

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:  
на заседании кафедры  
протокол № 8 от «07» июня 2017 г.  
Зав. кафедрой Мустафин А.Г.

Согласовано:  
Председатель УМК химического факультета  
Гарифуллина Г.Г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

дисциплина Избранные главы квантовой химии (на английском языке)

Факультативы, вариативная часть ФТД.В.03

**программа бакалавриата**

Направление подготовки (специальность).  
04.03.01. Химия

Направленность (профиль) подготовки  
Физическая химия с углубленным изучением английского языка

Квалификация  
бакалавр

Разработчик (составитель) <u>профессор, д.х.н., доцент</u> (должность, ученая степень, ученое звание)	<u>Хайруллина В.Р.</u> (подпись, Фамилия И.О.)
---	---

Для приема: 2017 г.

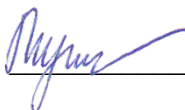
Уфа 2017 г.

Составитель: Хайруллина В.Р.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 8 от «07» июня 2017 г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины (обновлены перечень основной и дополнительной литературы и лицензионное программное обеспечение, необходимое для освоения дисциплины), приняты на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 11 от 01.06.2018 г.

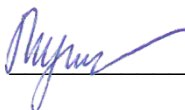
Заведующий кафедрой



/ Мустафин А.Г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины (обновлены перечень основной и дополнительной литературы и лицензионное программное обеспечение, необходимое для освоения дисциплины), приняты на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 6 от 22.04.2019 г.

Заведующий кафедрой



/ Мустафин А.Г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_,  
протокол № \_\_\_\_ от « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_ г.

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_/ \_\_\_\_\_ Ф.И.О./

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_,  
протокол № \_\_\_\_ от « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_ г.

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_/ \_\_\_\_\_ Ф.И.О./

### Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Цели и место дисциплины в структуре образовательной программы	5
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	5
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	6
4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	6
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	11
4.3. Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)	12
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	20
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	20
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	21
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	21

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Результаты обучения		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Примечание
Знания	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	ОПК-1 способность использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	
	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ОПК-2 Владение основными навыками экспериментальной работы в профессиональной сфере деятельности с соблюдением норм техники безопасности	
	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ПК-2 Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
	Знать: основные этапы и закономерности формирования фундаментальных химических понятий	ПК-3 Владение системой фундаментальных химических понятий.	
	Знать: - основные этапы развития химии; - научные достижения наиболее выдающихся отечественных и зарубежных химиков, их вклад в развитие химии.	ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	
Умения	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	ОПК-1 способность использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	
	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам		
	Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	ОПК-2 Владение основными навыками экспериментальной работы в профессиональной сфере деятельности с соблюдением норм техники безопасности	
	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	ПК-2 Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
	Уметь: Применять основные фундаментальные химические понятия	ПК-3 Владение системой фундаментальных химических понятий.	
Уметь: оценивать химические понятия и законы в сложной системе воззрений современной химии	ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития		

		химической науки при анализе полученных результатов	
Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	ОПК-1 способность использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	
	Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	ОПК-2 Владение основными навыками экспериментальной работы в профессиональной сфере деятельности с соблюдением норм техники безопасности	
	Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-2 Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
	Владеть системой базовых фундаментальных химических понятий	ПК-3 Владение системой фундаментальных химических понятий	
	Владеть: навыками обязательного ознакомления с предысторией того или иного вопроса поставленного в его практической научной и педагогической деятельности.	ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Избранные главы квантовой химии (на английском языке)» относится к вариативной части факультатива.

Дисциплина изучается на 3\_курсе в 6 семестре.

Целями освоения дисциплины является подготовить студентов к пониманию языка современной квантовой химии, а также к самостоятельным компьютерным вычислениям электронного строения, пространственной структуры и физико-химических свойств различных молекулярных систем.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин: «Физика», «Математика», «Строение вещества», «Численные методы и программирование», «Персональные компьютеры в химии» «Информатика», «Общая химия», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия».

## 3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 3.1.

#### 4. Фонд оценочных средств по дисциплине

##### 4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции

ОПК-1 способностью использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	Не знает	Имеет представление о содержании основных учебных курсов по химии, знает терминологию, основные законы и понимает сущность общих закономерностей, изучаемых в рамках базовых химических дисциплин
Второй этап (уровень)	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	Не умеет	Умеет составлять схемы процессов с использованием знаний основных химических дисциплин, но допускает отдельные неточности при формулировке условий осуществления таких процессов
	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам	Не умеет	Умеет решать комбинированные задачи из базовых курсов химии
Третий этап	Владеть:	Не владеет	Владеет навыками самостоятельного изучения

(уровень)	навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам		отдельных разделов учебной литературы по основным химическим дисциплинам и обсуждения освоенного материала
-----------	--	--	--

ОПК-2 Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	1. Знать основные приемы и методы разработки специализированных программ для решения задач в области химии и материаловедения	Не знает	Знает стандартные приемы, используемые при разработке специализированных программ поиска, систематизации и обработки экспериментальных данных
	2. Знать основные требования к представлению результатов работ в профессиональной сфере деятельности	Не знает	Знает требования к формату представления информации в виде научной публикации (статья или тезисы доклада на конференции)
Второй этап (уровень)	1. Уметь модернизировать стандартные и разрабатывать специализированные программы для решения задач профессиональной сферы деятельности	Не умеет	Умеет разрабатывать специализированные программы для решения профессиональных задач и создавать программные продукты с удобным пользовательским интерфейсом
	2. Уметь использовать информационно-коммуникационные и компьютерные технологии для представления результатов профессиональной деятельности	Не умеет	Умеет самостоятельно использовать информационно-коммуникационные и компьютерные технологии для представления результатов профессиональной деятельности

Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками разработки специализированных программ для решения задач профессиональной сферы деятельности	Не владеет	Владеет основными навыками и имеет опыт разработки специализированных программ для решения конкретных задач профессиональной сферы деятельности
	2. Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений	Не владеет	Имеет опыт представления результатов деятельности профессиональному сообществу (является соавтором статей, тезисов докладов и пр.)

ПК-2 Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Не знает	Знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований и исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила ТБ при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента, но допускает отдельные неточности
Второй этап (уровень)	Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Не умеет	Умеет проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры; осуществляет идентификацию и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента с небольшим количеством замечаний



Третий этап (уровень)	Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Не владеет	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и изучения свойств отдельных классов веществ (материалов), правильного протоколирования опытов
-----------------------	--	------------	--

ПК-3 владение системой фундаментальных химических понятий

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: основные этапы и закономерности формирования фундаментальных химических понятий	Не знает	Сформированные представления об основных этапах и закономерностях формирования фундаментальных химических понятий. Допускаются отдельные пробелы
Второй этап (уровень)	Уметь: Применять основные фундаментальные химические понятия	Не умеет	В целом успешное применение основных фундаментальных химических понятий
Третий этап (уровень)	Владеть системой базовых фундаментальных химических понятий	Не владеет	В целом успешное применение фундаментальных химических понятий. Допускаются отдельные пробелы

ПК-4 Способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено

Первый этап (уровень)	1. Знать научную новизну, актуальность, практическую значимость исследования; знать организации или предприятия, которым интересны полученные результаты или по заказу которых проводятся исследования	Не знает	Представляет актуальность и научную новизну; знает организации заинтересованные в полученных результатах
	2. Знать основные зарубежные журналы, в которых публикуются статьи, связанные с тематикой исследований. Правила представления результатов исследования при публикации в иностранных журналах	Не знает	Выбирает научные журналы подходящие по тематике для публикации материалов исследования. Знает правила представления результатов исследования
Второй этап (уровень)	1. Уметь доказывать использование выбранной траектории исследования, аргументировано доказать свою точку зрения	Не умеет	Аргументировано обосновывает основные этапы исследования выбор методов и достоверность результатов.
	2. Уметь грамотно и четко отвечать на вопросы при выступлении с устными сообщениями на конференциях различного уровня	Не умеет	Свободно отвечает на вопросы при общении с аудиторией различного уровня.
Третий этап (уровень)	1. Владеть навыками участия в научной дискуссии, применяя разносторонние знания о специфике предприятия (исследовательского института, фирмы и т.д.), в котором студент проводит научные исследования	Не владеет	Свободно применяет специфические химические термины и знания в научной дискуссии
	2. Владеть навыками делового письма при общении (например, посредством электронной почты) с редакциями химических журналов (в т.ч. и с иностранными)	Не владеет	Ведет переписку с редакцией научного журнала. Способен отвечать на замечания рецензента

**4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

Этапы освоения	Результаты обучения	Компетенция	Оценочные средства
1-й этап  Знания	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	ОПК-1 способность использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ОПК-2 Владение основными навыками экспериментальной работы в профессиональной сфере деятельности с соблюдением норм техники безопасности	
	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ПК-2 Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
	Знать: основные этапы и закономерности формирования фундаментальных химических понятий	ПК-3 Владение системой фундаментальных химических понятий.	
	Знать: - основные этапы развития химии; - научные достижения наиболее выдающихся отечественных и зарубежных химиков, их вклад в развитие химии.	ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	
2-й этап  Умения	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин Уметь: решать типовые учебные	ОПК-1 способность использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет

	задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам		
	Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	ОПК-2 Владение основными навыками экспериментальной работы в профессиональной сфере деятельности с соблюдением норм техники безопасности	
	Уметь: Применять основные фундаментальные химические понятия	ПК-3 Владение системой фундаментальных химических понятий.	
	Уметь: - оценивать химические понятия и законы в сложной системе воззрений современной химии	ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	
3-й этап	Владеть навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	ОПК-1 способность использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
Владеть навыками	Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	ОПК-2 Владение основными навыками экспериментальной работы в профессиональной сфере деятельности с соблюдением норм техники безопасности	
	Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-2 Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
	Владеть системой базовых фундаментальных химических понятий	ПК-3 Владение системой фундаментальных химических понятий	
	Владеть: навыками обязательного ознакомления с предысторией того или иного вопроса, поставленного в его практической научной и педагогической деятельности.	ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	

#### 4.3. Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг–план дисциплины представлен в приложении 3.2.

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины),

перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),

не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов.

### **Вопросы к зачету**

1. Уравнение Планка. Кванты. Фотоны.
2. Фотоэффект (законы Столетова и уравнение Эйнштейна). Фотоэлектронная спектроскопия.
3. Эффект Комптона.
4. Спектр атома водорода. Уравнения Бальмера и Ридберга.
5. Теория строения атома Н. Бора. Расчет скорости движения, энергии и радиуса орбиты электрона.
6. Уравнение Луи де Бройля. Волновые свойства микрочастиц.
7. Принцип неопределенности Гейзенберга.
8. Волновая функция и ее свойства.
9. Операторы. Свойства операторов.
10. Операторы основных физических величин.
11. Расчет средних значений.
12. Движение частицы в одномерном потенциальном ящике.
13. Одномерный жесткий ротатор.
14. Гармонический осциллятор.
15. Движение частицы в одномерном потенциальном ящике

### **Критерии оценки (в баллах)**

- 0 баллов (не зачтено) выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 1-3 балла (не зачтено) выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 4-5 баллов (не зачтено) выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 6-7 баллов (зачтено) выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 8-9 баллов (зачтено) выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом разделе дисциплины.

## **П Л А Н**

### **практических занятий**

по дисциплине Избранные главы квантовой химии

Занятие 1. Уравнение Планка. Кванты. Фотоны. Фотоэффект (законы Столетова и уравнение Эйнштейна). Фотоэлектронная спектроскопия. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.

Занятие 2. Эффект Комптона. Спектр атома водорода. Уравнения Бальмера и Ридберга. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.

Занятие 3. Теория строения атома Н. Бора. Расчет скорости движения, энергии и радиуса орбиты электрона. Уравнение Луи де Бройля. Волновые свойства микрочастиц.

Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.

Занятие 4. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновая функция и ее свойства. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.

Занятие 5. Свойства операторов. Операторы основных физических величин. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.

Занятие 6. Расчет средних значений. Движение частицы в одномерном потенциальном ящике. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.

Занятие 7. Одномерный жесткий ротатор. Гармонический осциллятор. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.

Занятие 8.. Движение частицы в одномерном потенциальном ящике. Решение типовых задач по соответствующей теме. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.

### Темы рефератов и докладов

1. Введение в квантовую химию. (Подсказка: см. <https://www.msg.chem.iastate.edu/tutorials/tutorials.html>).
2. От Шредингера до Хартри-Фока (Подсказка: см. <https://www.msg.chem.iastate.edu/tutorials/tutorials.html>).
3. Базисные наборы и псевдопотенциалы в квантовой химии. (Подсказка: см. <https://www.msg.chem.iastate.edu/tutorials/tutorials.html>).
4. Знакомство с программным пакетом Firefly (GAMESS). (Подсказка: см. <https://www.msg.chem.iastate.edu/tutorials/gamessintro.pdf>).
5. Знакомство с программным пакетом GAUSSIAN.
6. Построение молекул в программном пакете GAUSSIAN. (Подсказка: см. <https://www.youtube.com/watch?v=dqKWfXsEcWs>).
7. Запуск расчетов в программном пакете GAUSSIAN. (Подсказка: см. <https://www.youtube.com/watch?v=17QpHFoQKMM>).
8. Визуализация результатов в программном пакете GAUSSIAN. (Подсказка: см. <https://www.youtube.com/channel/UCAR-pk6675HSiNyZKN9cfqA/featured>).
9. Обзор настройки расчета в программном пакете GAUSSIAN. (Подсказка: см. <https://www.youtube.com/watch?v=7F2JMfOvjmw>).
10. Выбор молекул в GaussView 6. (Подсказка: см. <https://www.youtube.com/watch?v=WrM-U8esioc>).
11. Знакомство с программным пакетом HyperChem. (Подсказка: см. <http://www.hyper.com>).
12. Знакомство с пакетом MOPAC ((Подсказка: см. <http://openmopac.net/>).
13. Программные пакеты для выполнения квантово-химических расчетов. (Подсказка: см. <https://studfiles.net/preview/584031/>).
14. Знакомство с программным пакетом Priroda. (Подсказка: см. <https://istina.msu.ru/publications/article/1299180/>; <http://www.rc.chem.msu.ru/~laikov/>).
15. Вычислительные возможности и перспективы современной квантовой химии.
16. Основные постулаты квантовой механики.
17. Теория функционала плотности в решении химических задач.
18. Построение молекул с использованием Z-матриц.

### Общие требования к написанию рефератов

Написание реферата следует начать с изложения плана темы, который как минимум включает 3 пункта. План должен быть логично изложен и должен включать в себя введение и заключение.

Реферат завершается списком использованной литературы.

Задачи студента при написании реферата заключаются в следующем:

1. логично и по существу изложить вопросы плана;
2. четко сформировать мысли, последовательно и ясно изложить материал, правильно использовать термины и понятия;
3. показать умение применять теоретические знания на практике;
4. показать знание материала, рекомендованного по теме;
5. использовать для экономического обоснования необходимый статистический материал.

Реферат оценивается преподавателем кафедры по следующим критериям.

Объем реферата должен быть не менее 12-18 стр. машинописного текста (аналог – компьютерный текст Time New Roman, размер шрифта 14 через полтора интервала), включая титульный лист.

При оценке уровня выполнения реферата, в соответствии с поставленными целями для данного вида учебной деятельности, могут контролироваться следующие умения, навыки и компетенции:

- умение работать с объектами изучения, критическими источниками, справочной и энциклопедической литературой;
- умение собирать и систематизировать практический материал;
- умение самостоятельно осмысливать проблему на основе существующих методик;
- умение логично и грамотно излагать собственные умозаключения и выводы;
- умение соблюдать форму научного исследования;
- умение пользоваться глобальными информационными ресурсами;
- владение современными средствами телекоммуникаций;
- способность и готовность к использованию основных прикладных программных средств;
- способность создать содержательную презентацию выполненной работы.

Написание реферата следует начать с изложения плана темы, который как минимум включает 3 пункта. План должен быть логично изложен и должен включать в себя введение и заключение.

Реферат завершается списком использованной литературы.

Задачи студента при написании реферата заключаются в следующем:

1. логично и по существу изложить вопросы плана;
2. четко сформировать мысли, последовательно и ясно изложить материал, правильно использовать термины и понятия;
3. показать умение применять теоретические знания на практике;
4. показать знание материала, рекомендованного по теме;
5. использовать для экономического обоснования необходимый статистический материал.

Реферат оценивается преподавателем кафедры по следующим критериям.

Объем реферата должен быть не менее 12-18 стр. машинописного текста (аналог – компьютерный текст Time New Roman, размер шрифта 14 через полтора интервала), включая титульный лист.

При оценке уровня выполнения реферата, в соответствии с поставленными целями для данного вида учебной деятельности, могут контролироваться следующие умения, навыки и компетенции:

- умение работать с объектами изучения, критическими источниками, справочной и энциклопедической литературой;
- умение собирать и систематизировать практический материал;
- умение самостоятельно осмысливать проблему на основе существующих методик;
- умение логично и грамотно излагать собственные умозаключения и выводы;
- умение соблюдать форму научного исследования;
- умение пользоваться глобальными информационными ресурсами;
- владение современными средствами телекоммуникаций;
- способность и готовность к использованию основных прикладных программных средств;
- способность создать содержательную презентацию выполненной работы.

### Критерии оценки рефератов (в баллах)

**5 балла ставится**, если выполнены все требования к написанию и защите реферата: обозначена проблема и обоснована её актуальность, сделан краткий анализ различных точек зрения на рассматриваемую проблему и логично изложена собственная позиция, сформулированы выводы, тема раскрыта полностью, выдержан объём, соблюдены требования к внешнему оформлению, даны правильные ответы на дополнительные вопросы.

**4 балла** – основные требования к реферату и его защите выполнены, но при этом допущены недочёты. В частности, имеются неточности в изложении материала; отсутствует логическая последовательность в суждениях; не выдержан объём реферата; имеются упущения в оформлении; на дополнительные вопросы при защите даны неполные ответы.

**3 балла** – имеются существенные отступления от требований к реферированию. В частности: тема освещена лишь частично; допущены фактические ошибки в содержании реферата или при ответе на дополнительные вопросы; во время защиты отсутствует вывод.

**2 баллов** – тема реферата не раскрыта, обнаруживается существенное непонимание проблемы;

**1 балл** – студент не понимает сути проблемы

**0 баллов** – реферат выпускником не представлен.

### Критерии оценки (в баллах) выступления с докладом

Критерий	Количество баллов			
	2	3	4	5
Качество доклада	Доклад зачитывает	Доклад рассказывает, но не объяснена суть работы	Чётко выстроен доклад, владеет иллюстративным материалом	Доклад производит выдающееся впечатление
Качество ответов на вопросы	Не может ответить ни на один вопрос	Не может чётко ответить на вопросы	Не может ответить на большинство вопросов	Отвечает на большинство вопросов
Использование демонстрационного материала	Демонстрационный материал отсутствует	Представленный демонстрационный материал не использовался докладчиком	Демонстрационный материал использовался в докладе	Автор предоставил демонстрационный материал и прекрасно в нём ориентировался
Оформление демонстрационного материала	Демонстрационный материал отсутствует	Представлен плохо оформленный демонстрационный	Демонстрационный материал хорошо оформлен, но	К демонстрационному материалу нет претензий



		ый материал	есть неточности	
. Владение автором научным и специальным аппаратом	Автор слабо владеет базовым аппаратом	Автор владеет базовым аппаратом	Использованы общенаучные и специальные термины	Показано владение специальным аппаратом
Чёткость выводов, обобщающих доклад	Автор не сделал выводов	Выводы имеются, но они не доказаны	Выводы нечёткие	Выводы полностью характеризуют работу

В течение семестра студент должен решить по одной задаче из пяти разделов (итого – 5 задач).

### **Комплект типовых задач (заданий)** по дисциплине Избранные главы квантовой химии

#### **Раздел 1.**

Задание 1. Вычислите кинетическую энергию, импульс и дебройлеву длину волны пули массой 10 г, движущейся со скоростью 500 м/с.

Задание 2. Вычислите кинетическую энергию, импульс и дебройлеву длину волны черепахи массой 1 кг, движущейся со скоростью 1 см/с.

Задание 3. Вычислите кинетическую энергию, импульс и дебройлеву длину волны человека массой 70 кг, движущегося со скоростью 2 м/с.

Задание 4. Вычислите кинетическую энергию, импульс и дебройлеву длину волны самолета массой 5000 кг, движущегося со скоростью 100 м/с.

Задание 5. Вычислите кинетическую энергию, импульс и дебройлеву длину волны электрона, движущегося со скоростью  $7 \cdot 10^6$  см/с.

Задание 6. Вычислите кинетическую энергию, импульс и дебройлеву длину волны электрона, движущегося со скоростью  $2 \cdot 10^{10}$  см/с.

Задание 7. Вычислите кинетическую энергию, импульс и дебройлеву длину волны нейтрона, движущегося со скоростью  $1 \cdot 10^7$  см/с.

#### **Раздел 2.**

Задание 1. Определите длину волны спектральной линии, соответствующей переходу электрона в атоме водорода с шестой боровской орбиты на вторую. К какой серии относится эта линия и какая она по счету?

Задание 2. Максимальная длина волны спектральной водородной линии серии Лаймана равна 0,12 мкм. Предполагая, что постоянная Ридберга неизвестна, определите максимальную длину волны линии серии Бальмера.

Задание 3. Определите длину волны  $\lambda$ , соответствующую второй спектральной линии в серии Пашена.

Задание 4. Определите максимальную и минимальную энергии фотона в видимой серии спектра водорода (серии Бальмера).

Задание 5. Определите энергию фотона, испускаемого при переходе электрона в атоме водорода с третьего энергетического уровня на второй.

Задание 6. Задание 5. Определите энергию фотона, испускаемого при переходе электрона в атоме водорода со второго энергетического уровня на первый.

Задание 7. Определите длины волн, соответствующие: 1) границе серии Лаймана; 2) границе серии Бальмера; 3) границе серии Пашена. Проанализируйте результаты.

#### **Раздел 3.**

Задание 1. Вычислите энергию ионизации атома водорода (I). Выразите энергию ионизации в электрон-вольтах.

Задание 2. Электрон ускоряется разностью потенциалов  $1,00 \pm 0,01$  кВ. Какова неопределенность положения электрона вдоль пути его движения?

Задание 3. Рассчитайте величину кванта, участвующего в возбуждении электронного движения с периодом  $10^{-15}$  с. Выразите результаты в кДж/моль.

Задание 4. Рассчитайте величину кванта, участвующего в возбуждении молекулярного колебания с периодом  $10^{-14}$  с. Выразите результаты в кДж/моль.

Задание 5. Рассчитайте величину кванта, участвующего в возбуждении колебания маятника с периодом 1с. Выразите результаты в кДж/моль.

Задание 6. Какова минимальная частота света, с помощью которого можно разорвать молекулярную связь с энергией  $100$  кДж·моль<sup>-1</sup>? Каков импульс фотона, имеющего данную частоту?

Задание 7. При длине волны падающего света 625 нм кинетическая энергия выбитых электронов равна 0,2 эВ; при 416 нм –1,2 эВ; при 312 нм –2,2 эВ. Рассчитайте работу выхода такого металла

#### Раздел 4.

Задание 1. Определите результаты действия операторов на функцию  $A = \partial/\partial x$ ,  $f(x) = \cos x$ .

Задание 2. Определите результаты действия операторов на функцию  $A = \partial/\partial x$ ,  $f(x) = \sin x$ .

Задание 3. Определите результаты действия операторов на функцию  $A = \partial/\partial x$ ,  $f(x) = \sin 5x$ .

Задание 4. Определите результаты действия операторов на функцию  $A = \partial/\partial x$ ,  $f(x) = \sin 0,2x$ .

Задание 5. Определите результаты действия операторов на функцию  $A = \partial^2/\partial x^2$ ,  $f(x) = e^{ax}$ .

Задание 6. Определите результаты действия операторов на функцию  $A = \partial^2/\partial x^2$ ,  $f(x) = \sin x$ .

Задание 7. Определите результаты действия операторов на функцию  $A = \partial^2/\partial x^2$ ,  $f(x) = \cos x$ .

#### Раздел 5.

Задание 1. Электрон заключен в молекуле длиной 1,0 нм. Какова его минимальная энергия? Какова минимальная энергия возбуждения от этого состояния? Какова вероят-ность нахождения его в области молекулы, лежащей между  $x = 0,49$  нм и  $x = 0,51$  нм? Какова вероятность нахождения его между  $x = 0$  нм и  $x = 0,2$  нм?

Задание 2. Какова величина энергии нулевого уровня в молекуле монооксида углерода, если силовая постоянная связи  $k(\text{CO}) = 1902$  Н/м?

Задание 3. Электрон находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $10^{-10}$  м. Каковы: а) энергия ос-новного состояния электрона; б) длина волны, испускаемой при переходе из состояния с  $n = 2$  в состояние с  $n = 1$ .

Задание 4. Частица массой  $10^{-26}$  кг находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0, 1м. Оцените степень влияния квантования энергии на характер движения этой частицы.

Задание 5. Частица массой  $10^{-30}$  кг находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0,1м. Оцените степень влияния квантования энергии на характер движения этой частицы.

Задание 6. Частица массой  $10^{-30}$  кг находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0, 1м. Оцените степень влияния квантования энергии на характер движения этой частицы.

Задание 7. Длина одномерного потенциального ящика равна 10 нм. Какова вероятность нахождения частицы между  $x=9,90$  и  $x = 10,00$  нм, если она находится в состоянии с квантовым числом  $n = 3$ ?

#### Критерии оценки типовых задач (в баллах):

- 5,0 баллов выставляется студенту, если ответ правильный

- 4,0 балла выставляется студенту, если задача решена на 60-70%;

- 3 балла выставляется студенту, если задача решена на 45-59% (предложены верные формулы для ее решения без подстановки численных значений, указанных в задании);
- 2 балла выставляется студенту, если задача решена на 30% (предложены верные формулы для ее решения без подстановки численных значений, указанных в задании);
- 1 балла выставляется студенту, если задача решена на 20-29% (предложены верные формулы для ее решения без подстановки численных значений, указанных в задании);
- 0 баллов выставляется студенту, если ответ неправильный.

В течение семестра каждый студент должен решить три кейс-задачи

#### **Пример кейс-задачи**

по дисциплине Избранные главы квантовой химии

Кейс-задача 1. Рассчитайте энергию фотона и энергию моля фотонов, если его длина волны равна 500 нм. Каков момент этого фотона? С какой скоростью будет двигаться покоящийся атом водорода, если фотон столкнется с ним и будет поглощен?

#### **Критерии оценки (в баллах):**

«5» (отлично): Задание выполнено в полном объеме. Отчет выполнен аккуратно и в соответствии с предъявляемыми требованиями.

«4» (хорошо): Задание по работе выполнено в полном объеме. Качество оформления отчета к работе не полностью соответствует требованиям. Есть мелкие ошибки в представлении результатов.

«3» (удовлетворительно): Студент на 80% правильно выполнил задание к работе. Составил отчет в установленной форме, представил решения большинства заданий, предусмотренных в работе, но есть некоторые существенные ошибки в оформлении результатов.

«2» (не зачтено): Студент неправильно выполнил от 70% до 50% заданий работы.

«1» (не зачтено): Студент неправильно выполнил свыше 70% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

«0» (не зачтено) Студент не выполнил все задания работы и не может объяснить полученные результаты

#### **Пример контрольной работы**

##### **Вариант 1.**

1. Вычислите кинетическую энергию и импульс пули массой 15 г, движущейся со скоростью 400 м/с.
2. Вычислите дебройлеву длину волны объекта массой 30 г, движущегося со скоростью 600 м/с.
3. Определите длину волны спектральной линии, соответствующей переходу электрона в атоме водорода с пятой боровской орбиты на вторую. К какой серии относится эта линия и какая она по счету?

#### **Критерии оценки (в баллах):**

«5» (отлично): Задание выполнено в полном объеме. Отчет выполнен аккуратно и в соответствии с предъявляемыми требованиями.

«4» (хорошо): Задание по работе выполнено в полном объеме. Качество оформления отчета к работе не полностью соответствует требованиям. Есть мелкие ошибки в представлении результатов.

«3» (удовлетворительно): Студент на 70% правильно выполнил задание к работе. Составил отчет в установленной форме, представил решения большинства заданий, предусмотренных в работе, но есть некоторые существенные ошибки в оформлении результатов.

«2» (не зачтено): Студент неправильно выполнил от 50% до 69% заданий работы.

«1» (не зачтено): Студент неправильно выполнил свыше 70% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

«0» (не зачтено) Студент не выполнил все задания работы и не может объяснить полученные результаты

## 5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

#### Основная литература:

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по химич. спец. / В. И. Барановский .— М. : Академия, 2008 .— 383 с. — (Высшее профессиональное образование) .— Режим доступа: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+2+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>.
3. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учебное пособие / Майер И. ; под ред. А. Л. Чугреева ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 387 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>. — Загл. с экрана.
4. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана. Киселёв В. В. / Квантовая механика. Курс лекций / М.: МЦНМО, 2009. - 560 с.
5. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.П. Демидович. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2005. — 200 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/604>. — Загл. с экрана.
6. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] / В.И. Крашенинин ; Е.Г. Газенаур ; Л.В. Кузьмина .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012 .— 56 с. — Режим доступа: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>; [:http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678](http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678)>.
7. Квантовохимическое моделирование органических молекул и реакций. Выбор приближения. [Электронный ресурс]: учеб. пособие / И.В. Вакулин [и др.]; Башкирский государственный университет. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2015. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ возможен через Электронную библиотеку БашГУ. — <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/read/Vakulin\\_Latypova\\_Talipov\\_Kvantovohimicheskoe\\_modelirovanie\\_up\\_2015.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/read/Vakulin_Latypova_Talipov_Kvantovohimicheskoe_modelirovanie_up_2015.pdf)>.

#### Дополнительная литература:

8. Хурсан С.Л. Методические указания для семинарских и практических занятий по курсу "Квантовая механика и квантовая химия"(раздел "Квантовая механика" : Учебное пособие / С.Л.Хурсан, Уч.-науч.комплекс "Интеграция" .— Уфа : Реактив, 2000 .— 43с. : ил. — Обяз.экз. — ISBN 5883330681 (Беспл.). <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+7+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
9. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по спец. ВПО 020101.65 "Химия" / А. И. Ермаков .— М. : Юрайт, 2010 .— 555 с. — (Основы наук) .— ISBN 978-5-9916-0587-8. — ISBN 978-5-9692-0331-0.<URL:

- <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+rs2+14+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
10. Шпольский, Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома [Электронный ресурс] : учебник / Э.В. Шпольский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 448 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/443>. — Загл. с экрана.
  11. Степанов Н.Ф. «Квантовая химия и квантовая механика»: учеб. пособие / Н. Ф. Степанов, В. И. Пупышев. — М. : МГУ, 1991. — 384 с. : ил. — ISBN 5-211-01629-7. <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+1+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
  12. Задачи по квантовой теории [Электронный ресурс]: методические указания к проведению практических занятий по квантовой теории: Ч.2 / Башкирский государственный университет; сост. Р.М. Вахитов. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2017. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ возможен через Электронную библиотеку БашГУ. — <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/local/Vahitov\\_sost\\_Zadachi\\_po\\_kvantovoj\\_teorii\\_mu\\_Ch2\\_mu\\_2017.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/local/Vahitov_sost_Zadachi_po_kvantovoj_teorii_mu_Ch2_mu_2017.pdf)>.

## 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного программного обеспечения дисциплин (модулей).

Электронно-библиотечная система (электронная библиотека) и электронная информационно-образовательная среда университета обеспечивают одновременный доступ более 25% обучающихся по данному направлению подготовки.

Студенты имеют возможность доступа к фондам учебно-методической документации, библиографическим и реферативным базам данных, электронным библиотечным системам («Электронный читальный зал», «Университетская библиотека онлайн», «Лань» по дисциплинам естественнонаучного направления), к электронному каталогу библиотеки и Интернет-ресурсам (базы данных российских библиотек, полнотекстовые базы данных: каталог авторефератов и диссертаций РГБ, научная электронная библиотека «eLibrary», онлайн база данных «Polpred», патентная база данных «Questel», мультидисциплинарный журнал «Science» и мультидисциплинарный ресурс «AnnualReviews» и др.). Вся необходимая учебно-методическая документация для студентов размещена на сайте вуза, доступ – по IP адресам локальной сети вуза.

## 6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
<p><b>1. учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа:</b> аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p> <p><b>2. учебная аудитория для текущего контроля и</b></p>	<p><b>Аудитория № 405</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см SpectraClassic.</p> <p><b>Аудитория № 311</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Mattewhite.</p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013</p>

<p><b>промежуточной аттестации:</b> аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус), аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p> <p><b>3. помещения для самостоятельной работы:</b> читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал №2 (физмат корпус-учебное), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (учебный корпус), читальный зал № 7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (химфак корпус)</p> <p><b>4. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования:</b> лаборатория № 416 (химфак корпус).</p>	<p><b>Аудитория № 310</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p><b>Аудитория № 305</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p><b>Аудитория № 004</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p><b>Аудитория № 005</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPO Neos 470 MD i5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSSt450/ SKS1/SSSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p><b>Аудитория № 001</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 002</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 006</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 007</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Аудитория № 008</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p><b>Читальный зал № 1</b> Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, Wi-Fi доступ для мобильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p><b>Читальный зал №2</b> Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p><b>Читальный зал № 5</b> Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p><b>Читальный зал № 6</b> Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p><b>Читальный зал № 7</b> Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p><b>Лаборатория № 418</b> Учебная мебель, факсимильным аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5K(0,5kBT; 2A,220/0-250В),3604, 99р Т.207/2-15, весы "Ohaus" PA64C (65г, 0,1мг) с поверкой, весы VIC-1500d1 (1500г. 100МГ, внешн.калибровка) ACCULAB, иономер И-160МИ с поверкой, комплекс вольтамперометрический СТА, компьютер в комплекте DEPO Neos 4601\Ю/монитор 20" Samsung BX2035/кпав./мышь, компьютер персональный №1</p>	<p>Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p> <p>4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU</p> <p>5. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License</p>
---	---	---

	<p>т.210-14/3, магнитная мешалка без нагрева Tolorino – 2шт, магнитная мешалка с нагревом и нанокерамич.поверх hG-MAG HS, метр-pH pH-150МИ (с гос.поверкой), монитор 19" LG L1919S BF Black (LCD&lt;TFT,8ms, 1280*1024,250КД/М.1 400:1,4:3 D-Sub), персональный компьютер в составе с/блок/Core J7-4770 (3.4)/H87/SYGA/HDD 500Gb, монитор ЖК"20"Веpl.клавиат ура+мышь, принтер Canon i-SENSYS MF3010, pH-метр pH-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIP LF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p> <p style="text-align: center;"><b>Лаборатория № 416</b></p> <p>Атомно-абсорбционный спектрофотометр модель AA-7000, фирмы "Шимадзу", Япония, баллон с гелием марки А – 2 шт, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц/*1/, газовый хромато-масс-спектрометр модель GCMS-QP 2010PIUS, компьютер в составе: системный блок, монитор, клавиатура, мышь, кондиционер QUATTROCUMA QV/QN-F12WA, ноутбук Fujitsu Lifebook F530 Intel Core i3-330M/4Gb/500Gb/ DVD-RW/ВТ/15.6"/Wi n7НВ+Office, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"CQ 100 eu (моноблок), электроплитка Irit IR-8200,1500Вт диаметр конфорки 185мм.</p>	
--	--	--

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ**

дисциплины Избранные главы квантовой химии (на английском языке) на 6 семестр  
очная форма обучения

<b>Вид работы</b>	<b>Объем дисциплины</b>
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	2/72
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	16,2
лекций	
практических/ семинарских	16
лабораторных	
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	55,8
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	

Форма(ы) контроля:

Зачет в 6 семестре



№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Уравнение Планка. Кванты. Фотоны. Фотоэффект (законы Столетова и уравнение Эйнштейна). Фотоэлектронная спектроскопия. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.	-	2	-	6	[1-5, 9-11]	Проработать вопросы, рек. литературу	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
2.	Эффект Комптона. Спектр атома водорода. Уравнения Бальмера и Ридберга. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов	-	2	-	7	[1-5, 9-11]	Проработать вопросы, рек. литературу	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
3.	Теория строения атома Н. Бора. Расчет скорости движения, энергии и радиуса орбиты электрона. Уравнение Луи де Бройля. Волновые свойства микрочастиц. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.	-	2	-	7	[1-12]	Проработать вопросы, рек. литературу	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет

4	Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновая функция и ее свойства. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов	-	2	-	8	[1-5, 9-11]	Проработать вопросы, рек. литературу	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
5	Свойства операторов. Операторы основных физических величин. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.	-	2	-	7	[1-6]	Проработать вопросы, рек. литературу	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
6.	Расчет средних значений. Движение частицы в одномерном потенциальном ящике. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов	-	2	-	7	[1-5, 9-11]	Проработать вопросы, рек. литературу	контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
7.	Одномерный жесткий ротатор. Гармонический осциллятор. Решение типовых задач по соответствующим темам. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.	-	2	-	7			контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
8.	Движение частицы в одномерном потенциальном ящике. Решение типовых задач по соответствующей теме. Заслушивание выступлений студентов с докладами и анализ рефератов.	-	2	-	6,8			контрольная работа, реферат, доклад, решение типовых задач, решение кейс-задач, зачет
<b>Всего часов</b>		-	16	-	55,8			

## Рейтинг – план дисциплины

ФТД.В.03 Избранные главы квантовой химии  
направление/специальность 04.03.01. Химия  
курс 3, семестр 6

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1				
<b>Текущий контроль</b>				
1. Реферат	5,00	1	0	5,00
2. Кейс-задачи	5,00	1	0	5,00
3. Типовые задачи	5,00	2	0	10,00
<b>Рубежный контроль</b>				
Контрольная работа №1	15,00	1	0	15,00
Модуль 2				
<b>Текущий контроль</b>				
1. Кейс-задачи	5,00	2	0	10,00
2. Типовые задачи	5,00	3	0	15,00
3. Доклад	5,00	1	0	5,00
<b>Рубежный контроль</b>				
Контрольная работа №2	15,00	1	0	15,00
<b>Посещаемость</b>				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6,00
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных) занятий			0	-10,00

			<b>Итого</b>	<b>100</b>
<b>Поощрительные баллы</b>				
Участие в олимпиадах	1,00		0	1,00
Участие в конференциях	2,00		0	2,00
Публикация тезисов	3,00		0	3,00
Публикация статей	4,00		0	4,00
			<b>Итого</b>	<b>10</b>