



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«КАРАЧАЕВО-ЧЕРКЕССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ У.Д. АЛИЕВА»**

Естественно-географический факультет
Кафедра биологии и химии



УТВЕРЖДАЮ
ЕГФ  А.У. Эдиев
 2023 г.

Рабочая программа дисциплины

Строение молекул и основы квантовой химии
(наименование дисциплины (модуля))

Направление подготовки
**44.03.05 Педагогическое образование (с двумя
профилями подготовки)**
(шифр, название направления)

Направленность (профиль) подготовки
Биология; химия

Квалификация выпускника
бакалавр

Форма обучения
Очная, заочная

Год начала подготовки –2019

Составитель: к.х.н., доц. Оразова Н.А.

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки), утвержденным приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 22.02.2018 №125, основной профессиональной образовательной программой высшего образования по направлению подготовки 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки); профиль – Биология; химия; ОПОП, локальными актами КЧГУ.

Рабочая программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры биологии и химии на 2023-2024 уч. год

Протокол № 9 от 20.06.2023 г.

Зав. кафедрой



к.б.н., доц. Узденов У.Б.

Содержание

1. Наименование дисциплины.....	4
2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы	5
4. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся	6
5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий	7
5.1. <u>Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)</u>	7
5.2. <i>Тематика лабораторных занятий</i>	11
6. Образовательные технологии.....	11
7.1. <i>Описание шкал оценивания степени сформированности компетенций</i>	13
7.2. <i>Типовые контрольные задания или иные учебно-методические материалы, необходимые для оценивания степени сформированности компетенций в процессе освоения учебной дисциплины</i>	15
7.2.1. <i>Типовые темы к письменным работам, докладам и выступлениям</i>	15
7.2.2. <i>Примерные вопросы к промежуточной и итоговой аттестации (зачет)</i>	17
<i>Примерные вопросы к экзамену</i>	17
<i>Примерные тестовые задания по дисциплине «Физическая химия»</i>	19
7.2.4. <i>Бально-рейтинговая система оценки знаний бакалавров</i>	23
8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины. Информационное обеспечение образовательного процесса	24
8.1. <i>Основная литература:</i>	24
8.2. <i>Дополнительная литература:</i>	24
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)	24
10. Требования к условиям реализации рабочей программы дисциплины (модуля)	26
10.1. <i>Общесистемные требования</i>	26
10.2. <i>Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины</i>	26
10.3. <i>Необходимый комплект лицензионного программного обеспечения</i>	26
10.4. <i>Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы</i>	27
11. Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья.....	27
12. Лист регистрации изменений.....	29

1. Наименование дисциплины Строение молекул и основы квантовой химии

Цель освоения дисциплины

Целью дисциплины является формирование знаний основ современной теоретической химии, ознакомление с квантово-химическими методами описания геометрического строения и

электронной структуры химических соединений

Для достижения цели ставятся задачи:

- Сформировать у студентов представление о месте квантовой химии среди других наук, о значении и областях использования вычислительных методов теоретической химии.
- Сформировать у студентов представление о фундаментальных понятиях молекулярной спектроскопии и строении молекул
- Ознакомить студентов с математическим аппаратом квантовой химии
- Сформировать практические навыки работы с современными квантово-химическими программами на персональном компьютере
- Сформировать умение и навыки применять полученные теоретические знания при интерпретации расчетных электронных и спектральных характеристик многоатомных молекул.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения ОПОП бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине: ПК-5, ПК-7

Код компетенций	Содержание компетенции в соответствии с ФГОС ВО/ ПООП/ ООП	Индикаторы достижения компетенций	Декомпозиция компетенций (результаты обучения) в соответствии с установленными индикаторами
ПК-5	Способен участвовать в разработке основных и дополнительных образовательных программ, разрабатывать отдельные их компоненты (в том числе с использованием информационно-коммуникационных технологий)	ПК-5.1. Знает закономерности, принципы и уровни формирования и реализации содержания химического образования; структуру, состав и дидактические единицы содержания школьного курса химии	Знать: методологические и методические основы современного химического образования. Уметь: анализировать примерные (типовые) программы (при наличии), оценивать и выбирать учебники, учебные и учебно-методические пособия, электронные образовательные ресурсы и иные материалы, разрабатывать и обновлять рабочие программы, планы занятий и другие методические материалы по химии. Владеть: приемами постановки учебно-воспитательных задач изучаемого материала в соответствии с индивидуальными возможностями ученика, в том числе особых образовательных потребностей обучающихся.
		ПК-5.2. Осуществляет отбор учебного содержания для реализации в различных формах обучения химии в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями	Знать: принципы целеполагания, планирования, анализа учебно-познавательной деятельности по биологии. Уметь: ставить цель и переводить ее в учебную задачу на конкретном возрасте, с учетом индивидуальных особенностей, в том числе

		стями учащихся	особых образовательных потребностей обучающихся. Владеть: приемами постановки учебно-воспитательных задач изучаемого материала в соответствии с индивидуальными возможностями ученика, в том числе особых образовательных потребностей обучающихся.
		ПК-5.3. Владеет предметным содержанием химии, применяет современные расчетные методы для исследования химических веществ и реакций.	Знать: теорию строения веществ, современные расчетные методы для исследования химических веществ и реакций Уметь: определять строение молекулы по характерным свойствам атомов, входящих в ее состав. Владеть: навыками составления электронно-графических формул.
ПК-7	Способен применять предметные знания при реализации образовательного процесса	ПК-7.1. Применяет теоретические и практические знания для решения исследовательских задач в предметной области и области образования	Знать: теоретические и практические знания для решения исследовательских задач в предметной области и области образования. Уметь: использовать теоретические знания для решения прикладных задач и адаптировать к условиям конкретного образовательного процесса с учетом последних достижений науки. Владеть: приемами решения исследовательских задач в предметной области и области образования
		ПК-7.2. Формирует междисциплинарные связи в области физики, математики и химии на основе интеграции научно-исследовательской и методической деятельности	Знать: междисциплинарные связи в области физики, математики и химии на основе интеграции научно-исследовательской и методической деятельности. Уметь: использовать междисциплинарные связи в области биологии и химии на основе интеграции научно-исследовательской и методической деятельности Владеть: приемами использования интегрированного обучения в учебном процессе
		ПК-7.3. Осуществляет постановку химического эксперимента, анализ и оценку результатов лабораторных исследований для решения научных и профессиональных задач	Знать: основные положения квантовой механики, основы современной теории химического строения молекул, виды химической связи, строение многоатомных молекул Уметь: строить энергетические диаграммы МО ЛКАО и модели электронного строения атомов и молекул, решать модельные задачи квантовой химии Владеть: навыками по определению гибридизации орбиталей химических веществ

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина (модуль) "Строение молекул и основы квантовой химии" входит в состав части учебного плана, формируемой участниками образовательных Б1. В.11 Дисциплина изучается на 4 курсе 8 семестре.

МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП	
Индекс	<i>Б1.В.11</i>

Требования к предварительной подготовке обучающегося:
Для успешного освоения дисциплины студент должен иметь базовую подготовку по химии в объёме программы средней школы, основы неорганической и органической химии.
Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
Объём и содержание дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» должны служить основой для дальнейшего изучения студентами других химических дисциплин (прикладной химии, методики обучения химии), чётко коррелировать со смежными дисциплинами путем установления межпредметных связей, способствовать усвоению и глубокому пониманию физико-химической сущности химических наук.

4. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины (модуля) составляет 3 з.е., 108 академических часов.

Объём дисциплины	Всего часов	
	для очной формы обучения	для заочной формы обучения
Общая трудоемкость дисциплины	108	108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)		
Аудиторная работа (всего):	32	4
в том числе:		
лекции	16	2
семинары, практические занятия	16	2
практикумы		
лабораторные работы		
Внеаудиторная работа:		
В том числе, индивидуальная работа обучающихся с преподавателем:		
Курсовая работа		
Консультация перед экзаменом		
Контроль		8
Контроль в период сессии		
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	96	96
Вид промежуточной аттестации обучающегося (зачет / экзамен)	Экзамен	экзамен

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

5.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий академических часов)

(в

Для очной формы обучения

№ п/п	Раздел дисциплины	Общая трудоемкость (в часах) всего	Аудиторные уч. занятия			Сам.	Планируемые результаты обучения	Формы текущего контроля
			Лек	Пр.	Лаб			
	Раздел 1. Введение. Основные постулаты квантовой механики	62	10	10		42		
1	Тема: Исторический экскурс и основные понятия квантовой химии. Строение атома. Квантово-механическая модель атома. Строение атомных ядер. Основные положения квантовой механики..	12	2	2		8	ПК-5, ПК-7	Блиц опрос, выполнение упражнений
2	Тема: Волновые свойства электрона. Двойственная природа света. Корпускулярно-волновая природа света. Волновые свойства света и их характеристики. Понятие о стационарном уравнении Шредингера. Контрольная работа 1	12	2	2		8	ПК-5, ПК-7	Тест Творческое задание Решение задач
3	Тема: Радиоактивный распад ядер. Ядерные реакции и превращения химических элементов. Свойства изолированных атомов	12	2	2		8	ПК-5, ПК-7	Доклад с презентацией, решение задач

4	Тема: Понятие оператора и основные определения Принципы сопоставления физической величины и ее линейного эрмитовского оператора Простейшие операторы квантовой механики (постулаты)	12	2	2		8	ПК-5, ПК-7	Дискуссия Творческое задание
5	Тема: История развития представлений о строении атома. Квантовая модель атома Н. Бора. Построение оператора Гамильтона Н. Уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Контрольная работа 2	14	2	2		10	ПК-5, ПК-7	Круглый стол
	Раздел 2. Теории химической связи – метод валентных связей (ВС) и метод молекулярных орбиталей	42	6	6		30		
6	Тема: Основные идеи метода молекулярных орбиталей МО ЛКАО. Одноэлектронное приближение, понятие молекулярной орбитали. Гибридизация АО и геометрия молекул	14	2	2		10	ПК-5, ПК-7	Мозговой штурм Блиц опрос Дискуссия
7	Тема: Метод молекулярных орбиталей. Энергетические диаграммы и электронные формулы молекул. Расчет средней энергии связи Контрольная работа 3.	14	2	2		10	ПК-5, ПК-7	Доклад с презентацией, решение задач

8	Тема: Классификация химических связей по механизму их образования и по способу перекрывания валентных АО. Кратность связи. Контрольная работа 4.	14	2	2		10	ПК-5, ПК-7	Доклад с презентацией, решение задач
Итого		108	16	16		76		

Для заочной формы обучения

№ п/п	Раздел дисциплины	Общая трудоемкость (в часах) всего	Аудиторные уч. занятия		Контр	Сам.	Планируемые результаты обучения	Формы текущего контроля
			Лек	Пр.				
	Раздел 1. Введение. Основные постулаты квантовой механики	68	2	2	4	60		
1	Тема: Исторический экскурс и основные понятия квантовой химии. Строение атома. Квантово-механическая модель атома. Строение атомных ядер. Основные положения квантовой механики.	14	2			12	ПК-5, ПК-7	Блиц-опрос, Мозговой штурм, Дискуссия
2	Тема: Волновые свойства электрона. Двойственная природа света. Корпускулярно-волновая природа света. Волновые свойства света и их характеристики. Понятие о стационарном уравнении Шредингера. Контрольная работа 1	16		2	2	12	ПК-5, ПК-7	Доклад с презентацией, Обсуждение в группах Решение задач
3	Тема: Радиоактивный распад ядер.	12				12	ПК-5, ПК-7	Творческое за-

	Ядерные реакции и превращения химических элементов. Свойства изолированных атомов							дание
4	Тема: Понятие оператора и основные определения Принципы сопоставления физической величины и ее линейного эрмитовского оператора Простейшие операторы квантовой механики (постулаты)	12				12	ПК-5, ПК-7	Творческое задание
5	Тема: История развития представлений о строении атома. Квантовая модель атома Н. Бора. Построение оператора Гамильтона Н. Уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Контрольная работа 2	14			2	12	ПК-5, ПК-7	Творческое задание
	Раздел 2. Теории химической связи – метод валентных связей (ВС) и метод молекулярных орбиталей	40			4	36		
6	Тема: Основные идеи метода молекулярных орбиталей МО ЛКАО. Одноэлектронное приближение, понятие молекулярной орбитали. Гибридизация АО и геометрия молекул	12				12	ПК-5, ПК-7	Творческое задание

7	Тема: Метод молекулярных орбиталей. Энергетические диаграммы и электронные формулы молекул. Расчет средней энергии связи Контрольная работа 3.	14			2	12	ПК-5, ПК-7	Творческое задание
8	Тема: Классификация химических связей по механизму их образования и по способу перекрывания валентных АО. Кратность связи. Контрольная работа 4.	14			2	12	ПК-5, ПК-7	
Итого		108	2	2	8	96		

5.2. Тематика лабораторных занятий

Лабораторные работы не предусмотрены учебным планом

5.3. Примерная тематика курсовых работ

Учебным планом не предусмотрены

6. Образовательные технологии

При проведении учебных занятий по дисциплине используются традиционные и инновационные, в том числе информационные образовательные технологии, включая при необходимости применение активных и интерактивных методов обучения.

Традиционные образовательные технологии реализуются, преимущественно, в процессе лекционных и практических (семинарских, лабораторных) занятий. Инновационные образовательные технологии используются в процессе аудиторных занятий и самостоятельной работы студентов в виде применения активных и интерактивных методов обучения.

Информационные образовательные технологии реализуются в процессе использования электронно-библиотечных систем, электронных образовательных ресурсов и элементов электронного обучения в электронной информационно-образовательной среде для активизации учебного процесса и самостоятельной работы студентов.

Развитие у обучающихся навыков командной работы, межличностной коммуникации, принятия решений и лидерских качеств при проведении учебных занятий.

Практические (семинарские занятия относятся к интерактивным методам обучения и обладают значительными преимуществами по сравнению с традиционными методами обучения, главным недостатком которых является известная изначальная пассивность субъекта и объекта обучения.

Практические занятия могут проводиться в форме групповой дискуссии, «мозговой атаки», разборка кейсов, решения практических задач и др. Прежде, чем дать группе информацию, важно подготовить участников, активизировать их ментальные процессы, включить их внимание, развивать кооперацию и сотрудничество при принятии решений.

Методические рекомендации по проведению различных видов практических (семинарских) занятий.

1. Обсуждение в группах

Групповое обсуждение какого-либо вопроса направлено на нахождение истины или достижение лучшего взаимопонимания, Групповые обсуждения способствуют лучшему усвоению изучаемого материала.

На первом этапе группового обсуждения перед обучающимися ставится проблема, выделяется определенное время, в течение которого обучающиеся должны подготовить аргументированный развернутый ответ.

Преподаватель может устанавливать определенные правила проведения группового обсуждения:

- задавать определенные рамки обсуждения (например, указать не менее 5... 10 ошибок);

- ввести алгоритм выработки общего мнения (решения);

- назначить модератора (ведущего), руководящего ходом группового обсуждения.

На втором этапе группового обсуждения вырабатывается групповое решение совместно с преподавателем (арбитром).

Разновидностью группового обсуждения является круглый стол, который проводится с целью поделить проблемами, собственным видением вопроса, познакомиться с опытом, достижениями.

2. Публичная презентация проекта

Презентация – самый эффективный способ донесения важной информации как в разговоре «один на один», так и при публичных выступлениях. Слайд-презентации с использованием мультимедийного оборудования позволяют эффективно и наглядно представить содержание изучаемого материала, выделить и проиллюстрировать сообщение, которое несет поучительную информацию, показать ее ключевые содержательные пункты. Использование интерактивных элементов позволяет усилить эффективность публичных выступлений.

3. Дискуссия

Как интерактивный метод обучения означает исследование или разбор. Образовательной дискуссией называется целенаправленное, коллективное обсуждение конкретной проблемы (ситуации), сопровождающейся обменом идеями, опытом, суждениями, мнениями в составе группы обучающихся.

Как правило, дискуссия обычно проходит три стадии: ориентация, оценка и консолидация. Последовательное рассмотрение каждой стадии позволяет выделить следующие их особенности.

Стадия ориентации предполагает адаптацию участников дискуссии к самой проблеме, друг другу, что позволяет сформулировать проблему, цели дискуссии; установить правила, регламент дискуссии.

В стадии оценки происходит выступление участников дискуссии, их ответы на возникающие вопросы, сбор максимального объема идей (знаний), предложений, пресечение преподавателем (арбитром) личных амбиций отклонений от темы дискуссии.

Стадия консолидации заключается в анализе результатов дискуссии, согласовании мнений и позиций, совместном формулировании решений и их принятии.

В зависимости от целей и задач занятия, возможно, использовать следующие виды дискуссий: классические дебаты, экспресс-дискуссия, текстовая дискуссия, проблемная дискуссия, ролевая (ситуационная) дискуссия.

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

7.1. Описание шкал оценивания степени сформированности компетенций

Уровни сформированности компетенций	Индикаторы	Качественные критерии оценивание			
		2 балла	3 балла	4 балла	5 баллов
ПК-5					
Базовый	Знать: закономерности, принципы и уровни формирования и реализации содержания химического образования;	Не знает структуру, состав и дидактические единицы содержания школьного курса	В целом знает структуру, состав и дидактические единицы содержания школьного курса	Знает закономерности, принципы и уровни формирования и реализации содержания химического образования	
	Уметь: осуществлять отбор учебного содержания для реализации основных и дополнительных образовательных программ в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями учащихся	Не умеет выбирать необходимый материал для реализации основных и дополнительных образовательных программ в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями учащихся	В целом умеет выбирать необходимый материал для реализации основных и дополнительных образовательных программ в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями учащихся	Умеет выбирать необходимый материал для реализации основных и дополнительных образовательных программ в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями учащихся	
	Владеть: методами и средствами решения задачи и анализировать методологические проблемы, возникающие при решении задачи.	Не владеет навыками решения задачи и анализировать методологические проблемы, возникающие при решении задачи	В целом владеет решением задачи и анализировать методологические проблемы, возникающие при решении задачи	Владеет навыками решения задачи и анализировать методологические проблемы, возникающие при решении задачи	
Повышенный	Знать: виды и функции научно-методического обеспечения современного образовательного процесса				В полном объеме знает виды и функции научно-методического обеспечения современного образовательного процесса
	Уметь: выбирать виды и функции научно-методического обеспечения современного образовательного про-				В полном объеме умеет учитывать различные контексты, в которых протекают процессы обучения, воспитания и социа-

	цесса				лизации при проектировании
	Владеть: опытом выявления различных контекстов, в которых протекают процессы обучения, воспитания и социализации;				В полном объеме владеет навыками составления электронно-графических формул атомов элементов, применять вычислительные методы к определению структуры вещества
ПК-7					
Базовый	Знать: закономерности, принципы и уровни формирования и реализации содержания химического образования;	Не знает структуру, состав и дидактические единицы содержания школьного курса	В целом знает структуру, состав и дидактические единицы содержания школьного курса	Знает закономерности, принципы и уровни формирования и реализации содержания химического образования	
	Уметь: осуществлять отбор учебного содержания для реализации основных и дополнительных образовательных программ в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями учащихся	Не умеет выбирать необходимый материал для реализации основных и дополнительных образовательных программ в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями учащихся	В целом умеет выбирать необходимый материал для реализации основных и дополнительных образовательных программ в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями учащихся	Умеет выбирать необходимый материал для реализации основных и дополнительных образовательных программ в соответствии с дидактическими целями и возрастными особенностями учащихся	
	Владеть: методами и средствами решения задачи и анализировать методологические проблемы, возникающие при решении задачи.	Не владеет навыками решения задачи и анализировать методологические проблемы, возникающие при решении задачи	В целом владеет решением задачи и анализировать методологические проблемы, возникающие при решении задачи	Владеет навыками решения задачи и анализировать методологические проблемы, возникающие при решении задачи	
Повышенный	Знать: виды и функции научно-методического обеспечения современного образовательного процесса				В полном объеме знает виды и функции научно-методического обеспечения современного образовательного процесса
	Уметь: выбирать виды и функции научно-методического обеспечения со-				В полном объеме умеет учитывать различные контексты, в которых протекают процес-

	временного образовательного процесса				сы обучения, воспитания и социализации при проектировании
	Владеть: опытом выявления различных контекстов, в которых протекают процессы обучения, воспитания и социализации;				В полном объеме владеет навыками использования теоретических положений о строении вещества в учебном процессе

7.2. Типовые контрольные задания или иные учебно-методические материалы, необходимые для оценивания степени сформированности компетенций в процессе освоения учебной дисциплины

7.2.1. Типовые темы к письменным работам, докладам и выступлениям:

1. Электронное строение атомов
2. Принципы квантово-химического моделирования связей. Метод валентных связей
3. Метод молекулярных орбиталей
4. Теория химической связи.

Пример проверочной работы №1 (5 баллов).

1. Найти энергию электрона во втором возбужденном состоянии для частицы Li^{2+} .
2. Установить строение соединения состава $C_8H_8Cl_2$, если в спектре ПМР наблюдается 2 сигнала с соотношением интенсивностей 1:3 и ДМ =0.
3. Для молекулы $AlBr_3$:
 - а). Изобразите энергетические диаграммы и запишите электронные формулы атомов, входящих в состав молекулы.
 - б). Для каждого из атомов выпишите полные наборы квантовых чисел валентных электронов.
 - в). Охарактеризуйте положение химических элементов соответствующих атомов в периодической системе.

Пример проверочной работы № 2 (5 баллов).

1. Для молекулы CF_4 определите тип связей в молекуле. Укажите степени окисления элементов. Если какой-либо атом находится в возбужденном состоянии, изобразите (схематически, с использованием энергетических диаграмм) процесс возбуждения атома.
2. Определите механизм(ы) образования связей в молекуле $BaCl_2$. Если имеет место процесс гибридизации, изобразите трансформацию орбиталей; укажите тип гибридизации; изобразите

пространственное расположение гибридных орбиталей (предполагая, что все связи в молекулярной системе ковалентные).

3. В чем разница между σ - и π -связыванием?

Пример проверочной работы № 3 (5 баллов).

1. В чем заключается смысл теоремы Гельмана - Фейнмана?
2. В чем проявляется связь между классическим и квантовым представлением о характере взаимодействия между отдельными частицами в многоатомной молекуле?
3. Чем определяются силы, действующие на ядра атомов?
4. Как с помощью общих представлений о силах, действующих на ядра молекулы со стороны электронной оболочки, можно объяснить существование невалентных химических структур, подобных сэндвичевым и объемным молекулам?

Пример проверочной работы № 4 (5 баллов).

1. Что такое химическая связь? Какова природа этой связи?
2. Какую роль играют в тех или иных случаях так называемые π - и σ - составляющие общего электронного распределения?
3. Какие физические явления полностью теряются, если ограничится решением задачи о движении электронов в поле неподвижных ядер?
4. Как можно объяснить химическую связь в молекулах фуллеренов?

Пример проверочной работы 5. «Квантовая теория образования химических связей»

Вариант 1.

1. В чем заключается смысл теоремы Гельмана – Фейнмана?
2. В чем проявляется связь между классическим и квантовым представлением о характере взаимодействия между отдельными частицами в многоатомной молекуле?
3. Чем определяются силы, действующие на ядра атомов?
4. Как с помощью общих представлений о силах, действующих на ядра молекулы со стороны электронной оболочки, можно объяснить существование невалентных химических структур, подобных сэндвичевым и объемным молекулам?

Вариант 2

1. Что такое химическая связь? Какова природа этой связи?
2. Какую роль играют в тех или иных случаях так называемые π - и σ - составляющие общего электронного распределения?
3. Какие физические явления полностью теряются, если ограничится решением задачи о движении электронов в поле неподвижных ядер?
4. Как можно объяснить химическую связь в молекулах фуллеренов?

Вариант 3

1. Какое условие необходимо наложить с самого начала на возможные движения ядер при решении общей электронно-колебательной задачи для многоатомных молекул?
2. Что такое вычисляемые и измеряемые величины при исследовании микромира?
3. Какой физический смысл придается понятию заряда атома по Малликену?
4. Есть ли различия в характере химических связей в плоских циклических ароматических структурах типа бензола, нафталина и сфериче-

ских структурах, где казалось бы имеются те же самые кольца, на расположенные на поверхностях сферы?

Вариант 4

1. Какие вы знаете механизмы влияния заместителей на реакционную способность молекул? 2. Почему особую роль играют полярные заместители? 19 3. Имеется ли удаленное влияние полярных заместителей и каков физический смысл их действия? 4. Как можно определить характер химической связи и действие электронноядерных сил с помощью исследования карт проекций отдельных составляющих электронноядерных сил вдоль заданных сечений?

Критерии оценки доклада, сообщения, реферата:

Отметка «отлично» за письменную работу, реферат, сообщение ставится, если изложенный в докладе материал:

- отличается глубиной и содержательностью, соответствует заявленной теме;
- четко структурирован, с выделением основных моментов;
- доклад сделан кратко, четко, с выделением основных данных;
- на вопросы по теме доклада получены полные исчерпывающие ответы.

Отметка «хорошо» ставится, если изложенный в докладе материал:

- характеризуется достаточным содержательным уровнем, но отличается недостаточной структурированностью;
- доклад длинный, не вполне четкий;
- на вопросы по теме доклада получены полные исчерпывающие ответы только после наводящих вопросов, или не на все вопросы.

Отметка «удовлетворительно» ставится, если изложенный в докладе материал:

- не достаточно раскрыт, носит фрагментарный характер, слабо структурирован;
- докладчик слабо ориентируется в излагаемом материале;
- на вопросы по теме доклада не были получены ответы или они не были правильными.

Отметка «неудовлетворительно» ставится, если:

- доклад не сделан;
- докладчик не ориентируется в излагаемом материале;
- на вопросы по выполненной работе не были получены ответы или они не были правильными.

7.2.2. Примерные вопросы к промежуточной и итоговой аттестации (зачет) *Вопросы к экзамену (8 семестр)*

Примерные вопросы к экзамену

1. Исторические сведения. Квантовая теория света Планка-Эйнштейна. Ядерная модель Резерфорда. Теория Бора. Возникновение квантовой механики. Развитие квантовой химии.
2. Корпускулярно-волновой дуализм вещества. Формула де Бройля.
3. Принцип неопределенности Гейзенберга.
4. Линейные самосопряженные (эрмитовы) операторы.
5. Собственные функции и собственные значения операторов.
6. Операторы координаты и импульса. Соотношения Гейзенберга.

7. Оператор функции Гамильтона (гамильтониан).
8. Операторы моменты импульса. Перестановочные соотношения.
9. Частица в потенциальном ящике.
10. Гармонический осциллятор.
11. Жесткий ротатор.
12. Задача об атоме водорода.
13. Атомные термы.
14. Приближенные методы: теория возмущений; вариационный метод.
15. Молекулярное уравнение Шредингера, разделение переменных. Адиабатическое приближение.
16. Энергетические состояния молекул: электронные, колебательные и вращательные (их относительное расположение, переходы и т.п).
17. Потенциальная поверхность молекулы (общая характеристика).
18. Электронное уравнение Шредингера. Волновая функция и энергия многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.
19. Уравнения Хартри-Фока и Хартри-Фока-Рутаана. Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии.
20. Молекула водорода в методе ВС (по Гейтлеру-Лондону).
21. Молекула водорода в методе МО и МО ЛКАО.
22. Электронное строение органических соединений.
23. Сопряженные системы. Ароматичность и антиароматичность. Хюккелевские и мебиусовские системы.
24. Полиэдрические боргидридные анионы $B_nH_n^{2-}$ ($n = 5 \div 12$) и карбораны на их основе.
25. Комплексы переходных металлов вида AH_n . Карбонилы металлов. Ферроцен, дибензолхром. Биоккомплексы.

Критерии оценки устного ответа на вопросы по дисциплине «Строение молекул и основы квантовой химии»:

- ✓ 5 баллов - если ответ показывает глубокое и систематическое знание всего программного материала и структуры конкретного вопроса, а также основного содержания и новаций лекционного курса по сравнению с учебной литературой. Студент демонстрирует отчетливое и свободное владение концептуально-понятийным аппаратом, научным языком и терминологией соответствующей научной области. Знание основной литературы и знакомство с дополнительно рекомендованной литературой. Логически корректное и убедительное изложение ответа.
- ✓ 4 - балла - знание узловых проблем программы и основного содержания лекционного курса; умение пользоваться концептуально-понятийным аппаратом в процессе анализа основных проблем в рамках данной темы; знание важнейших работ из списка рекомендованной литературы. В целом логически корректное, но не всегда точное и аргументированное изложение ответа.

- ✓ 3 балла – фрагментарные, поверхностные знания важнейших разделов программы и содержания лекционного курса; затруднения с использованием научно-понятийного аппарата и терминологии учебной дисциплины; неполное знакомство с рекомендованной литературой; частичные затруднения с выполнением предусмотренных программой заданий; стремление логически определенно и последовательно изложить ответ.
- ✓ 2 балла – незнание, либо отрывочное представление о данной проблеме в рамках учебно-программного материала; неумение использовать понятийный аппарат; отсутствие логической связи в ответе.

7.2.3. Тестовые задания для проверки знаний студентов

Примерные тестовые задания по дисциплине «Строение молекул и основы квантовой химии» для промежуточного контроля знаний

Раздел №1 Основные положения квантовой химии

1. Квантовая химия изучает: а. Качественный и количественный анализ веществ б. Взаимное превращение одного вида энергии в другой. в. Химические процессы на основе физических законов. г. Поверхностные явления на разделе фаз. д. Строение вещества на основе математики и других наук.

2. В теории химического строения вещества коллективное взаимодействие можно рассматривать как образование а. Всевозможных связей между атомами б. Парных связей между атомами в. «Связанных» и «несвязанных» атомов

3. Теория строения вещества объясняет, что а. Все взаимодействия между атомами являются главными («сильными»); б. Часть взаимодействий между атомами являются главными («сильными»), часть взаимодействий между атомами слабыми; в. Невозможно определить наличие главных и слабых связей между атомами.

4. В теории строения вещества представлена взаимосвязь между строением вещества и его свойствами как а. функция парциальных свойств только эффективных атомов и химических связей; б. функция парциальных свойств химических связей и пар несвязанных атомов;

5. Синхротронное излучение имеет природу а. светового луча б. электрического поля в. электромагнитного поля;

6. Постулаты Бора характеризуют атом в а. неустойчивом состоянии б. переходном состоянии; в. стационарном состоянии;

7. Гипотеза Ле де Бройля объясняет, что электрон способен а. дифрагировать подобно волнам сохраняя свои свойства; б. дифрагировать подобно волнам не сохраняя свои свойства;

8. Выберите формулу, которая характеризует монохроматическое излучение атома при переходе из одного стационарного состояния в другое. а. $E_2 h \omega = E_1 + E_2$ б. $h \omega = E_1 - E_2$ в. $h / \omega = E_1 - E_2$

9. Волновая функция характеризуется а. как комплексная величина; б. как величина не зависящая от времени; в. как величина, обладающая свойством дискретности;

10. Уравнение $\int |\psi|^2 dV$ означает, что а. частица располагается только в области определенного пространства; б. частица может находиться во всякой точке внутри и вне пространства; в. интеграл взятый для частицы на границе пространства равен 1; г. интеграл взятый для частицы на границе пространства равен 0;

Раздел 2. «Квантовая теория образования химических связей»

1. Квантовая химия изучает: а. Качественный и количественный анализ веществ б. Взаимное превращение одного вида энергии в другой. в. Химические процессы на основе физических законов. г. Поверхностные явления на разделе фаз. д. Строение вещества на основе математики и других наук.

2. В теории химического строения вещества коллективное взаимодействие можно рассматривать как образование а. Всевозможных связей между атомами б. Парных связей между атомами в. «Связанных» и «несвязанных» атомов

3. Теория строения вещества объясняет, что а. Все взаимодействия между атомами являются главными («сильными»); б. Часть взаимодействий между атомами являются главными («сильными»), часть взаимодействий между атомами слабыми; в. Невозможно определить наличие главных и слабых связей между атомами.

4. В теории строения вещества представлена взаимосвязь между строением вещества и его свойствами как А. функция парциальных свойств только эффективных атомов и химических связей; Б. функция парциальных свойств химических связей и пар несвязанных атомов;

5. Синхротронное излучение имеет природу а. светового луча б. электрического поля в. электромагнитного поля;

6. Постулаты Бора характеризуют атом в а. неустойчивом состоянии б. переходном состоянии; в. стационарном состоянии;

7. Гипотеза Ле де Бройля объясняет, что электрон способен а. дифрагировать подобно волнам сохраняя свои свойства; б. дифрагировать подобно волнам не сохраняя свои свойства;

8. Выберите формулу, которая характеризует монохроматическое излучение атома при переходе из одного стационарного состояния в другое. а. $E_2 h \omega = E_1 + E_2$ б. $h \omega = E_1 - E_2$ в. $h / \omega = E_1 - E_2$

9. Волновая функция характеризуется а. как комплексная величина; б. как величина не зависящая от времени; в. как величина, обладающая свойством дискретности;

10. Уравнение $\int |\psi|^2 dV$ означает, что а. частица располагается только в области определенного пространства; б. частица может находиться во всякой точке внутри и вне пространства; в. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 1; г. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 0;

11. Выберите уравнение, которое означает, что волновая функция это сопряженная функция. а. $\psi(x, y, z, t)^2$ б. $\psi = \psi(x, y, z, t)$ в. $[\psi^2] = \psi \psi^*$ г. $\int |\psi|^2 dV$

12. Возникновение волнового пакета а. не зависит от изменения величины волновой функции. б. зависит от резкого понижения волновой функции в. зависит от резкого возрастания волновой функции;

Тестовые задания для итогового контроля знаний

1) Изотопы одного элемента отличаются числом... а. электронов; б. нейтронов; в. протонов; д. позитронов.

2) Радиус атомов уменьшается в ряду элементов... а. Br, F, Cl; б. Li, Na, K; в. P, Si, Al; д. Se, S, O.

3) Радиус элементов возрастает в ряду... а. O, S, Te, Se; б. Mg, Ca, Ba, Sr; в. Si, Ge, Sn, Pb; д. Al, Si, Mg, Na.

4) В периоде с увеличением порядкового номера элементов металлические свойства... а. усиливаются; б. ослабевают; в. изменяются неоднозначно; д. не изменяются.

5) В группах с увеличением порядкового номера электроотрицательность элементов... а. не изменяется; б. увеличивается; в. уменьшается; г. изменяется периодически.

6) Кислотный характер имеют оксиды, образованные металлами... а. главных подгрупп; б. со степенью окисления равной или выше +4; в. с любой степенью окисления; г. со степенью окисления ниже +4.

7) Уравнение Шредингера показывает характеристику волновой функции а. относительно декартовых координат; б. относительно времени; в. относительно изменения теплового эффекта; г. относительно перехода частицы из одного состояния в другое.

8) В теории химического строения вещества коллективное взаимодействие можно рассматривать как образование: а. всевозможных связей между атомами; б. парных связей между атомами; в. «связанных» и «несвязанных» атомов.

9) Уравнение Шредингера показывает характеристику а. атома в пространстве; б. повеление электрона внутри атома; в. протекание химической реакции.

10) Теория строения вещества объясняет, что а. все взаимодействия между атомами являются главными («сильными»); б. часть взаимодействий между атомами являются главными («сильными»), часть взаимодействий между атомами слабыми; в. невозможно определить наличие главных и слабых связей между атомами.

11) Волновая функция характеризуется а. как комплексная величина; б. как величина не зависящая от времени; в. как величина, обладающая свойством дискретности.

12) Операторы это величины, которые а. зависят от функций системы; б. не зависят от функций системы.

13) Квантовая химия изучает: а. Качественный и количественный анализ веществ. б. Взаимное превращение одного вида энергии в другой. в. Химические процессы на основе физических законов. г. Поверхностные явления на разделе фаз. д. Строение вещества на основе математики и других

14) Выберите уравнение, которое означает, что волновая функция это сопряженная функция. а. $\psi(x,y,z)$ б. $\psi = \psi(x,y,z,t)$ в. $[\psi^2] = \psi\psi^*$ г. $\int |\psi|^2 dV$

15) В теории строения вещества представлена взаимосвязь между строением вещества и его свойствами как а. функция парциальных свойств только эффективных атомов и химических связей; б. функция парциальных свойств химических связей и пар несвязанных атомов.

16) Уравнение: $\nabla^2 \psi = -2mE\psi$ выражает а. оператор импульса; б. оператор Гамильтона; в. оператор энергии.

17) Потенциальный одномерный ящик показывает а. уровни энергии; б. распределение электронов по уровням; в. характеристику волновых функций.

18) Синхротронное излучение имеет природу а. светового луча ; б. электрического поля; в. электромагнитного поля;

19) вырождением называют а. набор главных квантовых чисел, которому соответствует одинаковая энергия; б. набор магнитных квантовых чисел , которому соответствует одинаковая энергия; в. набор главных квантовых чисел, которому не соответствует одинаковая энергия; г. набор магнитных квантовых чисел , которому не соответствует одинаковая энергия.

20) Постулаты Бора характеризуют атом в а. неустойчивом состоянии б. переходном состоянии; в. стационарном состоянии.

21) Гистограмма показывает распределение... а. электронной плотности; б. распределение энергии связи; в. распределение энергии связи.

22) Выберите формулу, которая характеризует монохроматическое излучение атома при переходе из одного стационарного состояния в другое. а. $E_2 h \omega = E_1 + E_2$ б. $h \omega = E_1 - E_2$ в. $h / \omega = E_1 - E_2$
 23) Волновая функция гибридных облаков является а. Нормированной; б. Ортогональной; в. Линейной; д. Дискретной. 24) Уравнение $\int |\psi|^2 dV$ означает, что а. частица располагается только в области определенного пространства; б. частица может находиться во всякой точке внутри и вне пространства; в. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 1; д. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 0. 25) Гипотеза Ле де Бройля объясняет, что электрон способен а. дифрагировать подобно волнам сохраняя свои свойства; б. дифрагировать подобно волнам не сохраняя свои свойства. 26) Возникновение волнового пакета а. не зависит от изменения величины волновой функции. б. зависит от резкого понижения волновой функции в. зависит от резкого возрастания волновой функции.

Шкала оценивания (за правильный ответ дается 1 балл)

«неудовлетворительно» – 50% и менее

«удовлетворительно» – 51-80%

«хорошо» – 81-90%

«отлично» – 91-100%

Темы презентаций

1. История развития представлений о строении атома. 2. Координационная химическая связь. 3. Радиоактивные реакции. 4. Гибридизация. 5. Метод МО и ВС в квантовой химии. 6. Гармонический осциллятор. Бозоны, фермионы. 7. Силы в молекулах и химическая связь.

Вопросы для коллоквиума

Тема: «Строение и свойства сопряженных молекул координационных соединений: теория МО и теория полилигандов. Квантовая теория химических реакций»

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 перекрывания.

8. Поверхности реакций и их свойства.

9. Квантовая теория химических реакций.

10. Траектории химических реакций.

11. Изображение хода химических реакций.

12. Этапы изменения энергии реагентов продуктов.

Критерии оценки коллоквиума, творческих заданий по дисциплине

«Строение молекул и основы квантовой химии»:

✓ 5 баллов - выставляется студенту, если выполнены все задания варианта, продемонстрировано знание фактического материала (базовых понятий, алгоритма, факта).

✓ 4 балла - работа выполнена вполне квалифицированно в необходимом объеме; имеются незначительные методические недочеты и дидактические ошибки. Продemonстрировано умение правильно использовать специальные термины и понятия, узнавание объектов изучения в рамках определенного раздела дисциплины; понятен творческий уровень и аргументация собственной точки зрения

✓ 3 балла – продемонстрировано умение синтезировать, анализировать, обобщать фактический и теоретический материал с формулированием конкретных выводов, установлением причинно-следственных связей в рамках определенного раздела дисциплины;

✓ 2 балла - работа выполнена на неудовлетворительном уровне; не в полном объеме, требует доработки и исправлений и исправлений более чем половины объема.

7.2.4. Бально-рейтинговая система оценки знаний бакалавров

Согласно Положения о бально-рейтинговой системе оценки знаний бакалавров баллы выставляются в соответствующих графах журнала (см. «Журнал учета бально-рейтинговых показателей студенческой группы») в следующем порядке:

«Посещение» - 2 балла за присутствие на занятии без замечаний со стороны преподавателя; 1 балл за опоздание или иное незначительное нарушение дисциплины; 0 баллов за пропуск одного занятия (вне зависимости от уважительности пропуска) или опоздание более чем на 15 минут или иное нарушение дисциплины.

«Активность» - от 0 до 5 баллов выставляется преподавателем за демонстрацию студентом знаний во время занятия письменно или устно, за подготовку домашнего задания, участие в дискуссии на заданную тему и т.д., то есть за работу на занятии. При этом преподаватель должен опросить не менее 25% из числа студентов, присутствующих на практическом занятии.

«Контрольная работа» или «тестирование» - от 0 до 5 баллов выставляется преподавателем по результатам контрольной работы или тестирования группы, проведенных во внеаудиторное время. Предполагается, что преподаватель по согласованию с деканатом проводит подобные мероприятия по выявлению остаточных знаний студентов не реже одного раза на каждые 36 часов аудиторного времени.

«Отработка» - от 0 до 2 баллов выставляется за отработку каждого пропущенного лекционного занятия и от 0 до 4 баллов может быть поставлено преподавателем за отработку студентом пропуска одного практического занятия или практикума. За один раз можно отработать не более шести пропусков (т.е., студенту выставляется не более 18 баллов, если все пропущенные шесть занятий являлись практическими) вне зависимости от уважительности пропусков занятий.

«Пропуски в часах всего» - количество пропущенных занятий за отчетный период умножается на два (1 занятие=2 часам) (заполняется делопроизводителем деканата).

«Пропуски по неуважительной причине» - графа заполняется делопроизводителем деканата.

«Пропуски по уважительной причине» - графа заполняется делопроизводителем деканата.

«Корректировка баллов за пропуски» - графа заполняется делопроизводителем деканата.

«Итого баллов за отчетный период» - сумма всех выставленных баллов за данный период (графа заполняется делопроизводителем деканата).

Таблица перевода бально-рейтинговых показателей в отметки традиционной системы оценивания

Соотношение часов лекционных и практических занятий	0/2	1/3	1/2	2/3	1/1	3/2	2/1	3/1	2/0	Соответствие коэффициенту	отметки
Коэффициент соответствия	1,5	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	«зачтено»	
балльных показателей тради-	1	1	1	1	1	1	1	1	1	«удовлетворительно»	

ционной отметке	2	1,75	1,65	1,6	1,5	1,4	1,35	1,25	-	«хорошо»
	3	2,5	2,3	2,2	2	1,8	1,7	1,5	-	«отлично»

Необходимое количество баллов для выставления отметок («зачтено», «удовлетворительно», «хорошо», «отлично») определяется произведением реально проведенных аудиторных часов (n) за отчетный период на коэффициент соответствия в зависимости от соотношения часов лекционных и практических занятий согласно приведенной таблице.

«Журнал учета балльно-рейтинговых показателей студенческой группы» заполняется преподавателем на каждом занятии.

В случае болезни или другой уважительной причины отсутствия студента на занятиях, ему предоставляется право отработать занятия по индивидуальному графику.

Студенту, набравшему количество баллов менее определенного порогового уровня, выставляется оценка "неудовлетворительно" или "не зачтено". Порядок ликвидации задолженностей и прохождения дальнейшего обучения регулируется на основе действующего законодательства РФ и локальных актов КЧГУ.

Текущий контроль по лекционному материалу проводит лектор, по практическим занятиям – преподаватель, проводивший эти занятия. Контроль может проводиться и совместно.

Студенту могут быть предложены темы для презентаций:

Темы презентаций 1. История развития представлений о строении атома. 2. Координационная химическая связь. 3. Радиоактивные реакции. 4. Гибридизация. 5. Метод МО и ВС в квантовой химии. 6. Гармонический осциллятор. Бозоны, фермионы. 7. Силы в молекулах и химическая связь.

8.Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины. Информационное обеспечение образовательного процесса

8.1. Основная литература:

1. Игнатов, С. К. Квантовая химия. Химическая связь и теория молекул : учебное пособие / С. К. Игнатов. - Нижний Новгород: ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2016. - 136 с.- URL: <https://e.lanbook.com/book/153007>
2. Игнатов, С. К. Задачи по квантовой химии: учебно-методическое пособие / С. К. Игнатов. - Нижний Новгород: ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2015. - 28 с. - URL: <https://e.lanbook.com/book/153008>
3. Крашенинин, В. И. Квантовая химия: учебное пособие / В. И. Крашенинин, Л. В. Кузьмина, Е. Г. Газенаур; Кемеровский государственный университет.- Кемерово: КемГУ, 2019. - 82 с. - ISBN 978-5-8353-2440-8.- URL: <https://e.lanbook.com/book/135217>

8.2. Дополнительная литература:

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие. М.: Изд-во «Академия», 2008. -384с
2. Борщевский А.Я. . Строение атомных частиц. Многоэлектронные атомы. М.: 2010, 80 с [Электронный ресурс] www.chem.msu.ru – Химия для физиков
3. Борщевский А.Я. Строение атомных частиц. Водородоподобные атомы – М.: 2010, 86 с. [Электронный ресурс]Т2. - 3-е изд., испр. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. -623 с. (Классический университетский учебник)
<http://www.chem.msu.ru/teaching/borschevskii/1part.pdf>

4. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия. М: Гардарики, 1999. -390с.
5. Дементьев, А. И. Строение молекул и квантовая химия: учебное пособие / А. И. Дементьев, С. О. Адамсон ; Московский физико-технический институт (гос. ун-т). - Москва: Московский физико-технический ин-т (гос. ун-т), 2008. - 252 с.: ил.- ISBN 5-7417-0224-6.-
URL:https://old.rusneb.ru/catalog/000199_000009_004135213
6. Зарубин, Д. П. Физическая химия : учебное пособие / Д. П. Зарубин. - Москва: ИНФРА-М, 2019. - 474 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-010067-8. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1009295>
7. Корж, Е. Н. Физическая химия. Теория и задачи: учебное пособие / Е. Н. Корж. - Севастополь: СевГУ, 2020. - 205 с. - URL: <https://e.lanbook.com/book/164934>
8. А.М. Мелёшина Курс квантовой механики для химиков. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высшая школа, 1980. 215 с.
9. Физическая химия: учебное пособие / Н. В. Белоусова, М. Н. Васильева, Н. С. Симонова, А. Ф. Шиманский. - Красноярск : СФУ, 2019. - 308 с. - ISBN 978-5-7638-4052-0. -
URL:<https://e.lanbook.com/book/157661>

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

вид учебных занятий	Организация деятельности студента
Лекция	Написание конспекта лекций: краткое, схематичное, последовательное фиксирование основных положений, выводов, формулировок, обобщений; выделение ключевых слов, терминов. Проверка терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначение вопросы, терминов, материала, вызывающего трудности. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации, на практическом занятии. Уделить внимание следующим понятиям (<i>перечисление понятий</i>) и др.
Практические занятия	Конспектирование источников. Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам, просмотр рекомендуемой литературы, решение расчетных задач, выполнение упражнений и др.
Контрольная работа/индивидуальные задания	Знакомство с основной и дополнительной литературой, включая справочные издания, зарубежные источники, конспект основных положений, терминов, сведений, требующих для запоминания и являющихся основополагающими, выполнение упражнений, решение задач.
Реферат/курсовая работа	<i>Реферат</i> : Поиск литературы и составление библиографии, использование от 3 до 5 научных работ, изложение мнения авторов и своего суждения по выбранному вопросу; изложение основных аспектов проблемы. Ознакомиться со структурой и оформлением реферата.
Коллоквиум	Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам и др.
Подготовка к экзамену (зачету)	При подготовке к экзамену необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу и др.

10. Требования к условиям реализации рабочей программы дисциплины (модуля)

10.1. Общесистемные требования

Электронная информационно-образовательная среда ФГБОУ ВО «КЧГУ»

<http://kchgu.ru> - адрес официального сайта университета

<https://do.kchgu.ru> - электронная информационно-образовательная среда КЧГУ

Электронно-библиотечные системы (электронные библиотеки)

Учебный год	Наименование документа с указанием реквизитов	Срок действия документа
2021 / 2022 учебный год	Электронно-библиотечная система ООО «Знани-ум». Договор № 5184 ЭБС от 25 марта 2021г.	с 30.03.2021 г по 30.03.2022 г.
	Электронно-библиотечная система «Лань». Договор № СЭБ НВ-294 от 1 декабря 2020 года.	Бессрочный
2021 /2022 учебный год	Электронная библиотека КЧГУ (Э.Б.).Положение об ЭБ утверждено Ученым советом от 30.09.2015г.Протокол № 1). Электронный адрес: https://kchgu.ru/biblioteka - kchgu/	Бессрочный
2021 / 2022 Учебный год	Электронно-библиотечные системы: Научная электронная библиотека «ELIBRARY.RU» - https://www.elibrary.ru . Лицензионное соглашение №15646 от 01.08.2014г.Бесплатно. Национальная электронная библиотека (НЭБ) – https://rusneb.ru . Договор №101/НЭБ/1391 от 22.03.2016г.Бесплатно. . Электронный ресурс «Polred.com Обзор СМИ» – https://polpred.com . Соглашение. Бесплатно.	Бессрочно

10.2. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины

1) Учебная аудитория для проведения занятий лекционного и практического типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации

Специализированная мебель:

столы ученические, стулья, доска меловая.

Технические средства обучения: Персональный компьютер с подключением к сети «Интернет», принтер, переносной экран.

Лицензионное программное обеспечение:

Microsoft Windows (Лицензия № 60290784, бессрочная),

Microsoft Office (Лицензия № 60127446, бессрочная),Kaspersky Endpoint Security (Лицензия № 280У2102100934034202061. Срок действия: с 03.03.2021 по 04.03.2023 г.).

369200 Карачаево-Черкесская Республика,

г. Карачаевск, ул. Ленина, 36 учебный корпус, ауд. 20

2) Лаборатория для проведения лабораторных занятий, практического и семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации и для проведения различных видов практик

Специализированная мебель:

столы ученические, стулья, доска меловая, шкаф – 2 шт.

Лабораторное оборудование:

Химическая посуда, химические реактивы, мойка для лабораторной посуды – 3 шт., вытяжной шкаф для химической посуды – 2 шт., центрифуга.

Технические средства обучения:

Персональный компьютер с подключением к сети «Интернет», телевизор, ноутбук, принтер.

Лицензионное программное обеспечение:

Microsoft Windows (Лицензия № 60290784, бессрочная)

Microsoft Office (Лицензия № 60127446, бессрочная)

ABBYY FineReader (лицензия №FCRP-1100-1002-3937), бессрочная,

Calculate Linux (внесён в ЕРПП Приказом Минкомсвязи №665 от 30.11.2018-2020), бессрочная

GNU Image Manipulation Program (GIMP) (лицензия: №GNU GPLv3), бессрочная

Google G Suite for Education (IC: 01i1p5u8), бессрочная

KasperskyEndpointSecurity (Лицензия № 0E2617020310350323790),

Срок действия: с 02.03.2017 по 02.03.2019г.

KasperskyEndpointSecurity (Лицензия № 0E2619021414342391082), с 14.02.2019 по 02.03.2021 г.

KasperskyEndpointSecurity (Лицензия № 280E-210210-093403-420-2061), с 03.03.2021 по 04.03.2023 г.

369200 Карачаево-Черкесская Республика, г. Карачаевск, ул. Ленина, 36 учебно-лабораторный корпус, ауд. 404

10.3. Необходимый комплект лицензионного программного обеспечения

1. ABBYY FineReader (лицензия №FCRP-1100-1002-3937), бессрочная.
2. Calculate Linux (внесён в ЕРПП Приказом Минкомсвязи №665 от 30.11.2018-2020), бессрочная.
3. GNU Image Manipulation Program (GIMP) (лицензия: №GNU GPLv3), бессрочная.
4. Google G Suite for Education (IC: 01i1p5u8), бессрочная.
5. Kaspersky Endpoint Security (Лицензия № 0E2617020310350323790), с 02.03.2017 по 02.03.2019г.
6. Kaspersky Endpoint Security (Лицензия № 0E2619021414342391082), с 14.02.2019 по 02.03.2021г.
7. Kaspersky Endpoint Security (лицензия №280E2102100934034202061), с 03.03.2021 по 04.03.2023 г.
8. Microsoft Office (лицензия №60127446), бессрочная.
9. Microsoft Windows (лицензия №60290784), бессрочная.

10.4. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы**Современные профессиональные базы данных**

1. Федеральный портал «Российское образование»- <https://edu.ru/documents/>
2. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов (Единая коллекция ЦОР) – <http://school-collection.edu.ru/>
3. Базы данных Scopus издательства Elsevir
<http://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic>.

Информационные справочные системы

1. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования - <http://fgosvo.ru>.
2. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов (ФЦИОР) – <http://edu.ru>.
3. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов (Единая коллекция ЦОР) – <http://school-collection.edu.ru>.

4. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» (ИС «Единое окно») – <http://window/edu.ru>.

11. Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

В группах, в состав которых входят студенты с ОВЗ, в процессе проведения учебных занятий создается гибкая, вариативная организационно-методическая система обучения, адекватная образовательным потребностям данной категории обучающихся, которая позволяет не только обеспечить преемственность систем общего (инклюзивного) и высшего образования, но и будет способствовать формированию у них компетенций, предусмотренных ФГОС ВО, ускорит темпы профессионального становления, а также будет способствовать их социальной адаптации.

В процессе преподавания учебной дисциплины создается на каждом занятии толерантная социокультурная среда, необходимая для формирования у всех обучающихся гражданской, правовой и профессиональной позиции соучастия, готовности к полноценному общению, сотрудничеству, способности толерантно воспринимать социальные, личностные и культурные различия, в том числе и характерные для обучающихся с ОВЗ.

Посредством совместной, индивидуальной и групповой работы формируется у всех обучающихся активная жизненная позиция и развитие способности жить в мире разных людей и идей, а также обеспечивается соблюдение обучающимися их прав и свобод и признание права другого человека, в том числе и обучающихся с ОВЗ на такие же права.

В группах, в состав которых входят обучающиеся с ОВЗ, в процессе учебных занятий используются технологии, направленные на диагностику уровня и темпов профессионального становления обучающихся с ОВЗ, а также технологии мониторинга степени успешности формирования у них компетенций, предусмотренных ФГОС ВО при изучении данной учебной дисциплины, используя с этой целью специальные оценочные материалы и формы проведения промежуточной и итоговой аттестации, специальные технические средства, предоставляя обучающимся с ОВЗ дополнительное время для подготовки ответов, привлекая тьютеров).

Материально-техническая база для реализации программы:

1. Мультимедийные средства:

- ☒ интерактивные доски «Smart Board», «Toshiba»;
- ☒ экраны проекционные на штативе 280*120;
- ☒ мультимедиа-проекторы Epson, Benq, Mitsubishi, Aser;

2. Презентационное оборудование:

- ☒ радиосистемы AKG, Shure, Quik;
- ☒ видеоконференц-системы Microsoft, Logitech;
- ☒ микрофоны беспроводные;
- ☒ класс компьютерный мультимедийный на 21 мест;
- ☒ ноутбуки Aser, Toshiba, Asus, HP;

Наличие компьютерной техники и специального программного обеспечения: имеются рабочие места, оборудованные рельефно-точечными клавиатурами (шрифт Брайля), программное обеспечение NVDA с функцией синтезатора речи, видеоувеличителем, клавиатурой для лиц с ДЦП, роллером. Распределение специализированного оборудования.

12. Лист регистрации изменений

В рабочей программе внесены следующие изменения:

Изменение	Дата и номер протокола ученого совета факультета/института, на котором были рассмотрены вопросы о необходимости внесения изменений	Дата и номер протокола ученого совета Университета, на котором были утверждены изменения	Дата введения изменений
Обновлен договор на предоставление доступа к ЭБС: Электронно-библиотечная система «Лань». Договор № СЭБ НВ -294 от 01.12.2020г. Бессрочный.	02.12.2020 г., протокол № 4	03.12.2020 г., протокол № 2	03.12.2020 г.
Обновлен договор на использование комплектов лицензионного программного обеспечения: оказание услуг по продлению лицензий на антивирусное программное обеспечение. Kaspersky Endpoint Security (номер лицензии 280E-210210-093403-420-2061). 2021-2023 годы	30.03.2021 г., протокол № 6	31 марта 2021г., протокол № 6	31.03.2021 г.
Обновлены договоры на предоставление доступа к электронно-библиотечным системам: Электронно-библиотечная система ООО «Знаниум». Договор № 5184 ЭБС от 25.03.2021г. (срок действия с 30.03.2021 по 30.03.2022г.).	30.03.2021 г., протокол № 6	31 марта 2021г., протокол № 6	31.03.2021г.
Обновлены договоры на предоставление доступа к электронно-библиотечным системам: Электронно-библиотечная система ООО «Знаниум». Договор № 179 ЭБС от 22.03.2022г. (срок действия с 30.03.2022 по 30.03.2023г.)	25.03.2022 г., протокол № 6 / 2	30.03.2022 г., протокол № 10	30.03.2022 г.

<p>Обновлены договоры:</p> <p>1. На антивирус Касперского. (Договор №56/2023 от 25 января 2023г.). Действует до 03.03.2025г.</p> <p>2. Договор № 915 ЭБС ООО «Знаниум» от 12.05.2023г. Действует до 15.05.2024г.</p>		29.06.2023 г., протокол № 8	29.06.2023 г., протокол № 8
--	--	--------------------------------	--------------------------------