. Основы квантовой механики. Работы Луи де Бройля, Гейзенберга, Шредингера <i>Основные вопросы:</i> Работы Луи де Бройля, Гейзенберга,	Акт.	1	

	Воображаемый эксперимент, уравнение Шредингера Принцип неопределенности Гейзенберга Волновая функция Математические требования к волновой функции			
4.	Тема 4. Основные положения современной теории строения атомов. Квантовые числа. Энергетические диаграммы <i>Основные вопросы:</i> Основные положения современной теории строения атомов Квантовые числа Энергетические диаграммы	Акт.	2	
5.	Тема 5. Строения ядра и ядерный распад <i>Основные вопросы:</i> Строения ядра и ядерный распад	Акт.	1	
6.	Тема 6. Электронные формулы элементов <i>Основные вопросы:</i> Электронные семейства элементов Краткая характеристика. Периодический закон. Периодическая система (ПС) элементов Связь положения элемента в ПС с его электронным строением	Акт.	1	
7.	Тема 7. Квантовохимический подход к описанию ковалентной химической связи <i>Основные вопросы:</i> Квантовохимический подход к описанию ковалентной химической связи	Акт.	1	
8.	Тема 8. Метод ВС <i>Основные вопросы:</i> Основные положения метода ВС. Канонические и резонансные структуры Перекрытие атомных орбиталей. Интеграл перекрывания Свойства химической связи по методу ВС. Насыщаемость. Понятие ковалентности. Направленность. Гибридизация АО Поляризуемость. Поляризующие действие. Виды связи по симметрии	Акт.	1	
9.	Тема 9. Метод МО	Акт.	1	

	<p><i>Основные вопросы:</i></p> <p>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)</p>			
10.	<p>Тема 10. Химическая связь в координационных соединениях</p> <p><i>Основные вопросы:</i></p> <p>Применение метода МО к соединениям d – элементов (октаэдрический комплекс) Применение метода МО к соединениям d – элементов (тетраэдрический комплекс) Описание химической связи в координационных соединениях с помощью теории кристаллического поля</p>	Акт.	1	
11.	<p>Тема 11. Ионная связь. Металлическая связь</p> <p><i>Основные вопросы:</i></p> <p>Свойства ионной связи Расчет энергии кристаллической решетки (уравнение Борна) Свойства металлической связи Теория электронного газа Зонная теория. Металлические типы решеток</p>	Акт.	1	
	Итого		12	0

5. 2. Темы практических занятий

№ занятия	Наименование практического занятия	Форма проведения (актив., интерак.)	Количество часов	
			ОФО	ЗФО
1.	Тема 1. История развития представлений о строении атомов и молекул.	Акт.	2	
2.	Тема 2. Теории Резерфорда и Бора	Акт.	2	

3.	Тема 3. Основы квантовой механики. Работы Луи де Бройля, Гейзенберга, Шредингера	Акт.	2	
4.	Тема 4. Основные положения современной теории строения атомов. Квантовые числа. Энергетические диаграммы	Акт.	3	
5.	Тема 5. Строения ядра и ядерный распад	Акт.	3	
6.	Тема 6. Электронные формулы элементов	Акт.	2	
7.	Тема 7. Квантовохимический подход к описанию ковалентной химической связи	Акт.	2	
8.	Тема 8. Метод ВС	Акт.	2	
9.	Тема 9. Метод МО	Акт.	2	
10.	Тема 10. Химическая связь в координационных соединениях	Акт.	2	
11.	Тема 11. Ионная связь. Металлическая связь	Акт.	2	
	Итого			

5. 3. Темы семинарских занятий

(не предусмотрены учебным планом)

5. 4. Перечень лабораторных работ

(не предусмотрено учебным планом)

5. 5. Темы индивидуальных занятий

(не предусмотрено учебным планом)

6. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа по данной дисциплине включает такие формы работы как: работа с базовым конспектом; подготовка к устному опросу; подготовка к практическому занятию; подготовка к зачету.

6.1. Содержание самостоятельной работы студентов по дисциплине

№	Наименование тем и вопросы, выносимые на самостоятельную работу	Форма СР	Кол-во часов	
			ОФО	ЗФО
1	Тема 1. История развития представлений о строении атомов и молекул.	подготовка к устному опросу	6	
2	Тема 2. Теории Резерфорда и Бора	подготовка к практическому занятию	6	
3	Тема 3. Основы квантовой механики. Работы Луи де Бройля, Гейзенберга, Шредингера	подготовка к устному опросу	6	

4	Тема 4. Основные положения современной теории строения атомов. Квантовые числа. Энергетические диаграммы	подготовка к практическому занятию	6	
5	Тема 5. Строения ядра и ядерный распад	подготовка к практическому занятию	8	
6	Тема 6. Электронные формулы элементов	подготовка к практическому занятию	6	
7	Тема 7. Квантовохимический подход к описанию ковалентной химической связи	подготовка к практическому занятию	6	
8	Тема 8. Метод ВС	подготовка к устному опросу	6	
9	Тема 9. Метод МО	подготовка к устному опросу	8	
10	Тема 10. Химическая связь в координационных соединениях	подготовка к устному опросу	8	
11	Тема 11. Ионная связь. Металлическая связь	подготовка к устному опросу	6	
	Итого		72	

7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

Дескрипторы	Компетенции	Оценочные средства
ПК-1		
Знать	структуру, состав и дидактические единицы предметной области (преподаваемого предмета).	устный опрос
Уметь	отбирать учебное содержание для его реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО.	практическое задание
Владеть	различными формами учебных занятий, применяет методы, приемы и технологии обучения, в том числе информационные.	зачет

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Оценочные средства	Уровни сформированности компетенции			
	Компетентность несформирована	Базовый уровень компетентности	Достаточный уровень компетентности	Высокий уровень компетентности
устный опрос	Не раскрыт полностью ни один вопрос	Вопросы раскрыты с замечаниями, однако логика соблюдена	Вопросы раскрыты, но имелись несущественные замечания	Вопросы раскрыты полностью
практическое задание	Работа не выполнена	Работа выполнена позже установленного срока, при защите практической работы имелись существенные замечания	Работа выполнена, но при защите практической работы имелись несущественные замечания	Работа выполнена и защищена в срок
зачет	Не раскрыт полностью ни один теор. вопрос, практическое задание не выполнено или выполнено с грубыми ошибками	Теор. вопросы раскрыты с замечаниями, однако логика соблюдена. Практическое задание выполнено, но с замечаниями: намечен ход выполнения, однако не полностью раскрыты возможности выполнения	Теор. вопросы раскрыты. Практическое задание выполнено с несущественным и замечаниями	Теор. вопросы раскрыты. Практическое задание выполнено без замечаний

7.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

7.3.1. Примерные вопросы для устного опроса

- 1.Электронная плотность.
- 2.Порядок связи.
- 3.Описание свойств молекул методом МО.

4. Реакционная способность молекул.
5. Молекулярный ион водорода.
6. Молекула водорода.
7. Принцип максимального перекрытия.
8. Поверхности реакций и их свойства.
9. Квантовая теория химических реакций.
10. Траектории химических реакций.

7.3.2. Примерные практические задания

1. Укажите, какие утверждения являются правильными:

- а) каждый период включает элементы А- и Б-групп;
- б) d-элементы расположены между f-элементами (слева) и р-элементами (справа);
- в) нейтральные атомы элементов одной и той же А-группы имеют одинаковое число валентных электронов;
- г) атомы пр-элементов больших периодов имеют незаполненный (n-1)d-подуровень;
- д) число валентных электронов у атомов А- и Б-групп с одинаковым номером одно и то же;

2. Руководствуясь Периодической системой, укажите символ химического элемента, нейтральному атому которого отвечает следующая электронная формула:

- а) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ б) $1s^2 2s^2 2p^5$ в) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
- г) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$ д) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$ е) $1s^2 2s^2$

3. Даны координаты элемента в Периодической системе.

Координаты элемента – 3 период IVA группа; 5 период VIIA группа; 4 период VIIБ группа;

3 период VIA группа; 4 период IIA группа; 4 период VIIIA группа. Укажите число валентных подуровней (на которых есть хотя бы один электрон) и число электронов на этих подуровнях для нейтрального атома

4. Укажите квантовые числа (n, l, ml, ms) электрона, который является последним по порядку заполнения, и определите число неспаренных электронов в атоме химического элемента.

Координаты элемента – 3 период IVA группа; 5 период VIIA группа; 4 период VIIБ группа; 3 период VIA группа; 4 группа IIA группа; 4 период VIIIA группа.

5. Составьте электронную конфигурацию одноатомного иона с указанным зарядом (формальным или реальным). Определите общее число валентных электронов и число неспаренных электронов.

6. Чему равно число энергетических подуровней для данного энергетического уровня? Каким значением главного квантового числа характеризуется энергетический уровень, если он имеет 4 подуровня? Дайте их буквенное обозначение.

7. Напишите электронные и электронно-графические формулы атомов с порядковыми номерами 27, 83. Сколько свободных f-орбиталей в атомах этих элементов?

8. Квантовые числа для электронов внешнего энергетического уровня атома некоторого элемента имеют следующие значения: $n = 5$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = +1/2$. Сколько свободных d-орбиталей содержит атом данного элемента? Напишите электронную и электронно-графическую формулу данного атома.

9. Какое значение имеет:

а) орбитальное квантовое число для энергетических подуровней, емкость которых равна 10 и 14;

б) главное квантовое число для энергетических уровней, емкость которых равна 32, 50, 72?

10. Природный водород состоит из двух изотопов – протия и дейтерия с массовыми долями 99,98 % и 0,02 % соответственно. Вычислите атомную массу

7.3.3. Вопросы к зачету

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 самосогласованного поля.
18. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод констант экранирования.
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 элементов в ПС.
24. Относительная электроотрицательность. Закономерности изменения относительной электроотрицательности элементов в ПС.
25. Теория валентных связей (ВС). Основные положения метода ВС. Канонические и резонансные структуры.
26. Теория валентных связей (ВС). Перекрывание атомных орбиталей. Интеграл перекрывания.
27. Свойства химической связи по методу ВС. Насыщаемость. Понятие ковалентности.
28. Свойства химической связи по методу ВС. Направленность. Гибридизация
29. Теория валентных связей (ВС). Поляризуемость. Поляризирующее 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, BeH₂, BeF₂, H₂O, CO, CO₂, CH₄, CN⁻, BF₃).
37. Метод МО. Энергетические диаграммы электронодефицитных молекул
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 кристаллического 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.

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

7.4.1. Оценивание устного опроса

Критерий оценивания	Уровни формирования компетенций		
	Базовый	Достаточный	Высокий
Полнота и правильность ответа	Ответ полный, но есть замечания, не более 3	Ответ полный, последовательный, но есть замечания, не более 2	Ответ полный, последовательный, логичный
Степень осознанности, понимания изученного	Материал усвоен и излагается осознанно, но есть не более 3 несоответствий	Материал усвоен и излагается осознанно, но есть не более 2 несоответствий	Материал усвоен и излагается осознанно
Языковое оформление ответа	Речь, в целом, грамотная, соблюдены нормы культуры речи, но есть замечания, не более 4	Речь, в целом, грамотная, соблюдены нормы культуры речи, но есть замечания, не более 2	Речь грамотная, соблюдены нормы культуры речи

7.4.2. Оценивание практического задания

Критерий оценивания	Уровни формирования компетенций		
	Базовый	Достаточный	Высокий
Знание теоретического материала по предложенной проблеме	Теоретический материал усвоен	Теоретический материал усвоен и осмыслен	Теоретический материал усвоен и осмыслен, может быть применен в различных ситуациях по необходимости

Овладение приемами работы	Студент может применить имеющиеся знания для решения новой задачи, но необходима помощь преподавателя	Студент может самостоятельно применить имеющиеся знания для решения новой задачи, но возможно не более 2 замечаний	Студент может самостоятельно применить имеющиеся знания для решения новой задачи
Самостоятельность	Задание выполнено самостоятельно, но есть не более 3 замечаний	Задание выполнено самостоятельно, но есть не более 2 замечаний	Задание выполнено полностью самостоятельно

7.4.3. Оценивание зачета

Критерий оценивания	Уровни формирования компетенций		
	Базовый	Достаточный	Высокий
Полнота ответа, последовательность и логика изложения	Ответ полный, но есть замечания, не более 3	Ответ полный, последовательный, но есть замечания, не более 2	Ответ полный, последовательный, логичный
Правильность ответа, его соответствие рабочей программе учебной дисциплины	Ответ соответствует рабочей программе учебной дисциплины, но есть замечания, не более 3	Ответ соответствует рабочей программе учебной дисциплины, но есть замечания, не более 2	Ответ соответствует рабочей программе учебной дисциплины
Способность студента аргументировать свой ответ и приводить примеры	Ответ аргументирован, примеры приведены, но есть не более 3 несоответствий	Ответ аргументирован, примеры приведены, но есть не более 2 несоответствий	Ответ аргументирован, примеры приведены
Осознанность излагаемого материала	Материал усвоен и излагается осознанно, но есть не более 3 несоответствий	Материал усвоен и излагается осознанно, но есть не более 2 несоответствий	Материал усвоен и излагается осознанно
Соответствие нормам культуры речи	Речь, в целом, грамотная, соблюдены нормы культуры речи, но есть замечания, не более 4	Речь, в целом, грамотная, соблюдены нормы культуры речи, но есть замечания, не более 2	Речь грамотная, соблюдены нормы культуры речи
Качество ответов на вопросы	Есть замечания к ответам, не более 3	В целом, ответы раскрывают суть вопроса	На все вопросы получены исчерпывающие ответы

7.5. Итоговая рейтинговая оценка текущей и промежуточной аттестации студента по дисциплине

По учебной дисциплине «Основы квантовой химии» используется 4-балльная система оценивания, итог оценивания уровня знаний обучающихся предусматривает зачёт. Зачет выставляется во время последнего практического занятия при условии выполнения не менее 60% учебных поручений, предусмотренных учебным планом и РПД. Наличие невыполненных учебных поручений может быть основанием для дополнительных вопросов по дисциплине в ходе промежуточной аттестации. Во всех остальных случаях зачет сдается обучающимися в даты, назначенные преподавателем в период соответствующий промежуточной аттестации.

Шкала оценивания текущей и промежуточной аттестации студента

Уровни формирования компетенции	Оценка по четырехбалльной шкале
	для зачёта
Высокий	зачтено
Достаточный	
Базовый	
Компетенция не сформирована	не зачтено

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная литература.

№ п/п	Библиографическое описание	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-метод пособие, др.)	Кол-во в библ.
1.	Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 428 с. — ISBN 978-5-8114-3961-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/113631 (дата обращения: 24.09.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.	Учебные пособия	https://e.lanbook.com/book/113631 1

2.	Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2017. — 522 с. — ISBN 978-5-00101-502-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/94104 (дата обращения: 23.09.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.	Учебные пособия	https://e.lanbook.com/book/94104
3.	Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2017. — 522 с. — ISBN 978-5-00101-502-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/94104 (дата обращения: 23.09.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.	Учебные пособия	https://e.lanbook.com/book/94104
4.	Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 428 с. — ISBN 978-5-8114-3961-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/113631 (дата обращения: 24.09.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.	Учебные пособия	https://e.lanbook.com/book/113631
5.	Колесова, Е. П. Квантовая химия многоатомных систем : учебно-методическое пособие / Е. П. Колесова, В. Г. Маслов, А. О. Орлова. — Санкт-Петербург : НИУ ИТМО, 2021. — 70 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/283670 (дата обращения: 01.12.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.	учебно-методическое пособие	https://e.lanbook.com/book/283670

Дополнительная литература.

№ п/п	Библиографическое описание	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-метод. пособие, др.)	Кол-во в библ.
-------	----------------------------	---	----------------

1.	Шарки, К. Л. Квантовая химия и квантовые вычисления с примерами на Python / К. Л. Шарки, А. Чанс ; перевод с английского П. В. Михеева. — Москва: ДМК Пресс, 2023. — 282 с. — ISBN 978-5-93700-162-7. // Лань: электронно-библиотечная	учебное пособие	https://e.lanbook.com/book/34807 1
2.	Пахомов, И. И. Квантовая теория излучения. Взаимодействие излучения с веществом : учебное пособие / И. И. Пахомов, А. М. Хорохоров. — Москва : МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. — 34 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/52478 (дата обращения: 28.09.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.	Учебные пособия	https://e.lanbook.com/book/52478

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

- 1.Поисковые системы: <http://www.rambler.ru>, <http://yandex.ru>,
- 2.Федеральный образовательный портал www.edu.ru.
- 3.Российская государственная библиотека <http://www.rsl.ru/ru>
- 4.Государственная публичная научно-техническая библиотека России URL: <http://gpntb.ru>.
- 5.Государственное бюджетное учреждение культуры Республики Крым «Крымская республиканская универсальная научная библиотека»
- 6.Педагогическая библиотека <http://www.pedlib.ru/>
- 7.Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (РИНЦ)

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

Общие рекомендации по самостоятельной работе бакалавров

Подготовка современного бакалавра предполагает, что в стенах университета он овладеет методологией самообразования, самовоспитания, самосовершенствования. Это определяет важность активизации его самостоятельной работы.

Самостоятельная работа формирует творческую активность бакалавров, представление о своих научных и социальных возможностях, способность вычленять главное, совершенствует приемы обобщенного мышления, предполагает более глубокую проработку ими отдельных тем, определенных

Основными видами и формами самостоятельной работы студентов по данной дисциплине являются: самоподготовка по отдельным вопросам; работа с базовым конспектом; подготовка к устному опросу; подготовка к практическому занятию; подготовка к зачету.

Важной частью самостоятельной работы является чтение учебной литературы. Основная функция учебников – ориентировать в системе тех знаний, умений и навыков, которые должны быть усвоены по данной дисциплине будущими специалистами. Учебник также служит путеводителем по многочисленным произведениям, ориентируя в именах авторов, специализирующихся на определенных научных направлениях, в названиях их основных трудов. Вторая функция учебника в том, что он очерчивает некий круг обязательных знаний по предмету, не претендуя на глубокое их раскрытие.

Чтение рекомендованной литературы – это та главная часть системы самостоятельной учебы бакалавра, которая обеспечивает подлинное усвоение науки. Читать эту литературу нужно по принципу: «идея, теория, метод в одной, в другой и т.д. книгах».

Во всех случаях рекомендуется рассмотрение теоретических вопросов не менее чем по трем источникам. Изучение проблемы по разным источникам – залог глубокого усвоения науки. Именно этот блок, наряду с выполнением практических заданий является ведущим в структуре самостоятельной работы

Вниманию бакалавров предлагаются список литературы, вопросы к самостоятельному изучению и вопросы к зачету.

Для успешного овладения дисциплиной необходимо выполнять следующие требования:

- 1) выполнять все определенные программой виды работ;
- 2) посещать занятия, т.к. весь тематический материал взаимосвязан между собой и, зачастую, самостоятельного теоретического овладения пропущенным материалом недостаточно для качественного его усвоения;
- 3) все рассматриваемые на занятиях вопросы обязательно фиксировать в отдельную тетрадь и сохранять её до окончания обучения в вузе;
- 4) проявлять активность при подготовке и на занятиях, т.к. конечный результат овладения содержанием дисциплины необходим, в первую очередь, самому
- 5) в случаях пропуска занятий по каким-либо причинам обязательно отрабатывать пропущенное преподавателю во время индивидуальных

Внеурочная деятельность бакалавра по данной дисциплине предполагает:

- самостоятельный поиск ответов и необходимой информации по предложенным вопросам;
- выполнение практических заданий;
- выработку умений научной организации труда.

Успешная организация времени по усвоению данной дисциплины во многом зависит от наличия у бакалавра умения самоорганизовать себя и своё время для выполнения предложенных домашних заданий. Объём заданий рассчитан максимально на 2-3 часа в неделю. При этом алгоритм подготовки будет

- 1 этап – поиск в литературе теоретической информации по предложенным преподавателем вопросам;

- 2 этап – осмысление полученной информации, освоение терминов и понятий;

- 3 этап – составление плана ответа на каждый вопрос;

- 4 этап – поиск примеров по данной проблематике.

Работа с базовым конспектом

Программой дисциплины предусмотрено чтение лекций в различных формах их проведения: проблемные лекции с элементами эвристической беседы, информационные лекции, лекции с опорным конспектированием, лекции-

На лекциях преподаватель рассматривает вопросы программы курса, составленной в соответствии с государственным образовательным стандартом. Из-за недостаточного количества аудиторных часов некоторые темы не удастся осветить в полном объеме, поэтому преподаватель, по своему усмотрению, некоторые вопросы выносит на самостоятельную работу студентов, рекомендуя

Кроме этого, для лучшего освоения материала и систематизации знаний по дисциплине, необходимо постоянно разбирать материалы лекций по конспектам и учебным пособиям.

Во время самостоятельной проработки лекционного материала особое внимание следует уделять возникшим вопросам, непонятным терминам, спорным точкам зрения. Все такие моменты следует выделить или выписать отдельно для дальнейшего обсуждения на практическом занятии. В случае необходимости обращаться к преподавателю за консультацией. Полный список литературы по дисциплине приведен в рабочей программе дисциплины.

Подготовка к практическому занятию

Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям

Подготовка к практическому занятию включает следующие элементы самостоятельной деятельности: четкое представление цели и задач его проведения; выделение навыков умственной, аналитической, научной деятельности, которые станут результатом предстоящей работы.

Выработка навыков осуществляется с помощью получения новой информации об изучаемых процессах и с помощью знания о том, в какой степени в данное время студент владеет методами исследовательской деятельности, которыми он станет пользоваться на практическом занятии.

Следовательно, работа на практическом занятии направлена не только на познание студентом конкретных явлений внешнего мира, но и на изменение самого себя.

Второй результат очень важен, поскольку он обеспечивает формирование таких общекультурных компетенций, как способность к самоорганизации и самообразованию, способность использовать методы сбора, обработки и интерпретации комплексной информации для решения организационно-управленческих задач, в том числе находящихся за пределами непосредственной сферы деятельности студента. процессов и явлений, выделяют основные способы доказательства авторами научных работ ценности того, чем они занимаются.

В ходе самого практического занятия студенты сначала представляют найденные ими варианты формулировки актуальности исследования, обсуждают их и обосновывают свое мнение о наилучшем варианте.

Объём заданий рассчитан максимально на 1-2 часа в неделю.

Подготовка к устному опросу

С целью контроля и подготовки студентов к изучению новой темы вначале каждой практического занятия преподавателем проводится индивидуальный или фронтальный устный опрос по выполненным заданиям предыдущей темы.

Критерии оценки устных ответов студентов:

- правильность ответа по содержанию задания (учитывается количество и характер ошибок при ответе);
- полнота и глубина ответа (учитывается количество усвоенных фактов, понятий и т.п.);
- сознательность ответа (учитывается понимание излагаемого материала);
- логика изложения материала (учитывается умение строить целостный, последовательный рассказ, грамотно пользоваться специальной терминологией);
- рациональность использованных приемов и способов решения поставленной учебной задачи (учитывается умение использовать наиболее прогрессивные и эффективные способы достижения цели);
- своевременность и эффективность использования наглядных пособий и технических средств при ответе (учитывается грамотно и с пользой применять наглядность и демонстрационный опыт при устном ответе);
- использование дополнительного материала (обязательное условие);
- рациональность использования времени, отведенного на задание (не одобряется затянутость выполнения задания, устного ответа во времени, с учетом индивидуальных особенностей студентов).

Подготовка к зачету

Зачет является традиционной формой проверки знаний, умений, компетенций, сформированных у студентов в процессе освоения всего содержания изучаемой дисциплины. Обычный зачет отличается от экзамена только тем, что преподаватель не дифференцирует баллы, которые он выставляет по его итогам.

Самостоятельная подготовка к зачету должна осуществляться в течение всего семестра, а не за несколько дней до его проведения.

Подготовка включает следующие действия. Прежде всего нужно перечитать все лекции, а также материалы, которые готовились к семинарским и практическим занятиям в течение семестра. Затем надо соотнести эту информацию с вопросами, которые даны к зачету. Если информации недостаточно, ответы находят в предложенной преподавателем литературе. Рекомендуются делать краткие записи. Речь идет не о шпаргалке, а о формировании в сознании четкой логической схемы ответа на вопрос. Накануне зачета необходимо повторить ответы, не заглядывая в записи. Время на подготовку к зачету по нормативам университета составляет не менее 4 часов.

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости))

Информационные технологии применяются в следующих направлениях:
оформление письменных работ выполняется с использованием текстового
демонстрация компьютерных материалов с использованием мультимедийных технологий;

использование информационно-справочного обеспечения, такого как: правовые справочные системы (Консультант+ и др.), онлайн словари, справочники (Грамота.ру, Интуит.ру, Википедия и др.), научные публикации.

использование специализированных справочных систем (электронных учебников, справочников, коллекций иллюстраций и фотоизображений, фотобанков, профессиональных социальных сетей и др.).

OpenOffice Ссылка: <http://www.openoffice.org/ru/>

Mozilla Firefox Ссылка: <https://www.mozilla.org/ru/firefox/new/>

Libre Office Ссылка: <https://ru.libreoffice.org/>

Do PDF Ссылка: <http://www.dopdf.com/ru/>

7-zip Ссылка: <https://www.7-zip.org/>

Free Commander Ссылка: <https://freecommander.com/ru>

be Reader Ссылка: <https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader.html>попо

Gimp (графический редактор) Ссылка: <https://www.gimp.org/>

ImageMagick (графический редактор) Ссылка: <https://imagemagick.org/script/index.php>

VirtualBox Ссылка: <https://www.virtualbox.org/>

Adobe Reader Ссылка: <https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader.html>

Операционная система Windows 8.1 Лицензионная версия по договору №471\1 от 11.12.2014 г.

Электронно-библиотечная система Библиокомплектатор

Национальна электронная библиотека - федеральное государственное бюджетное учреждение «Российская государственная библиотека» (ФГБУ «РГБ»)

Редакция Базы данных «ПОЛПРЕД Справочники»

Электронно-библиотечная система «ЛАНЬ»

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

- компьютерный класс и доступ к сети Интернет (во время самостоятельной подготовки) (должен быть приложен график занятости компьютерного класса);
- проектор, совмещенный с ноутбуком для проведения лекционных занятий преподавателем и презентации студентами результатов работы
- раздаточный материал для проведения групповой работы;

13. Особенности организации обучения по дисциплине обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ)

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ОВЗ:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потерь данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества;
- создание возможности для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников – например, так, чтобы лица с нарушением слуха получали информацию визуально, с нарушением зрения – аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения

навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счет альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;

- применение дистанционных образовательных технологий для передачи чeskих занятий, выступления с докладами и защитой выполненных работ, проведение тренингов, организации коллективной работы;

- применение дистанционных образовательных технологий для организации текущего и промежуточного контроля;

- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ОВЗ форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи: зачет и экзамен, проводимый в письменной форме, – не более чем на 90 мин., проводимый в устной форме – не более чем на 20 мин., – продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы – не более чем на 15 мин.

14. Виды занятий, проводимых в форме практической подготовки

(не предусмотрено при изучении дисциплины)