МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет»

Химико-технологический факультет

УТВЕРЖДЕНО
Химико-технологический факультет

Декан Шишкин Е.В.
02.07.2021 г.

Основы квантовохимического анализа

рабочая программа дисциплины (модуля, практики)

Закреплена за кафедрой **Технология высокомолекулярных и волокнистых материалов**

Учебный план Направление 18.03.01 Химическая технология

Профиль **Химическая технология органических веществ**

Квалификация **бакалавр**

Срок обучения **4 года**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **5 ЗЕТ**

Виды контроля в семестрах: зачеты 6

Семестр(Курс.Номер семестра на курсе)	**6(3.2)**		Итого	
	УП	ПП	УП	ПП
Лекции	32	32	32	32
Практические	16	16	16	16
Лабораторные	32	32	32	32
Итого ауд.	80	80	80	80
Контактная работа	80.25	80.25	80.25	80.25
Сам. работа	99.75	99.75	99.75	99.75
Часы на контроль	0	0	0	0
Практическая подготовка	0	0	0	0
Итого трудоемкость в часах	180	180	0	0

ЛИСТ ОДОБРЕНИЯ, СОГЛАСОВАНИЯ И АКТУАЛИЗАЦИИ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Разработчик(и) программы:

доцент Климов В.В. кхн

доцент Коляганова О.В. ктн

Рецензент(ы):
(при наличии)

Рабочая программа дисциплины (модуля, практики)
Основы квантовохимического анализа

разработана в соответствии с ФГОС ВО:
Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология (приказ Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 922)

составлена на основании учебного плана:
Направление 18.03.01 Химическая технология

Профиль: Химическая технология органических веществ

утвержденного учёным советом вуза от 26.05.2021 протокол № 10.

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры
Технология высокомолекулярных и волокнистых материалов

номер протокола 2021 г.
Зав. кафедрой Навроцкий Александр Валентинович

СОГЛАСОВАНО:
Химико-технологический факультет
Председатель НМС факультета: Шишкин Е.В.

Протокол заседания НМС от
02.07.2021 г. № 11

Рабочая программа дисциплины (модуля, практики) актуализирована 31.08.2023

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ, ПРАКТИКИ). ВИД, ТИП ПРАКТИКИ, СПОСОБ И ФОРМА (ФОРМЫ) ЕЕ ПРОВЕДЕНИЯ.
Целью преподавания дисциплины бакалаврам направления 18.03.01 «Химическая технология» является изучение студентами основ квантовой механики, теоретических и расчетных методов квантовой химии в приложении к решению химических задач с помощью квантовохимических компьютерных программ.
Основными задачами изучения дисциплины являются:
1) формирование у студентов понимание языка квантовой химии и специфической терминологии;
2) обучение студентов основам квантовой механики и химии в приложении к
решению химических задач;
3) овладение студентами навыками применения квантовохимических методов
при решении химических задач и проведения расчетов с помощью квантовохимических компьютерных программ.
4) формирование у студентов пространственного мышления о строении химических соединений их энергетических факторах, определяющих структуру молекул и свойства.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ, ПРАКТИКИ) В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ	
Цикл (раздел) ОП:	Б1.О
2.1	**Требования к предварительной подготовке обучающегося:**
2.1.1	Органическая химия
2.1.2	Общая и неорганическая химия
2.2	**Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:**
2.2.1	Исследование простых и сложных реакций основного органического синтеза методом химической кинетики
2.2.2	Катализ в химии и химической технологии
2.2.3	Радикальные реакции в химической технологии

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ, ПРАКТИКИ)
ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов
ОПК-1.15: Владеет теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в Периодической системе химических элементов, экспериментальными методами определения физических и химических свойств соединений.
Результаты обучения: Результат обучения: студент владеет теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в Периодической системе химических элементов, экспериментальными методами определения физических и химических свойств соединений.
ОПК-2: Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности
ОПК-2.20: Знает основные положения квантовой химии, лежащие в основе ее расчетных методов, используемых для квантовохимического анализа молекулярных систем
Результаты обучения: Результат обучения: студент знает основные положения квантовой химии, лежащие в основе ее расчетных методов, используемых для квантовохимического анализа молекулярных систем.
ОПК-2.21: Умеет использовать знания о со-временной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества
Результаты обучения: Результат обучения: студент умеет использовать знания о современной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества.
ОПК-2.22: Владеет методами теоретического исследования в области квантовой химии с применением компьютерного моделирования в программном комплексе HyperChem 8.0
Результаты обучения: Результат обучения: студент владеет методами теоретического исследования в области квантовой химии с применением компьютерного моделирования в программном комплексе HyperChem 8.0.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ, ПРАКТИКИ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Форма контроля
1	**Раздел 1. Обучение**			
1.1	Этапы развития квантовой химии и перспективы ее применения для решения химических задач, современное программное обеспечение квантовохимических расчетов. /Тема/	6	0	

1.1.1	Этапы развития квантовой химии и перспективы ее применения для решения химических задач, современное программное обеспечение квантовохимических расчетов. /Лек/	6	2	З, Ко, Т
1.1.2	Теории строения атомов, введение в понятия квантовой химии. /Пр/	6	4	З, Ко
1.1.3	Подготовка к текущему контролю успеваемости /Ср/	6	2	З, Ко, К
1.1.4	Подготовка к практическому занятию. /Ср/	6	4	З, Ко
1.1.5	Выполнение контрольной работы. /Контр.раб./	6	2	З, Кр
1.2	Строение атома с точки зрения квантовомеханической теории. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Водородоподобный атом. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали (АО). Квантовые числа, их физический смысл. /Тема/	6	0	
1.2.1	Строение атома с точки зрения квантовомеханической теории. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Водородоподобный атом. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали (АО). Квантовые числа, их физический смысл. /Лек/	6	4	З, Ко, Т
1.2.2	Знакомство с компьютерной программой HyperChem. Графическое построение и редактирование химических структур. /Лаб/	6	4	З, Ко
1.2.3	Подготовка к текущему контролю успеваемости /Ср/	6	2	З, Ко, К
1.2.4	Подготовка к лабораторному занятию. /Ср/	6	2	З, Ко
1.2.5	Выполнение контрольной работы. /Контр.раб./	6	2	З, Кр
1.3	Спин электрона. Принцип Паули. Электронные конфигурации атомов. /Тема/	6	0	
1.3.1	Спин электрона. Принцип Паули. Электронные конфигурации атомов. /Лек/	6	2	З, Ко, Т
1.3.2	Оптимизация геометрии молекул, определение распределения эффективных атомных зарядов и пространственной формы граничных орбиталей. /Лаб/	6	4	З, Ко
1.3.3	Подготовка к текущему контролю успеваемости. /Ср/	6	2	З, Ко, К
1.3.4	Подготовка к лабораторному занятию. /Ср/	6	2	З, Ко
1.3.5	Выполнение контрольной работы. /Контр.раб./	6	2	З, Кр
1.4	Теории образования связей. Основные характеристики химической связи. Теория Гейтлера и Лондона. Теория валентных связей. Метод молекулярных орбиталей. Метод линейной комбинации атомных орбиталей. Типы молекулярных орбиталей. Молекулярно-орбитальные диаграммы. /Тема/	6	0	
1.4.1	Теории образования связей. Основные характеристики химической связи. Теория Гейтлера и Лондона. Теория валентных связей. Метод молекулярных орбиталей. Метод линейной комбинации атомных орбиталей. Типы молекулярных орбиталей. Молекулярно-орбитальные диаграммы. /Лек/	6	6	З, Ко, Т
1.4.2	Исследование межмолекулярного взаимодействия /Лаб/	6	4	З, Ко
1.4.3	Принцип Паули, электронные конфигурации атомов. /Пр/	6	4	З, Ко
1.4.4	Подготовка к текущему контролю успеваемости /Ср/	6	2	З, Ко, К
1.4.5	Подготовка к практическому занятию. /Ср/	6	4	З, Ко
1.4.6	Выполнение контрольной работы. /Контр.раб./	6	2	З, Кр
1.4.7	Подготовка к тестированию /Ср/	6	6	З, Т
1.4.8	Подготовка к лабораторному занятию /Ср/	6	2	З, Ко
1.5	Приближенные методы в квантовой химии. Вариационный принцип. Теория возмущений. Атомные термы (термы Рассела-Саундерса). /Тема/	6	0	
1.5.1	Приближенные методы в квантовой химии. Вариационный принцип. Теория возмущений. Атомные термы (термы Рассела-Саундерса). /Лек/	6	2	З, Ко, Т
1.5.2	Моделирование поведения молекулы в водной среде /Лаб/	6	4	З, Ко
1.5.3	Выполнение контрольной работы /Контр.раб./	6	2	З, Кр
1.5.4	Подготовка к текущему контролю успеваемости /Ср/	6	2	З, Ко
1.5.5	Подготовка к лабораторному занятию /Ср/	6	2	З, Ко
1.6	Приближение Борна-Оппенгеймера. Одноэлектронное приближение, уравнение Хартри. Метод Хартри-Фока. /Тема/	6	0	
1.6.1	Приближение Борна-Оппенгеймера. Одноэлектронное приближение, уравнение Хартри. Метод Хартри-Фока. /Лек/	6	2	З, Ко, Т
1.6.2	Теория многоэлектронных систем. Метод Хартри-Фока. Метод молекулярных орбиталей. /Пр/	6	4	З, Ко

1.6.3	Выполнение контрольной работы /Контр.раб./	6	2	З, Кр
1.6.4	Подготовка к текущему контролю успеваемости /Ср/	6	2	З, Ко
1.6.5	Подготовка к тестированию /Ср/	6	6	З, Т
1.6.6	Подготовка к практическому занятию /Ср/	6	4	З, Ко
1.7	Метод Хартри-Фока-Рутаана. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока. Базисные наборы. Орбитали гауссовского типа GTO. Минимальные базисные наборы STO-kG. Дополнительные диффузные функции. Расчетные методы квантовой химии. Неэмпирические расчетные методы (ab initio) в квантовой химии. Основные этапы решения задачи в методах ab initio. Полуэмпирические методы квантовой химии (ПЭМ). Основные приближения полуэмпирических методов. /Тема/	6	0	
1.7.1	Метод Хартри-Фока-Рутаана. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока. Базисные наборы. Орбитали гауссовского типа GTO. Минимальные базисные наборы STO-kG. Дополнительные диффузные функции. Расчетные методы квантовой химии. Неэмпирические расчетные методы (ab initio) в квантовой химии. Основные этапы решения задачи в методах ab initio. Полуэмпирические методы квантовой химии (ПЭМ). Основные приближения полуэмпирических методов. /Лек/	6	6	З, Ко, Т
1.7.2	Конформационный анализ молекулярных систем /Лаб/	6	4	З, Ко
1.7.3	Исследование переходного состояния и расчет энергии активации химической реакции /Лаб/	6	4	З, Ко
1.7.4	Выполнение контрольной работы /Контр.раб./	6	3	З, Ко
1.7.5	Подготовка к текущему контролю успеваемости /Ср/	6	2	З, Ко
1.7.6	Подготовка к лабораторному занятию /Ср/	6	4	З, Ко
1.8	Проблема учета электронной корреляции. Теория функционала плотности. Поверхность потенциальной энергии молекул. Путь химической реакции. /Тема/	6	0	
1.8.1	Проблема учета электронной корреляции. Теория функционала плотности. Поверхность потенциальной энергии молекул. Путь химической реакции. /Лек/	6	4	З, Ко, Т
1.8.2	Квантовохимический анализ механизмов органических реакций в растворах Применение квантовохимических расчетов в молекулярной спектроскопии. /Пр/	6	4	З, Ко
1.8.3	Исследование колебательного спектра молекул. /Лаб/	6	4	З, Ко
1.8.4	Выполнение контрольной работы /Контр.раб./	6	2	З, Кр
1.8.5	Подготовка к текущему контролю успеваемости /Ср/	6	2	З, Ко
1.8.6	Подготовка к тестированию /Ср/	6	6	Зо, Т
1.8.7	Подготовка к лабораторному занятию /Ср/	6	2	З, Ко
1.8.8	Подготовка к практическому занятию /Ср/	6	4	З, Ко
1.9	Реакционная способность молекул и ионов. Переходное состояние на поверхности потенциальной энергии (ППЭ), индексы реакционной способности (ИРС). Понятие о скорости и механизме химической реакции. Константа скорости и энергия активации. /Тема/	6	0	
1.9.1	Реакционная способность молекул и ионов. Переходное состояние на поверхности потенциальной энергии (ППЭ), индексы реакционной способности (ИРС). Понятие о скорости и механизме химической реакции. Константа скорости и энергия активации. /Лек/	6	4	З, Ко, Т
1.9.2	Отчетное занятие. /Лаб/	6	4	З, Ко
1.9.3	Выполнение контрольной работы /Контр.раб./	6	2	З, Кр
1.9.4	Подготовка к текущему контролю успеваемости /Ср/	6	2	З, Ко
1.9.5	Подготовка к сдаче контрольной работы /Ср/	6	10.75	З, Кр
1.9.6	Подготовка к отчтету лабораторных работ /Ср/	6	4	З, Ко
2	**Раздел 2. Промежуточная аттестация**			
2.1	Зачет по дисциплине /Тема/	6	0	
2.1.1	Зачет /Зачёт/	6	0	З, Ко
2.1.2	Контактная работа с ППС /КоРа/	6	0.25	

Примечание. Формы контроля: Эк – экзамен, К- контрольная работа, Ко- контрольный опрос, Сз- семестровое задание, З-зачет, ОП-отчет по практике.

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Оценочные средства планируемых результатов обучения представлены в виде фондов оценочных средств (ФОС), разработанных в соответствии с локальным нормативным актом университета. ФОС может быть представлен в Приложении к рабочей программе.

1. Перечень компетенций, формируемых в результате освоения дисциплины:
ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов- тема 1.1-1.4.
ОПК-2: Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности - тема 1.1-1.4.

2. Показатели и критерии оценивания компетенций:

ОПК-1.15: контролируемые разделы - тема 1.1-1.4; оценочные средства - контрольный опрос, тест, контрольная работа, зачёт.
ОПК-2.20: контролируемые разделы - тема 1.1-1.4; оценочные средства - контрольный опрос, тест, контрольная работа, зачёт.
ОПК-2.21: контролируемые разделы - тема 1.1-1.4; оценочные средства - контрольный опрос, тест, контрольная работа, зачёт.
ОПК-2.22: контролируемые разделы - тема 1.1-1.4; оценочные средства - контрольный опрос,тест, контрольная работа, зачёт.

3. Описание шкал оценивания:

3.1. Оценочное средство - "Зачёт":
35 – 40 баллов: зачёт сдан на отлично (ответы на 80-100 % правильные);
25 – 34 балла: зачёт сдан на хорошем уровне (ответы на 70-79 % правильные);
15 – 24 балла: зачёт сдан на удовлетворительном уровне (ответы на 50 - 69 % правильные);
0 - 14 баллов: зачёт не сдан (ответы правильные менее, чем на 50 %).

3.2. Оценочное средство - "Контрольный опрос"*:
5,0 баллов если правильные ответы на поставленные вопросы в ходе отчета практической работы даны на 95 – 100 % вопросов
4,0 балла если правильные ответы на поставленные вопросы в ходе отчета практической работы даны на 60 – 94 % вопросов
3,0 балла если правильные ответы на поставленные вопросы в ходе отчета практической работы даны на 51 – 59 % вопросов
менее 3,0 баллов правильные ответы на поставленные вопросы в ходе отчета практической работы даны менее чем на 50 % включительно
*Примечание:Критерии и шкала оценивания за отчет одной выполненной лабораторной работы

3.3. Оценочное средство - «Контрольная работа»
18,0 – 20,0 баллов - студент полно осветил рассматриваемую проблематику, привел аргументы в пользу своих суждений, корректно использовал литературные источники, обосновал своё «видение» поставленной проблемы и пути её решения
16,0 – 18,0 баллов - студент в целом полно осветил рассматриваемую проблематику, привел аргументы в пользу своих суждений, допустив некоторые неточности и т.п.
14,0 – 16,0 баллов -студент допустил существенные неточности, изложил материал с ошибками, привёл, в основном отсканированные первоисточники без их анализа и своих суждений.
менее 14,0 баллов - студент не готов, не выполнил задание и т.п.

3.4. Оценочное средство «Тест»
5 баллов - тест выполнен на высоком уровне (правильные ответы даны на 90-100% вопросов)
3-4 балла - тест выполнен на среднем уровне (правильные ответы даны на 70-89% вопросов)
1-2 балла - тест выполнен на низком уровне (правильные ответы даны на 50-69% вопросов)
0 баллов - тест не зачтен (правильные ответы даны менее чем 50%)

4. Примеры типовых контрольных заданий по каждому оценочному средству и методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков, опыта деятельности.

4.1. Контрольная работа
Оценочное средство "Контрольная работа" - продукт самостоятельной работы студента, представляющий собой средство проверки умений применять знания для решения задач определенного типа по теме, разделу или дисциплине. Контрольная работа показывает навыки студента умения работать самостоятельно с методической и специализированной литературой по теме. Контрольная работа является одним из видов самостоятельной работы студентов, входит в учебный план дисциплины как обязательный элемент учебной деятельности и включает контрольные задания по изучаемым темам дисциплины. Вопросы для контрольной работы составляются преподавателем. Варианты выдаются преподавателем на первом занятии. Контрольная работа предполагает углубленное изучение одного из разделов курса и включает в себя

выполнение следующих задач:
1. Выполнение теоретического задания: знакомство студента со специальной литературой, его умение систематизировать источники, определять главное в современном состоянии изученности темы. При этом студент должен продемонстрировать: владение соответствующей терминологией и основными понятиями по дисциплине; умение выделить проблему и определить методы её решения, а также умение последовательно изложить сущность поставленного перед ним вопроса.
2. Выполнение практического задания.
ВАРИАНТЫ контрольной работы:
1) Задание по расчету электронных, спектральных и магнитных характеристик органических соединений (по заданию преподавателя) методами молекулярной механики и квантовой химии.
2) задание по квантовохимическому анализу при решении прикладной задачи в области химии и химической технологии (по заданию преподавателя)

Требования к выполнению: Авторский оригинал-макет должен быть набран и сверстан в текстовом редакторе Word. При наборе текста использовать следующие параметры: шрифт Таймс, размер 14; полуторный интервал; поля следующих размеров: верхнее - 2,0 см, нижнее - 2,0 см, левое - 2,5 см, правое - 1,0 см. Для нумерации страниц использовать положение внизу страницы, посередине, нумерацию текста начинать от титульного листа (обложку не нумеровать); автоматическая расстановка переносов, ширина зоны переноса 0,25 см с ограничением 3-х переносов подряд; для выравнивания правого края страницы текст разверстывать по ширине печатного поля. Нумерация пояснительной записки сквозная, проставляемая арабскими цифрами в центре нижней части листа без точки. В нумерацию записки включают так же приложения, если они имеются. На титульном листе и задании номер страницы не ставят, но включают в общую нумерацию страниц. Опечатки, описки и графические неточности допускается исправлять подчисткой или закрашиванием белой краской. Рекомендуемый объем – 20-25 стр.

4.2 Контрольный опрос
Оценочное средство - "Контрольный опрос" - средство текущего контроля усвоения учебного материала студентом, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимися на вопросы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выявление объема знаний, обучающихся по определенному разделу после выполнения им лабораторных работ. Примерные контрольные вопросы в зависимости от выполняемой работы на лабораторном занятии:
1. Какие методы расчета энергетических, геометрических и электронных параметров молекулярных систем применяются в программе HyperChem?
2. На чем основан метод молекулярной механики?
3. Назовите основные полуэмпирические методы, используемые в программе HyperChem? Кратко их охарактеризуйте.
4. Раскройте смысл концепции атомного заряда.
5. Что такое дипольный момент молекулы, и как он связан с атомными зарядами?
6. Что такое молекулярная орбиталь?
7. Какие свойства молекулы можно определить из анализа МО?
8. Дайте характеристику водородной связи.
9. Воспроизведите порядок исследования образования и расчета энергии водородной связи в водно-молекулярном димере.
10. Раскройте роль водного окружения в стабилизации молекул растворенного вещества и их взаимодействиях. Какие взаимодействия называются гидрофильными, а какие – гидрофобными?
11. Опишите процедуру определения размеров водного бокса.
12. Дайте определение конформации молекул.
13. В чем заключается отличие конформации и конфигурации молекул.
14. Воспроизведите порядок конформационного анализа молекул с помощью программного комплекса HyperChem.
15. Охарактеризуйте понятие «активированный комплекс».

4.3. Оценочное средство «Тест»
Система стандартизированных заданий, позволяющая автоматизировать процедуру измерения уровня знаний и умений обучающегося, проводится на практическом занятии и включает вопросы, изучаемые на данном этапе. Время выполнения – 10-15 мин.
Примеры тестовых заданий, используемых на практических занятиях:
1. Что представляют собой «подструктуры» молекулы, которые оптимальны для содержательного описания их электронной структуры?
а) Молекулы состоят из функциональных групп, соединенных связями;
б) Молекулы состоят из связей, неподеленных пар и делокализованных электронных структур;
в) Молекулы состоят из ядер и электронов;
г) Молекулы состоят из комбинаций элементарных частиц.

2. Для описания движения микрочастиц лучше всего подходит:
а) классическая механика Ньютона;
б) релятивистская механика Эйнштейна;
в) квантовая механика;
г) квантовая электродинамика.

3. Что значит «квант»?
а) неделимая порция чего-либо в физике;
б) атом водорода;

в) электрон;
г) любая наносистема.

4. Расположите модели строения атомов в хронологическом порядке:
а) Модель по Бору;
б) Модель Томпсона;
в) Модель Резерфорда;
г) Волновая модель

5. Согласно модели Резерфорда
а) радиус орбиты электрона постоянно уменьшается и электрон должен был просто «упасть» на ядро;
б) радиус орбиты электрона постоянно увеличивается и электрон должен был просто «покинуть» атом;
в) электрон постоянно остается на орбите за счет равнодействующей сил притяжения и центробежной силы.

6. Что предложил Бор по отношению к планетарной модели строения атомов?
а) выделить некоторые орбиты, разрешенные для движения электрона;
б) предложил использовать постоянную Больцмана для расчета траектории движения электронов;
в) электрон может произвольно изменять орбиту движения в зависимости от энергетического поля;
г) возможно «падение» электрона на ядро.

4.4. Зачет

Изучение дисциплины заканчивается сдачей студентом зачета. Зачет проводится устно в виде собеседования по вопросам, составленным на основе вопросов к разделам изучаемой дисциплины. Зачет по дисциплине может проводиться в одной из двух форм – очной или дистанционной. Независимо от формы проведения, зачёт включает предварительную часть и окончательное собеседование. При проведении зачёта студенту выдаётся 2 вопроса из приведённого ниже перечня. На протяжении 30 минут студент кратко (конспективно) излагает в письменной форме ответы на вопросы. После написания ответа проходит собеседование, в ходе которого преподаватель уточняет отдельные элементы ответа и делает вывод о степени сформированности компетенций студента.
Примеры вопросов, выносимых на зачет по дисциплине «Основы кваниовохимического анализа»:
1. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории.
2. Общие сведения о современном программном обеспечении квантовохимических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы (HyperChem, MOPAC, Gaussian, Gamess и т.д.).
3. Основы квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Операторы, их свойства.
4. Постулаты квантовой механики.
5. Волновые функции, их свойства.
6. Уравнение Шредингера. Точно решаемые задачи квантовой механики. Решение уравнения Шредингера для водородоподобных атомов.
7. Атомные орбитали. Квантовые числа, их физический смысл.
8. Многоэлектронные атомы. Учет межэлектронного взаимодействия. Квантовые числа многоэлектронного атома.
9. Переходы под влиянием электромагнитного излучения.
10. Приближенные методы решения квантовомеханических задач.
11. Основные положения квантовой химии.
12. Молекулярное уравнение Шредингера и общая классификация подходов к его решению.
13. Адиабатическое приближение. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа.
14. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока.
15. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).
16. Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа.
17. Метод ССП МО ЛКАО.
18. Расчетные методы квантовой химии. Неэмпирические (ab initio) методы расчета в квантовой химии. Основные этапы решения задачи в методах ab initio.
19. Расчет молекулярных систем на основе уравнения Хартри-Фока-Рутаана. Преимущества и недостатки неэмпирических методов.
20. Комплекс неэмпирических расчетов в программе HyperChem.
21. Полуэмпирические методы квантовой химии. Основные приближения полуэмпирических методов.
22. Метод CNDO. Метод INDO, расчет возбужденных состояний молекул. Методы MINDO, их модификации. Метод MNDO, приближение нулевого двухатомного дифференциального перекрывания. Методы AM1 и PM3.
23. Квантовохимическое описание химических реакций. Реакционная способность молекул и ионов.
24. Переходное состояние на поверхности потенциальной энергии (ППЭ), индексы реакционной способности (ИРС).
25. Понятие о скорости и механизме химической реакции. Константа скорости и энергия активации.
16. Каталитические реакции. Факторы, определяющие скорость и селективность гомогенных и гетерогенных каталитических процессов.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ, ПРАКТИКИ)

6.1. Рекомендуемая литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год.	Электронный адрес
Л.1	Стромберг А. Г., Семченко Д. П.	Физическая химия: учеб. для студ. вузов	М.: Высш. шк., 1999	
Л.2	Степанов Н. Ф., Пупышев В. И.	Квантовая механика молекул и квантовая химия: учеб. пособие для хим. спец. вузов	М.: Изд-во МГУ, 1991	
Л.3	Степанов Н. Ф.	Квантовая механика и квантовая химия: учеб. для студ. вузов	Москва: Мир, 2001	
Л.4	Барановский В. И.	Методы расчета электронной структуры атомов и молекул	Ленинград: Изд-во ЛГУ, 1976	
Л.5	Барановский В. И.	Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие	Санкт-Петербург: Лань, 2017	https://e.lanbook.com/book/92941#book

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Курс в ЭИОС

6.3 Перечень программного обеспечения

6.3.1.1	Оперционная система Windows
6.3.1.2	HyperChem 8.0 - комплексный программный продукт, предназначенный для задач молекулярного моделирования.
6.3.1.3	СДО "Moodle" - система дистанционного образования
6.3.1.4	Adobe Acrobat Reader DC - бесплатное решение для просмотра pdf файлов
6.3.1.5	LibreOffice - бесплатный свободно распространяемый кросс-платформенный офисный пакет для работы с документами, построения графиков и подготовки презентаций
6.3.1.6	ACD/ChemSketch freeware — бесплатная версия химического редактора
6.3.1.7	Foxit PDF Reader - бесплатный просмотрщик pdf-файлов

6.4 Перечень информационных справочных систем и электронных библиотечных систем (ЭБС)

6.3.2.1	Оперционная система Windows
6.3.2.2	СДО "Moodle" - система дистанционного образования
6.3.2.3	Adobe Acrobat Reader DC - бесплатное решение для просмотра pdf файлов
6.3.2.4	LibreOffice - бесплатный свободно распространяемый кросс-платформенный офисный пакет для работы с документами, построения графиков и подготовки презентаций
6.3.2.5	ACD/ChemSketch freeware — бесплатная версия химического редактора
6.3.2.6	Foxit PDF Reader - бесплатный просмотрщик pdf-файлов

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ, ПРАКТИКИ) /ОБОРУДОВАНИЕ

7.1	Мультимедийная учебная аудитория для проведения занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации: учебная доска, учебная мебель, интерактивная трибуна, видеопроектор, Интернет, компьютеры.
7.2	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся: учебная мебель, компьютерная техника с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета (читальный зал информационно-библиотечного центра).

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ, ПРАКТИКИ)

Организация образовательного процесса по данной дисциплине регламентируется учебным планом и расписанием учебных занятий. При формировании своей индивидуальной образовательной траектории обучающийся имеет право на перезачет дисциплины (переаттестации ее части), если она была освоена в процессе предшествующего обучения. Перезачёт (переаттестации ее части) освобождает обучающегося от необходимости повторного освоения дисциплины (полностью или частично).

Учебный процесс при преподавании курса основывается на использовании традиционных, инновационных и информационных образовательных технологий. Традиционные образовательные технологии представлены лекциями и практическими занятиями. Инновационные образовательные технологии используются в виде широкого применения активных и интерактивных форм проведения занятий. Информационные образовательные технологии реализуются путем активизации самостоятельной работы студентов в электронной информационной образовательной среде.

Перечень методических указаний по освоению дисциплин:

1. Основы квантовохимического анализа: методические указания к лабораторным работам, часть 1 / Сост. Климов В.В., Алейникова Т.П, Козловцев В.А. / Волгоград. гос. тех. ун-т. Волгоград, 2017. – 32 с.
2. Основы квантовохимического анализа: методические указания к лабораторным работам, часть 2 / Сост. Климов В.В., Алейникова Т.П, Козловцев В.А. / Волгоград. гос. тех. ун-т. Волгоград, 2017. – 20 с.

Методические рекомендации по обучению лиц с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов.

Профессорско-педагогический состав знакомится с психолого-физиологическими особенностями обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ), индивидуальными программами реабилитации инвалидов (при наличии). При необходимости осуществляется дополнительная поддержка преподавания тьюторами, психологами,

социальными работниками, прошедшими подготовку ассистентами.
В соответствии с методическими рекомендациями Минобрнауки РФ (утв. 8 апреля 2014 г. N АК-44/05вн), в курсе предполагается использовать социально-активные и рефлексивные методы обучения, технологии социокультурной реабилитации с целью оказания помощи в установлении полноценных межличностных отношений с другими студентами, создании комфортного психологического климата в студенческой группе. Подбор и разработка учебных материалов производятся с учетом предоставления материала в различных формах: аудиальной, визуальной, с использованием специальных технических средств и информационных систем.
Освоение дисциплины лицами с ОВЗ осуществляется с использованием средств обучения общего и специального назначения (персонального и коллективного использования). Материально-техническое обеспечение предусматривает приспособление аудиторий к нуждам лиц с ОВЗ (при необходимости).
Форма проведения аттестации для студентов-инвалидов устанавливается с учетом индивидуальных психофизических особенностей. Для студентов с ОВЗ предусматривается доступная форма предоставления заданий оценочных средств. Студентам с инвалидностью увеличивается время на подготовку ответов на контрольные вопросы. Для таких студентов предусматривается доступная форма предоставления ответов на задания.
При необходимости для обучающихся с инвалидностью процедура оценивания результатов обучения может проводиться в несколько этапов.