Рабочая программа дисциплины (модуля) «Квантовая химия», включая оценочные материалы

1. Требования к результатам обучения по дисциплине (модулю)

1.1. Перечень компетенций, формируемых дисциплиной (модулем) в процессе освоения образовательной программы

Группа компетенций	Категория компетенций	Коды и содержание компетенций
Универсальные	-	-
Общепрофессиональные	-	ОПК-1. Способен использовать математические, естественнонаучные и инженерные знания для решения задач своей профессиональной деятельности
	-	ОПК-5. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности
Профессиональные	-	-

1.2. Компетенции и индикаторы их достижения, формируемых дисциплиной (модулем) в процессе освоения образовательной программы

Код компетенции	Код индикатора компетенции	Содержание индикатора компетенции
ОПК-1	ОПК-1.2	Демонстрирует знания о физических и химических явлениях и процессах, строении и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов, природе химической связи и механизмах химических реакций, процессов химической технологии и применяет при решении задач профессиональной деятельности основные законы и методы физики и химии
ОПК-5	ОПК-5.1	Применяет средства современных информационных технологий для поиска, хранения, обработки, анализа и представления информации

1.3. Результаты обучения по дисциплине (модулю)

Цель изучения дисциплины (модуля) – получение теоретических знаний о современных представлениях квантовой химии, знаний фундаментальных квантово-механических законов, лежащих в основе квантовой химии молекул, знаний о методах расчета пространственной и электронной структуры молекул, а также приобретение умений и навыков работы с комплексами квантово-химических программ для решения задач, стоящих перед теоретической и экспериментальной химической наукой, усвоение квантово-химической теории химических связей и механизмов химических реакций в веществе, освоение квантово-механической теории строения и эволюции вещества.

В результате изучения дисциплины (модуля) обучающийся должен

знать:

- основные современные методы квантовой химии (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности), приближения и допущения, использованных при разработке этих методов, ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры и химических реакций;
- физико-химические основы необходимые для решения профессиональных задач в области квантовой химии вещества;
- понятийный аппарат квантовой механики и его связь с системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии;

уметь:

- использовать физико-химические основы для решения типовых профессиональных задач по основным разделам квантовой химии;
- решать модельные задачи квантовой химии и анализировать их решения в терминах атомно-молекулярной структуры веществ;

- определять необходимую информацию для расчета электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов;

владеть:

- навыками решения типовых задач по основным разделам квантовой химии;
- формами и методами научного познания при формулировании и решении профессиональных задач в области квантовой химии;
- навыками квантово-химических расчетов физико-химических характеристик веществ;
- навыками квантово-химического моделирования химических реакций.

2. Объем, структура и содержание дисциплины (модуля)

2.1. Объем дисциплины (модуля)

Виды учебной работы	*Формы обучения*
	Очная
Общая трудоемкость: зачетные единицы/часы	4/144
Контактная работа:	72
Занятия лекционного типа	36
Занятия семинарского типа	36
Консультации	0
Промежуточная аттестация: экзамен	36
Самостоятельная работа (СР)	36

2.2. Темы (разделы) дисциплины (модуля) с указанием отведенного на них количества часов по формам образовательной деятельности

Очная форма обучения

№ п/п	Наименование тем (разделов)	Виды учебной работы (в часах)						
		Контактная работа						СР
		Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				
		Л	Иные	ПЗ	С	ЛР	Иные	
1.	Основные положения и методы квантовой химии	8	0	8	0	0	0	8
2.	Квантовая теория химической связи	10	0	10	0	0	0	10
3.	Прикладные задачи квантовой химии	10	0	10	0	0	0	10
4.	Современные квантовые концепции квантовой химии	8	0	8	0	0	0	8

Примечания:

Л – лекции, ПЗ – практические занятия, С – семинары, ЛР – лабораторные работы, СР – самостоятельная работа.

2.3. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) и видам работ

Содержание лекционного курса

№ п/п	Наименование тем (разделов)	Содержание лекционного курса
1.	Основные положения и методы квантовой химии	Предмет квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции в развитии квантовой химии. Уравнение Шрёдингера для атомов и молекул как композитов ядер и электронов. Спутывание электронного и ядерного движения. Разделение электронного и ядерного движения в адиабатическом приближении. Поверхность потенциальной энергии. Электронные, колебательные и вращательные состояния. Роль представлений о поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории химии.

		Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и её изменения при переходе от разделённых атомов к молекуле. Квантовая топология электронной плотности и «атомы в молекуле». Построение приближённых решений электронного уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока (самосогласованного поля). Орбитали и орбитальные энергии. Полная энергия квантово-химической частицы. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры. Метод конфигурационных взаимодействий. Метод функционала плотности. Электронное строение атомов. Электронные конфигурации и термы атомов. Сложение моментов для атомов. Правила Хунда. Электронное строение атомов и периодическая система элементов Д.И. Менделеева.
2.	Квантовая теория химической связи	Квантовая теория химической связи. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). АО Слейтеровского типа Гауссовские орбитали (ГО). Метод ССП МО ЛКАО. Симметрия и свойства молекул. Элементы операции симметрии каркаса ядер. Операции симметрии и классификация молекулярных орбиталей двухатаомных молекул. σ, π-орбитали. Связывающие и разрыхляющие орбитали.
3.	Прикладные задачи квантовой химии	Прикладные задачи квантовой химии. Полуэмпирические методы квантовой химии. Метод Хюккеля для π-электронных систем. Сопряжённые соединения, ароматичность Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах. Прикладные задачи квантовой химии. Двухатомные молекулы. Молекулярный ион и молекула водорода. Корреляционные диаграммы МО для двухатомных молекул. Прикладные задачи квантовой химии. Квантово-химическое описание элементарного акта химической реакции. Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности. Переходное состояние. Симметрия реагентов, переходного состояния и продуктов реакции. Качественный анализ возможных механизмов химических реакции на основе ППЭ. Корреляционные правила Вудворда-Хофмана при анализе возможных механизмов химических реакций. Теория граничных орбиталей Фукуи. Роль туннелирования в химических реакциях.
4.	Современные квантовые концепции квантовой химии	Связь концепций квантовой химии с современными направлениями химии: фемто-секундной химией, нанотехнологиями по атомной сборки материалов, созданием квантового компьютера и Бозе-Эйнштейновских конденсатов атомов и молекул.

Содержание занятий семинарского типа

№ п/п	Наименование тем (разделов)	Тип	Содержание занятий семинарского типа
1.	Основные положения и методы квантовой химии	ПЗ	Оператор Гамильтона для атомных и молекулярных систем на примерах: атом С, молекулы LiH, BeH2, и др.). Построение электронной волновой функции в виде определителя. Уравнения метода Хартри-Фока для простейших молекул, например, LiH. Молекулы H2+ и H2 Простейшие подходы к построению волновых функций и потенциальных кривых.

2.	Квантовая теория химической связи	ПЗ	Точечные группы симметрии. Неприводимые представления групп. Характеры представлений. Правила отбора для электронных переходов.
3.	Прикладные задачи квантовой химии	ПЗ	Метод Хюккеля, Простейшие примеры расчётов. Заряды на атомах, порядки связей. Граничные орбитали. Расчёт электронной структуры гетерогенных двухатомных молекул. Расчёт кинетических закономерностей химических систем методом молекулярной механики.
4.	Современные квантовые концепции квантовой химии	ПЗ	Современные квантовые концепции строения наноматералов. Теорема вириала, электростатическая теорема, метод функционала плотности.

Содержание самостоятельной работы

№ п/п	Наименование тем (разделов)	Содержание самостоятельной работы
1.	Основные положения и методы квантовой химии	Вибронные взаимодействия в молекулах. Основы метода матриц плотности. Редуцированные матрицы плотности. Применение методов ограниченного, неограниченного и расширенного метода Хартри-Фока. Основы метода функционала плотности. Оболочечная теория строения атомов и периодическая система элементов. Повторение материалов занятий лекционного типа. Подготовка к занятиям семинарского типа.
2.	Квантовая теория химической связи	Натуральные орбитали, локализованные орбитали. Метод обобщённых валентных связей (ОВС). Симметрия и классификация электронных орбиталей в кристаллах. Элементы зонной теории. Повторение материалов занятий лекционного типа. Подготовка к занятиям семинарского типа.
3.	Прикладные задачи квантовой химии	Полуэмпирические методы квантовой химии: методы пренебрежения дифференциальным перекрыванием. Расчёт электронной структуры гетерогенных двухатомных молекул. Расчёт кинетических закономерностей химических систем методом молекулярной механики. Повторение материалов занятий лекционного типа. Подготовка к занятиям семинарского типа.
4.	Современные квантовые концепции квантовой химии	Современные квантовые концепции строения наноматералов. Повторение материалов занятий лекционного типа. Подготовка к занятиям семинарского типа.

3. Оценочные материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

По дисциплине (модулю) предусмотрены следующие виды контроля качества освоения:

- текущий контроль успеваемости;
- промежуточная аттестация обучающихся по дисциплине (модулю).

3.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации по дисциплине (модулю)

№ п/п	Контролируемые темы (разделы)	Наименование оценочного средства
1.	Основные положения и методы квантовой химии	Устный опрос. Контрольная работа
2.	Квантовая теория химической связи	Устный опрос. Контрольная работа
3.	Прикладные задачи квантовой химии	Устный опрос. Контрольная работа
4.	Современные квантовые концепции квантовой химии	Устный опрос. Контрольная работа

3.1.1 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности в процессе текущего контроля успеваемости

Устный опрос

1. Основные принципы квантовой механики.
2. Эрмитовы операторы, их собственные векторы и собственные значения.

3. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии; сигма- и π-орбитали.
4. Уравнение Шредингера: временное и стационарное.
5. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей.
6. Приближения, используемые при решении уравнения Шредингера.
7. Одноэлектронное приближение. Принцип тождественности частиц и принцип Паули. Определитель Слейтера.
8. Метод Хартри-Фока. Фокиан, кулоновские и обменные операторы.
9. Приближение МО ЛКАО.
10. Понятие базисного набора; орбитали Слейтеровского и Гауссового типа. Молекулярные интегралы.
11. Способы учета электронной корреляции. Конфигурационное взаимодействие.
12. Общие положения теории возмущений. Теория возмущений Меллера-Плессе.
13. Теория функционала плотности (DFT).
14. Континуальные модели описания среды. Реактивное поле Онзагера.
15. Модель поляризуемого континуума.
16. Теория "Атомы в молекулах".
17. Понятие молекулярного графа.
18. Общие представления о полуэмпирических методах квантовой химии.
19. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (CNDO).
20. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: методы MNDO, AM1, PM3.
21. Выбор адекватного расчетного приближения для расчеты физических характеристик.
22. Расчеты магнитно-резонансных параметров.
23. Расчеты дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков.
24. Анализ заселенностей; расчет зарядов на атомах и порядков связей.
25. Моделирование химических реакций.
26. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции

Контрольный работа

1. Какова размерность матрицы Фока, которая будет использована в расчете типичных молекул (например, азотистых оснований ДНК) методом Хартри-Фока-Рутана с базисным набором 6 31+G(d)?
2. Сколько примитивных гауссианов содержит этот базисный набор для данной молекулы (принять, что в базисе используется 6 d-функций)?
3. Каов вид невозмущенного гамильтониана в рамках теории Меллера-Плессета?
4. Почему обсуждение теории возмущений Меллера-Плессета начинают со второго порядка (MP2)? Что представляет собой поправка первого порядка?
5. Что такое размерная согласованность методов? Являются ли методы truncated CI размерно согласованными?
6. В чем главные преимущества методов CC по сравнению с аналогами truncated CI?
7. В чем состоит суть подхода Кона-Шэма? Чему соответствуют орбитали Кона-Шэма?
8. В чем суть методов LDA, GGA, что такое гибридные функционалы DFT?

3.1.2. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности в ходе текущего контроля успеваемости

Устный ответ

Оценка знаний предполагает дифференцированный подход к обучающемуся, учет его индивидуальных способностей, степень усвоения и систематизации основных понятий и категорий по дисциплине. Кроме того, оценивается не только глубина знаний поставленных вопросов, но и умение использовать в ответе практический материал. Оценивается культура речи, владение навыками ораторского искусства.

Критерии оценивания: последовательность, полнота, логичность изложения, анализ различных точек зрения, самостоятельное обобщение материала, использование профессиональных терминов, культура речи, навыки ораторского искусства. Изложение материала без фактических ошибок.

Оценка *«отлично»* ставится в случае, когда материал излагается исчерпывающе, последовательно, грамотно и логически стройно, при этом раскрываются не только основные понятия, но и анализируются точки зрения различных авторов. Обучающийся не затрудняется с ответом, соблюдает культуру речи.

Оценка *«хорошо»* ставится, если обучающийся твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, знает практическую базу, но при ответе на вопрос допускает несущественные погрешности.

Оценка *«удовлетворительно»* ставится, если обучающийся освоил только основной материал, но не знает отдельных деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушает последовательность в изложении материала, затрудняется с ответами, показывает отсутствие должной связи между анализом, аргументацией и выводами.

Оценка *«неудовлетворительно»* ставится, если обучающийся не отвечает на поставленные вопросы.

Кейсы (ситуации и задачи с заданными условиями)

Обучающийся должен уметь выделить основные положения из текста задачи, которые требуют анализа и служат условиями решения. Исходя из поставленного вопроса в задаче, попытаться максимально точно определить проблему и соответственно решить ее.

Задачи могут решаться устно и/или письменно. При решении задач также важно правильно сформулировать и записать вопросы, начиная с более общих и, кончая частными.

Критерии оценивания – оценка учитывает методы и средства, использованные при решении ситуационной, проблемной задачи.

Оценка *«отлично»* ставится в случае, когда обучающийся выполнил задание (решил задачу), используя в полном объеме теоретические знания и практические навыки, полученные в процессе обучения.

Оценка *«хорошо»* ставится, если обучающийся в целом выполнил все требования, но не совсем четко определяется опора на теоретические положения, изложенные в научной литературе по данному вопросу.

Оценка *«удовлетворительно»* ставится, если обучающийся показал положительные результаты в процессе решения задачи.

Оценка *«неудовлетворительно»* ставится, если обучающийся не выполнил все требования.

Информационный проект (доклад с презентацией)

Информационный проект – проект, направленный на стимулирование учебно-познавательной деятельности студента с выраженной эвристической направленностью (поиск, отбор и систематизация информации об объекте, оформление ее для презентации).

Информационный проект отличается от исследовательского проекта, поскольку представляет собой такую форму учебно-познавательной деятельности, которая отличается ярко выраженной эвристической направленностью.

Критерии оценивания - при выставлении оценки учитывается самостоятельный поиск, отбор и систематизация информации, раскрытие вопроса (проблемы), ознакомление студенческой аудитории с этой информацией (представление информации), ее анализ и обобщение, оформление, полные ответы на вопросы аудитории с примерами.

Оценка *«отлично»* ставится в случае, когда обучающийся полностью раскрывает вопрос (проблему), представляет информацию систематизировано, последовательно, логично, взаимосвязано, использует более 5 профессиональных терминов, широко использует информационные технологии, ошибки в информации отсутствуют, дает полные

ответы на вопросы аудитории с примерами.

Оценка *«хорошо»* ставится, если обучающийся раскрывает вопрос (проблему), представляет информацию систематизировано, последовательно, логично, взаимосвязано, использует более 2 профессиональных терминов, достаточно использует информационные технологии, допускает не более 2 ошибок в изложении материала, дает полные или частично полные ответы на вопросы аудитории.

Оценка *«удовлетворительно»* ставится, если обучающийся, раскрывает вопрос (проблему) не полностью, представляет информацию не систематизировано и не совсем последовательно, использует 1-2 профессиональных термина, использует информационные технологии, допускает 3-4 ошибки в изложении материала, отвечает только на элементарные вопросы аудитории без пояснений.

Оценка *«неудовлетворительно»* ставится, если вопрос не раскрыт, представленная информация логически не связана, не используются профессиональные термины, допускает более 4 ошибок в изложении материала, не отвечает на вопросы аудитории.

Контрольная работа

Оценивается не только глубина знаний поставленных вопросов, но и умение изложить письменно.

Критерии оценивания: последовательность, полнота, логичность изложения, анализ различных точек зрения, самостоятельное обобщение материала. Изложение материала без фактических ошибок.

Оценка *«отлично»* ставится в случае, когда соблюдены все критерии.

Оценка *«хорошо»* ставится, если обучающийся твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, знает практическую базу, но допускает несущественные погрешности.

Оценка *«удовлетворительно»* ставится, если обучающийся освоил только основной материал, но не знает отдельных деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушает последовательность в изложении материала, затрудняется с ответами, показывает отсутствие должной связи между анализом, аргументацией и выводами.

Оценка *«неудовлетворительно»* ставится, если обучающийся не отвечает на поставленные вопросы.

3.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

3.2.1. Критерии оценки результатов обучения по дисциплине (модулю)

Шкала оценивания	Результаты обучения	Показатели оценивания результатов обучения
ОТЛИЧНО	Знает:	- обучающийся глубоко и всесторонне усвоил материал, уверенно, логично, последовательно и грамотно его излагает, опираясь на знания основной и дополнительной литературы, - на основе системных научных знаний делает квалифицированные выводы и обобщения, свободно оперирует категориями и понятиями.
	Умеет:	- обучающийся умеет самостоятельно и правильно решать учебно-профессиональные задачи или задания, уверенно, логично, последовательно и аргументировано излагать свое решение, используя научные понятия, ссылаясь на нормативную базу.
	Владеет:	- обучающийся владеет рациональными методами (с использованием рациональных методик) решения сложных профессиональных задач, представленных деловыми играми, кейсами и т.д.; При решении продемонстрировал навыки - выделения главного, - связкой теоретических положений с требованиями руководящих документов, - изложения мыслей в логической последовательности, - самостоятельного анализа факты, событий, явлений, процессов в их взаимосвязи и диалектическом развитии.
ХОРОШО	Знает:	- обучающийся твердо усвоил материал, достаточно грамотно его излагает, опираясь на знания основной и дополнительной литературы,

		- затрудняется в формулировании квалифицированных выводов и обобщений, оперирует категориями и понятиями, но не всегда правильно их верифицирует.
	Умеет:	- обучающийся умеет самостоятельно и в основном правильно решать учебно-профессиональные задачи или задания, уверенно, логично, последовательно и аргументировано излагать свое решение, не в полной мере используя научные понятия и ссылки на нормативную базу.
	Владеет:	- обучающийся в целом владеет рациональными методами решения сложных профессиональных задач, представленных деловыми играми, кейсами и т.д.; При решении смог продемонстрировать достаточность, но не глубинность навыков, - выделения главного, - изложения мыслей в логической последовательности, - связки теоретических положений с требованиями руководящих документов, - самостоятельного анализа факты, событий, явлений, процессов в их взаимосвязи и диалектическом развитии.
УДОВЛЕТВО-РИТЕЛЬНО	Знает:	- обучающийся ориентируется в материале, однако затрудняется в его изложении; - показывает недостаточность знаний основной и дополнительной литературы; - слабо аргументирует научные положения; - практически не способен сформулировать выводы и обобщения; - частично владеет системой понятий.
	Умеет:	- обучающийся в основном умеет решить учебно-профессиональную задачу или задание, но допускает ошибки, слабо аргументирует свое решение, недостаточно использует научные понятия и руководящие документы.
	Владеет:	- обучающийся владеет некоторыми рациональными методами решения сложных профессиональных задач, представленных деловыми играми, кейсами и т.д.; При решении продемонстрировал недостаточность навыков - выделения главного, - изложения мыслей в логической последовательности, - связки теоретических положений с требованиями руководящих документов, - самостоятельного анализа факты, событий, явлений, процессов в их взаимосвязи и диалектическом развитии.
НЕУДОВЛЕТВО-РИТЕЛЬНО	Знает:	- обучающийся не усвоил значительной части материала; - не может аргументировать научные положения; - не формулирует квалифицированных выводов и обобщений; - не владеет системой понятий.
	Умеет:	обучающийся не показал умение решать учебно-профессиональную задачу или задание.
	Владеет:	не выполнены требования, предъявляемые к навыкам, оцениваемым «удовлетворительно».

3.2.2. Контрольные задания и/или иные материалы для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов для устных ответов (варианты теста)

1. Молекулы H_2+ и H_2 Простейшие подходы к построению волновых функций и потенциальных кривых.
2. Точечные группы симметрии молекул.
3. Спин элементарных квантовых частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина. Полный угловой момент. Спин-орбитальное взаимодействие. Проявление спина в перестановочной симметрии волновой функции систем тождественных частиц. Фермионы. Определитель Слэтера.
4. Уравнение Шрёдингера для атомов и молекул как систем ядер и электронов. Спутывание электронного и ядерного движения. Разделение электронного и

ядерного движения в адиабатическом приближении.

5. Поверхность потенциальной энергии. Электронные, колебательные и вращательные состояния. Роль представлений о поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории химии. Равновесные конфигурации и конформации молекул. Малые колебания ядер вблизи положения равновесия.
6. Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и её изменения при переходе от разделённых атомов к молекуле. Квантовая топология электронной плотности и «атомы в молекуле».
7. Оператор Гамильтона для атомных и молекулярныых систем на примерах: атом С, молекулы LiH, BeH_2, и др.). Построение электронной волновой функции в виде определителя.
8. Построение приближённых решений электронного уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока (самосогласованного поля). Орбитали и орбитальные энергии.
9. Уравнения метода Хартри-Фока для простейших молекул, например, LiH.
10. Неприводимые представления групп. Характеры представлений. Правила отбора для электронных переходов.
11. Полная энергия квантово-химической частицы. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры. Метод конфигурационных взаимодействий. Метод функционала плотности.
12. Электронное строение атомов. Электронные конфигурации и термы атомов. Сложение моментов для атомов. Правила Хунда. Электронное строение атомов и периодическая система элементов Д.И. Менделеева.
13. Квантовая теория химической связи. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). АО Слейтеровского типа Гауссовские орбитали (ГО). Метод ССП МО ЛКАО.
14. Симметрия и свойства молекул. Элементы операции симметрии каркаса ядер. Операции симметрии и классификация молекулярных орбиталей двухатаомных молекул. σ, π- орбитали. Связывающие и разрыхляющие орбитали.
15. Прикладные задачи квантовой химии. Полуэмпирические методы квантовой химии. Метод Хюккеля для π-электронных систем. Сопряжённые соединения, ароматичность Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах.
16. Метод Хюккеля, Простейшие примеры расчётов. Заряды на атомах, порядки связей. Граничные орбитали.1. Молекулы этилена, аллильного радикала и бензола.
17. Прикладные задачи квантовой химии. Двухатомные молекулы. Молекулярный ион и молекула водоррода. Корреляционные диаграммы МО для двухатомных молекул.
18. Прикладные задачи квантовой химии. Квантово-химическое описание элементарного акта химической реакции. Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности. Переходное состояние. Симметрия реагентов, переходного состояния и продуктов реакции.
19. Качественный анализ возможных механизмов химических реакции на основе ППЭ. Корреляционные правила Вудворда-Хофмана при анализе возможных механизмов химических реакций. Теория граничных орбиталей Фукуи. Рольтуннелирования в химических реакциях.
20. Заключение. Связь концепций квантовой химии с современными направлениями химии: фемто-секундной химией, нанотехнологиями поатомной сборки материалов, созданием квантового компьютера и Бозе-Эйнштейновских конденсатов атомов и молекул.
21. Задание на оператор Гамильтона для атомных и молекулярных систем на примерах: атом С, молекулы LiH, BeH2, и др.).
22. Задание на построение электронной волновой функции в виде определителя

23. Задание на уравнения метода Хартри-Фока для простейших молекул, например, LiH.
24. Задание на построению волновых функций и потенциальных кривых молекулы H2+ и H2
25. Задание на точечные группы симметрии. Неприводимые представления групп. Характеры представлений. Правила отбора для электронных переходов.
26. Задание на метод Хюккеля, Простейшие примеры расчётов. Заряды на атомах, порядки связей. Граничные орбитали.
27. Задание на теорему вириала, электростатическая теорема, метод функционала плотности

3.2.3. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков в ходе промежуточной аттестации

Процедура оценивания знаний (тест)

Предлагаемое количество заданий	20
Последовательность выборки	Определена по разделам
Критерии оценки	- правильный ответ на вопрос
«5» если	правильно выполнено 90-100% тестовых заданий
«4» если	правильно выполнено 70-89% тестовых заданий
«3» если	правильно выполнено 50-69% тестовых заданий

Процедура оценивания знаний (устный ответ)

Предел длительности	10 минут
Предлагаемое количество заданий	2 вопроса
Последовательность выборки вопросов из каждого раздела	Случайная
Критерии оценки	- требуемый объем и структура - изложение материала без фактических ошибок - логика изложения - использование соответствующей терминологии - стиль речи и культура речи - подбор примеров их научной литературы и практики
«5» если	требования к ответу выполнены в полном объеме
«4» если	в целом выполнены требования к ответу, однако есть небольшие неточности в изложении некоторых вопросов
«3» если	требования выполнены частично – не выдержан объем, есть фактические ошибки, нарушена логика изложения, недостаточно используется соответствующая терминологии

Процедура оценивания умений и навыков (решение проблемно-аналитических и практических учебно-профессиональных задач)

Предлагаемое количество заданий	1
Последовательность выборки	Случайная
Критерии оценки:	- выделение и понимание проблемы - умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения - полнота использования источников - наличие авторской позиции - соответствие ответа поставленному вопросу - использование социального опыта, материалов СМИ, статистических данных - логичность изложения - умение сделать квалифицированные выводы и обобщения с точки зрения решения профессиональных задач - умение привести пример - опора на теоретические положения - владение соответствующей терминологией
«5» если	требования к ответу выполнены в полном объеме
«4» если	в целом выполнены требования к ответу, однако есть небольшие неточности в изложении некоторых вопросов. Затрудняется в формулировании квалифицированных выводов и обобщений
«3» если	требования выполнены частично – пытается обосновать свою точку зрения, однако слабо аргументирует научные

	положения, практически не способен самостоятельно сформулировать выводы и обобщения, не видит связь с профессиональной деятельностью

4. Учебно-методическое и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

4.1. Электронные учебные издания

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 428 с. — ISBN 978-5-8114-3961-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/206195. — Режим доступа: для авториз. пользователей.
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. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/513798.
3. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 522 с. — ISBN 978-5-93208-518-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/172254. — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4.2. Электронные образовательные ресурсы

1. Электронная библиотечная система «ЭБС ЮРАЙТ» Biblio-online.ru (ЭБС «Юрайт») [Электронный ресурс]. – URL: https://urait.ru/.
2. Электронно-библиотечная система ZNANIUM [Электронный ресурс]. – URL: https://znanium.com/.
3. Электронная библиотечная система «Консультант студента» [Электронный ресурс]. – URL: https://www.studentlibrary.ru/.
4. e-Library.ru: Научная электронная библиотека [Электронный ресурс]. – URL: http://elibrary.ru/.
5. Научная электронная библиотека «КиберЛенинка» [Электронный ресурс]. – URL: http://cyberleninka.ru/.
6. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. – URL: http://window.edu.ru/.
7. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов [Электронный ресурс]. – URL: http://fcior.edu.ru/.

4.3. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Обучающимся обеспечен доступ (удаленный доступ) к ниже следующим современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам:

1. Словари и энциклопедии на Академике [Электронный ресурс]. – URL: http://dic.academic.ru.
2. Система информационно-правового обеспечения «Гарант» [Электронный ресурс]. – URL: http://ivo.garant.ru/.

4.4. Комплект лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства

1. Лицензионное программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных приложений Microsoft Office.
2. Свободно распространяемое программное обеспечение: свободные пакеты офисных приложений Apache Open Office, LibreOffice.
3. Программное обеспечение отечественного производства: справочно-правовая система «Гарант» (Электронный периодический справочник «Система ГАРАНТ»), образовательная платформа ЮРАЙТ (Электронная библиотечная система «ЭБС

ЮРАЙТ» Biblio-online.ru (ЭБС «Юрайт»)), электронно-библиотечная система ZNANIUM, электронная библиотечная система «Консультант студента».

4.5. Оборудование и технические средства обучения

Для реализации дисциплины (модуля) используются учебные аудитории для проведения учебных занятий, которые оснащены оборудованием и техническими средствами обучения, и помещения для самостоятельной работы обучающихся, которые оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду РХТУ им. Д.И. Менделеева. Допускается замена оборудования его виртуальными аналогами.

Наименование учебных аудиторий для проведения учебных занятий и помещений для самостоятельной работы*	**Оснащенность учебных аудиторий для проведения учебных занятий и помещений для самостоятельной работы оборудованием и техническими средствами обучения**
Учебные аудитории для проведения учебных занятий	Учебная аудитория укомплектована специализированной мебелью, отвечающей всем установленным нормам и требованиям, оборудованием и техническими средствами обучения (мобильное мультимедийное оборудование).
Помещение для самостоятельной работы	Помещение оснащено компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду РХТУ им. Д.И. Менделеева и к ЭБС.

* Номер конкретной аудитории указан в приказе об аудиторном фонде, расписании учебных занятий и расписании промежуточной аттестации.