

*Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Северо-Осетинский государственный университет
имени Коста Левановича Хетагурова»*



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Основы квантовой химии»

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

**«ХИМИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ, ХИМИЧЕСКАЯ ЭКСПЕРТИЗА И
ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ»**

Квалификация (степень)

бакалавр

Форма обучения-**очная**

Владикавказ 2020

Программа составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом по направлению 04.03.01 Химия, утвержденным приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 17.07.2017 г., N 671, учебным планом подготовки бакалавра по направлению 04.03.01 Химия, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «СОГУ» протокол № 9 от 30.04.2020 г.

Составитель: к.х.н., доцент А.Т. Плиева

1. Структура и общая трудоемкость дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы (108 часов).

	Очная форма обучения
Курс	4
Семестр	7
Лекции	36
Практические (семинарские) занятия	36
Лабораторные занятия	-
Консультации	-
Итого аудиторных занятий	72
Самостоятельная работа	36
(в том числе курсовая работа)	-
Экзамен	-
Зачет	+
Общее количество часов	108 (3 з.е.)

2.

Цели освоения дисциплины.

Целью освоения учебной дисциплины «Основы квантовой химии», являющейся частью ОПОП по направлению 04.03.01 Химия и обеспечивающей реализацию ФГОС 3++ по данному направлению, в соответствии с требованиями профессиональных стандартов, соотнесенных с ФГОС ВО

01	ОБРАЗОВАНИЕ И НАУКА
01.001	ПЕДАГОГ (ПЕДАГОГИЧЕСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ В СФЕРЕ ДОШКОЛЬНОГО, НАЧАЛЬНОГО ОБЩЕГО, ОСНОВНОГО ОБЩЕГО, СРЕДНЕГО ОБЩЕГО ОБРАЗОВАНИЯ) (ВОСПИТАТЕЛЬ, УЧИТЕЛЬ)
01.003	ПЕДАГОГ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ ДЕТЕЙ И ВЗРОСЛЫХ
26	ХИМИЧЕСКОЕ, ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОИЗВОДСТВО
26.006	СПЕЦИАЛИСТ ПО РАЗРАБОТКЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ
40	СКВОЗНЫЕ ВИДЫ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ
40.011	СПЕЦИАЛИСТ ПО НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИМ И ОПЫТНО-КОНСТРУКТОРСКИМ РАЗРАБОТКАМ

является вооружение студентов системой теоретических знаний; выделение главных тенденций в развитии квантовой химии, как основного теоретического фундамента современной химической науки; оценка перспективы развития квантовой теории и применения квантово-химических методов при решении прикладных химических задач.

Задачи изучения дисциплины:

1) Научить студентов решать следующие прикладные химические задачи:

- Вычисление геометрических характеристик жёстких молекул
- Вычисление потенциальных кривых для внутренних вращений.
- Вычисление зарядов на атомах и связях и построение карт распределения электронной плотности вдоль разных сечений в пространстве молекулы.
- Анализ на этом основании (с помощью, в частности, понятия плотности электронно-ядерных сил) характера химических связей.
- Вычисление дипольных моментов молекул.
- Вычисление МЭСП.
- Вычисление поляризуемостей молекул.
- Анализ эффектов переноса заряда при реакциях.
- Анализ внутримолекулярных влияний, в частности, полярных заместителей.
- Применение свойств симметрии молекулярных орбиталей для прогнозирования хода реакций.
- Вычисление поверхностей и путей химических реакций.

- Анализ возможных механизмов химических реакций на основе общей структуры потенциальной поверхности.
- Расчёт индексов реакционной способности молекул и построение молекулярных диаграмм, описание с их помощью реакционной способности молекул.

2) Показать какими способами и путём каких приближений можно подойти к интерпретации молекулярных спектров: электронных, колебательных, вращательных, спектров ядерного магнитного резонанса, электронного парамагнитного резонанса и других.

3) Сформировать у студентов-химиков устойчивый интерес к теоретическим проблемам химии и квантово-химическим методам их решения.

3. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Основы квантовой химии» относится к дисциплинам Блока 1, часть, формируемая участниками образовательных отношений Б1.В.06.

К исходным требованиям, необходимым для изучения дисциплины, относятся знания, умения и навыки, сформированные в результате изучения дисциплин: «Математика», «Физика», «Неорганическая химия», «Органическая химия». Дисциплина является основой для изучения дисциплин: «Физические методы исследования», «Высокомолекулярные соединения», «Строение вещества».

При освоении данной дисциплины студент сможет полностью или частично продемонстрировать следующие обобщенные трудовые функции (ТФ), согласно профессиональным стандартам (ПС):

Код и наименование профессионального стандарта	Обобщенная трудовая функция (ОТФ)			Трудовая функция (ТФ)	
Область профессиональной деятельности: 01 Образование и наука					
Тип задач профессиональной деятельности: педагогический					
01.001 Педагог (педагогическая деятельность в сфере дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования (воспитатель, учитель). Наименование вида профессиональной деятельности: Дошкольное образование Начальное общее образование Основное общее образование Среднее общее образование	Код	Наименование ОТФ	Уровень квалификации	Наименование ТФ	Код
	А	Педагогическая деятельность по проектированию и реализации образовательного процесса в образовательных организациях дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования	6	Общепедагогическая функция. Обучение	A/01.6
				Воспитательная деятельность	A/02.6
				Развивающая деятельность	A/03.6
В	Педагогическая деятельность по проектированию и реализации основных общеобразовательных программ	6	Педагогическая деятельность по реализации программ основного и среднего общего образования	B/03.6	
01.003 Профессиональный стандарт «Педагог дополнительного образования детей и взрослых».	А	Преподавание по дополнительным общеобразовательным программам	6	Организация деятельности учащихся, направленной на освоение дополнительной общеобразовательной программы	A/01.6

Наименование вида профессиональной деятельности: Педагогическая деятельность в дополнительном образовании детей и взрослых			6	Педагогический контроль и оценка освоения дополнительной общеобразовательной программы	A/04.6
40 Сквозные виды профессиональной деятельности Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский					
40.011 Профессиональный стандарт «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам».	А	Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок по отдельным разделам темы	5	Осуществление проведения работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований	A/01.5
Наименование вида профессиональной деятельности: Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок				Осуществление выполнения экспериментов и оформления результатов исследований и разработок	A/02.5

Для освоения учебной дисциплины «Основы квантовой химии» у студента, в ходе изучения предшествующих дисциплин, должны быть сформированы следующие, предварительные, компетенции:

Универсальные компетенции:

- способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач (УК-1);
- способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений (УК-2);
- способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(ых) языке(ах) (УК-4);
- способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни (УК-6);
- способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций (УК-8);

Общепрофессиональные компетенции (ОПК):

- способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений (ОПК-1);
- способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием (ОПК-2);
- способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники (ОПК-3);
- способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач (ОПК-4);

- способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-5);

- способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе (ОПК-6).

Для освоения дисциплины «Основы квантовой химии» студент должен:

Знать: основы общей и неорганической химии; современные представления о строении вещества; основы высшей математики.

Уметь: применять знания, полученные в курсе общей и неорганической химии.

Владеть: расчетными и логическими методами высшей математики; современными представлениями о строении вещества.

4. Требования к результатам освоения дисциплины (компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля))

В результате изучения дисциплины «Основы квантовой химии» обучающийся должен обладать следующими компетенциями (результатами освоения образовательной программы):

Профессиональные компетенции (ПК):

- способен использовать знания о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, веществ и материалов для понимания механизма химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, а также естественнонаучные знания для решения задач профессиональной деятельности (ПК-1).

Код и наименование профессиональной компетенции (ПК)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции	Результаты освоения компетенции		
		Знать	Уметь	Владеть
Профессиональные компетенции выпускников				
Научно-исследовательский тип задач				
ПК-1 Способен использовать знания о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, веществ и материалов для понимания механизма химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, а также естественнонаучные знания для решения задач профессиональной деятельности	ПК-1.1. Использует знания о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, веществ и материалов для понимания механизма химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире; ПК-1.2 Прогнозирует свойства химических соединений и материалов на основе данных об их свойствах и химическом строении; ПК-1.3. Использует современные теоретические представления химической	основные принципы, законы, положения, методологию изучаемых дисциплин	использовать основные законы и положения химии для понимания механизма химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире; прогнозировать свойства химических соединений и материалов на основе данных об их свойствах и химическом строении	навыками использования фундаментальных химических законов и естественнонаучных знаний в процессе выполнения научного исследования, а также в своей профессиональной деятельности

	науки и естественнонаучные знания в своей профессиональной деятельности			
--	--	--	--	--

В результате освоения дисциплины «Основы квантовой химии» студент должен:

Знать

- экспериментальные основы, принципы и законы квантовой механики, являющиеся основой теоретических представлений в современной структурной химии (ПК-1);
- принцип соответствия и особенности построения физических теорий (ПК-1);
- определение понятия «квантовая химия», «основные постулаты квантовой механики», «волновая функция», «требования, налагаемые на волновую функцию»; «операторы квантовой механики», «принцип неопределённости Гейзенберга» и др. (ПК-1);
- особенности движения микрочастиц и способы описания их состояний (ПК-1);
- качественное объяснение основных закономерностей состояний атома водорода (ПК-1);
- вид волновых функций атома водорода (ПК-1);
- концепцию гибридизации (ПК-1);
- принцип Паули и заполнение электронных оболочек (ПК-1);
- электронное строение молекул (ПК-1);
- понятие о системе многих частиц (ПК-1);
- приближённые методы решения уравнения Шрёдингера (ПК-1);
- молекулярные модели и их отображения (ПК-1).

Уметь

- грамотно применять квантово-механические представления и методы для построения и анализа структурных моделей атомов, молекул, конденсированных структур, оценки реакционной способности молекул (ПК-1);
- химические связи и их классификация (ПК-1);
- адиабатическое приближение в теории сложных систем (ПК-1);
- решение уравнения Шрёдингера для многоатомной молекулы (ПК-1);
- вычисляемые и измеряемые величины (ПК-1);
- переход от квантовых к классическим моделям (ПК-1).

Владеть

- навыками самостоятельной работы с учебной, методической и научной литературой в области квантовой механики и квантовой химии (ПК-1);
- основными технологическими процедурами, инструментарием (ПК-1);
- навыками практической деятельности с различными группами студентов (ПК-1);
- концептуальным и математическим аппаратом квантовой механики в приложении к химической проблематике; современными средствами математического и компьютерного моделирования (ПК-1).

5. Содержание и учебно-методическая карта дисциплины

Таблица 5.1

№	Наименование тем (вопросов), изучаемых по данной дисциплине	Занятия		Самостоятельная работа студентов		Формы контроля	Количество баллов		Литература
		л	п	Содержание	Часы		min	max	
1.	Введение. Предмет квантовой механики и квантовой химии. Основные постулаты квантовой механики.	2	4	Свойства квантово-механических операторов	4	Вопросы и задачи к семинарскому занятию.	0	3	[1], [2], [3], [4],[5]
2.	Квантовые состояния и волновые функции. Основные свойства функций.	2							
3	Операторы физических величин. Свойства операторов.	2	4	Нахождение собственных значений и собственных функций операторов.	4	Вопросы и задачи к семинарскому занятию.	0	4	[1], [2], [3], [4], [12],[13]
4	Математический аппарат квантовой механики.	2							
5	Эволюция состояний и уравнение Шрёдингера.	2	4	Задачи об одномерных и трёхмерных потенциальных ящиках.	4	Вопросы и задачи к семинарскому занятию.	0	4	[1], [2], [3], [4], [12],[13]
6	Водородоподобные атомные орбитали.	2							
7	Приближённые методы решения квантово-механических задач.	2	4	Задачи о движении частицы по окружности, барьере и гармоническом осцилляторе	4	Вопросы и задачи к семинарскому занятию.	0	4	[1], [2], [3], [4], [9], [12],[13]
8	Решение уравнения Шрёдингера для многоэлектронного атома.	2							
9	1-я рубежная письменная контрольная работа	2		Анализ результатов 1-й рубежной работы	2		0	10	
10	Принцип построения периодической системы элементов.	2	4	Задача об атоме водорода. Формы атомных орбиталей.	4	Вопросы и задачи и упражнения к семинарскому занятию.	0	3	[1], [2], [3], [4], [9], [12],[13]
11	Электронные конфигурации и термы атомов.	2							
12	Метод самосогласованного поля (ССП) Хартри-Фока.	2	4	Термы многоэлектронных атомов.	4	Вопросы и задачи к семинарскому занятию.	0	4	[1], [2], [3], [4], [9], [12],[13]
13	Приближённые аналитические функции атомных орбиталей.	2							
14	Теория химической связи. Метод валентных связей.	2	4	Расчёт молекул малых периодов методом валентных связей. Построение двухатомных молекул в терминах метода молекулярных орбиталей.	4	Вопросы и задачи и упражнения к семинарскому занятию.	0	4	[1], [2], [3], [4], [6], [17],[18]
15	Метод молекулярных орбиталей. Общие положения. Приближение линейных комбинаций атомных орбиталей.	2	4						
16	Расчётные методы квантовой химии. Метод Хюккеля.	2	4	Свойства ПИ-сопряжённых молекул.	4	Вопросы и задачи и	0	4	[1], [2], [3],

17	Бензол. Правило Хюккеля ($4n + 2$). Индексы реакционной способности.	2		Квантово-химический расчёт молекулы бутадиена-1,3 в приближении Хюккеля		упражнения к семинарскому занятию.			[4], [9], [11],[13]
18	II-я рубежная письменная контрольная работа	2		Анализ результатов 2-й рубежной работы	2		0	10	
	Текущая работа студента						0	50	
	Результаты компьютерного тестирования						0	50	
	ИТОГО	36	36		36		0	100	

6. Образовательные технологии

Для освоения дисциплины «Основы квантовой химии» используются лекции, лекции-беседы, практические занятия, технология перспективно - опережающего обучения, модульная технология, технология проблемного обучения, технология решения исследовательских и проектных задач.

В качестве интерактивных методов обучения могут быть использованы: творческие задания, разработка проектов, исследовательский метод обучения, круглые столы, диспуты, семинары).

Традиционные лекции и практические (семинарские) занятия могут проводиться с использованием современных интерактивных технологий.

Лекция-диалог – содержание подается через серию вопросов, на которые студент должен отвечать непосредственно в ходе лекции.

Онлайн-семинар – разновидность веб-конференции, проведение онлайн-встреч или презентаций через Интернет в режиме реального времени. Каждый из участников находится у своего компьютера (средства связи), а связь между ними поддерживается через Интернет посредством загружаемого приложения, установленного на компьютере каждого участника (Zoom, Meet, Skype и др.)

Видеоконференция – сеанс видеоконференцсвязи (ВКС) – это технология интерактивного взаимодействия двух и более участников образовательного процесса для обмена информацией в реальном режиме времени.

Видео-лекция – снятая на камеру сокращенная лекция, дополненная фотографиями и схемами, иллюстрирующая подаваемый в лекции материал.

Технология электронного обучения (реализуется при помощи электронной образовательной среды СОГУ при использовании ресурсов ЭБС, при проведении автоматизированного тестирования и т. д.).

Примечания

– Все виды учебной работы могут проводиться дистанционно на основании локальных нормативных актов.

– В целях реализации индивидуального подхода к обучению студентов, осуществляющих учебный процесс по индивидуальной траектории в рамках индивидуального рабочего плана, изучение данной дисциплины может осуществляться через индивидуальные консультации преподавателя очно, в часы консультаций, по электронной почте, а также с использованием Webex, платформы дистанционного обучения Moodle, личный кабинет студента на сайте СОГУ, других элементов ЭИОС СОГУ.

7. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы

Самостоятельная работа обучающихся является одним из видов учебных занятий. Самостоятельная работа проводится с целью:

- систематизации и закрепления полученных теоретических знаний и практических умений обучающихся студентов;
- углубления и расширения теоретических знаний;
- формирования умений использовать нормативную, правовую, справочную документацию и специальную литературу;
- формирования самостоятельности мышления, способностей к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации;
- развития исследовательских умений.

Самостоятельная работа обучающихся осуществляется на протяжении изучения всей дисциплины в соответствии с утвержденной в учебном плане трудоемкостью (для очной формы обучения 36 часов) и состоит из:

- работы студентов с лекционными материалами, поиска и анализа литературы и электронных источников информации по заданной теме;
- выполнения заданий для самостоятельной работы в ЭИОС СОГУ;
- изучения теоретического, правового и статистического материала для подготовки к семинарским занятиям;
- подготовки к зачету.

Темы и формы внеаудиторной самостоятельной работы, ее трудоёмкость содержатся в разделе 5, табл. 5.1.

Методические рекомендации по написанию рефератов

Реферат — письменная работа по определенной научной проблеме, краткое изложение содержания научного труда или научной проблемы. Он является действенной формой самостоятельного исследования научных проблем на основе изучения текстов, специальной литературы, а также на основе личных наблюдений, исследований и практического опыта. Реферат помогает выработать навыки и приемы самостоятельного научного поиска, грамотного и логического изложения избранной проблемы и способствует приобщению студентов к научной деятельности.

Последовательность работы:

1. Выбор темы исследования. Тема реферата выбирается студентом на основе его научного интереса. Также помощь в выборе темы может оказать преподаватель.
2. Планирование исследования. Включает составление календарного плана научного исследования и плана предполагаемого реферата. Календарный план исследования включает следующие элементы: выбор и формулирование проблемы, разработка плана исследования и предварительного плана реферата; сбор и изучение исходного материала, поиск литературы; анализ собранного материала, теоретическая разработка проблемы; сообщение о предварительных результатах исследования; литературное оформление исследовательской проблемы; обсуждение работы (на семинаре и т. п.).

План реферата характеризует его содержание и структуру. Он должен включать в себя: введение, где обосновывается актуальность проблемы, ставятся цель и задачи исследования; основная часть, в которой раскрывается содержание проблемы; заключение, где обобщаются выводы по теме и даются практические рекомендации.

3. Поиск и изучение литературы. Для выявления необходимой литературы следует обратиться в библиотеку или к преподавателю. Подбранную литературу следует зафиксировать согласно ГОСТ по библиографическому описанию произведений печати.

Для разработки реферата достаточно изучение 4-5 важнейших статей по избранной проблеме. При изучении литературы необходимо выбирать материал, не только подтверждающий позицию автора реферата, но и материал для полемики.

4. Обработка материала. При обработке полученного материала автор должен: систематизировать его по разделам; выдвинуть и обосновать свои гипотезы; определить свою позицию, точку зрения по рассматриваемой проблеме; уточнить объем и содержание понятий, которыми приходится оперировать при разработке темы; сформулировать определения и основные выводы, характеризующие результаты исследования; окончательно уточнить структуру реферата.

5. Оформление реферата. При оформлении реферата рекомендуется придерживаться следующих правил: Следует писать лишь то, чем автор хочет выразить сущность проблемы, ее логику; Писать строго последовательно, логично, доказательно (по схеме: тезис – обоснование – вывод); Писать ярко, образно, живо, не только вскрывая истину, но и отражая свою позицию, пропагандируя полученные результаты; Писать осмысленно, соблюдая правила грамматики, не злоупотребляя наукообразными выражениями.

Реферат выполняется в соответствии с требованиями стандартов, разработанных для данного вида документов. Работа должна быть выполнена на белой бумаге стандартного листа А4. Текст должен быть отпечатан на компьютере в текстовом редакторе MicrosoftWord и отвечать следующим требованиям: параметры полей страниц должны быть в пределах: верхнее и нижнее – по 20 мм, правое – 10 мм, левое – 30 мм, шрифт – TimesNewRoman, размер шрифта – 14, межстрочный интервал – полуторный. Лента принтера – только чёрного цвета. Нумерация страниц в реферате должна быть сквозной, начиная с третьей страницы. Номер проставляется арабскими цифрами вверху каждой страницы справа.

При изложении материала необходимо придерживаться принятого плана.

Библиографический список составляется на основе источников, которые были просмотрены и изучены студентом при написании реферата. Данный список отражает самостоятельную творческую работу студента, что позволяет судить о степени его подготовки и углублении в выбранную тематику. Вся использованная литература размещается в следующем порядке: законодательные акты, постановления, нормативные документы; вся учебная литература в алфавитном порядке, затем средства периодической печати в алфавитном порядке; источники из сети Интернет.

Методические рекомендации по созданию мультимедийной презентации

Структура и содержание презентации – это личное творчество автора. Полезно использовать шаблоны оформления для подготовки компьютерной презентации.

Слайды желательно не перегружать текстом, лучше разместить короткие тезисы. На слайдах необходимо демонстрировать небольшие фрагменты текста доступные для чтения на расстоянии; 2-3 фотографии или рисунка. Наиболее важный материал лучше выделить.

Таблицы с цифровыми данными плохо воспринимаются со слайдов, в этом случае цифровой материал, по возможности, лучше представить в виде графиков и диаграмм.

Не следует излишне увлекаться мультимедийными эффектами анимации. Особенно нежелательны такие эффекты как вылет, вращение, волна, побуквенное появление текста и т.д. Оптимальная настройка эффектов анимации – появление, в первую очередь, заголовка слайда, а затем — текста по абзацам. При этом если несколько слайдов имеют одинаковое название, то заголовок слайда должен постоянно оставаться на экране.

Чтобы обеспечить хорошую читаемость презентации необходимо подобрать темный цвет фона и светлый цвет шрифта. Нельзя также выбирать фон, который содержит активный рисунок.

Желательно подготовить к каждому слайду заметки по докладу. Затем распечатать их и использовать при подготовке или на самой презентации. Можно распечатать некоторые ключевые слайды в качестве раздаточного материала.

Необходимо обязательно соблюдать единый стиль оформления презентации и обратить внимание на стилистическую грамотность.

Следует пронумеровать слайды. Это позволит быстро обращаться к конкретному слайду в случае необходимости.

Рекомендации по содержанию и структуре слайдов мультимедийной презентации:

1-й слайд (титульный), на фоне которого студент представляет тему проекта, ФИО и научного руководителя.

2-й слайд. Включает в себя объект, предмет и гипотезу исследования.

3-й слайд. Содержит цель и задачи исследования. Цель проекта должна быть написана на экране крупным шрифтом. Здесь же, если позволяет место, можно написать и задачи. Задачи могут быть представлены и на следующем слайде.

4-й - слайд. Содержит структуру работы, которую можно предоставить, например, в виде графических блоков со стрелками. А также – перечисление применяемых методов и методик.

5-й - слайд. Представляется содержание и теоретическая значимость проекта. Суть решаемой проблемы может быть представлена в виде схем, таблиц, диаграмм, графиков, фотографий, фрагментов фильмов и т.п. На теоретическую часть представления проекта должно быть создано несколько слайдов.

6-й - слайд. Возможности применения результатов работы на практике. На эту тему также должно быть несколько слайдов.

7-й слайд. Главные выводы, итоги, результаты проекта целесообразно поместить на отдельном слайде. При этом не следует перечислять то, что было сделано, а лаконично изложить суть значимости проекта или полученных результатов исследования.

Последний слайд. В конец презентации желательно поместить слайд с текстом «Спасибо за внимание!».

Методические указания по проведению практических занятий по дисциплине «Основы квантовой механики»

Практические занятия призваны научить студента самостоятельно работать с учебными текстами, анализировать материал. В начале занятия рекомендуется рассмотреть соответствующий теоретический материал. Затем идет практический разбор изучаемого материала, решаются задачи из практикума, разбирается каждый конкретный пример.

В начале практического занятия следует обратить внимание на теоретические вопросы по теме занятия. Первоначально идет изложение теоретического материала темы занятия. Затем в ряде вопросов преподавателя следует сконцентрировать внимание на основных идеях темы занятия. Вопросы должны включать в себя различные вариации элементарных ситуаций, отображающих основные идеи темы занятия в их взаимной взаимосвязи. Задаваемые вопросы должны быть конкретными и максимально проявлять в студентах их сообразительность.

Устный опрос требует от преподавателя большой предварительной подготовки: тщательного отбора содержания, всестороннего продумывания вопросов, задач и примеров, которые будут предложены, путей активизации деятельности всех студентов группы в процессе проверки, создания на занятии деловой и доброжелательной обстановки.

Различают фронтальный, индивидуальный и комбинированный опрос.

Фронтальный опрос проводится в форме беседы преподавателя с группой.

Он органически сочетается с повторением пройденного, являясь средством для закрепления знаний и умений. Его достоинство в том, что на активную умственную работу можно вовлечь всех студентов группы. Для этого вопросы должны допускать краткую форму ответа, быть лаконичными, логически взаимосвязанными друг с другом, даны в такой последовательности, чтобы ответы студентов в совокупности могли раскрыть содержание раздела, темы. С помощью фронтального опроса преподаватель имеет возможность проверить выполнение студентами домашнего задания, выяснить готовность группы к изучению нового материала, определить сформированность основных понятий, усвоение нового учебного материала, который был только что разобран на занятии.

Индивидуальный опрос предполагает обстоятельные, связные ответы студентов на вопрос, относящийся к изучаемому учебному материалу, поэтому он служит важным учебным средством развития речи, памяти, мышления студентов. Чтобы сделать такую проверку более глубокой, необходимо ставить перед студентами вопросы, требующие развернутого ответа.

Вопросы для индивидуального опроса должны быть четкими, ясными, конкретными, емкими, иметь прикладной характер, охватывать основной, ранее пройденный материал программы. Их содержание должно стимулировать студентов логически мыслить, сравнивать, анализировать, доказывать, подбирать убедительные примеры, устанавливать причинно-следственные связи, делать обоснованные выводы и этим способствовать объективному выявлению знаний студентов.

Вопросы обычно задают всей группе и после небольшой паузы, необходимой для того, чтобы студенты поняли его и приготовились к ответу, вызывают для ответа конкретного студента.

Письменная проверка наряду с устной является важнейшим методом контроля знаний, умений и навыков студентов. Однородность работ, выполняемых студентами, позволяет предъявлять ко всем одинаковые требования, попытаться объективности оценки результатов обучения. Применение этого метода дает возможность в наиболее короткий срок одновременно проверить усвоение учебного материала всеми студентами группы, определить направления для индивидуальной работы с каждым.

Письменная проверка используется во всех видах контроля и осуществляется как в аудиторной, так и во внеаудиторной работе (выполнение домашних заданий).

Методические рекомендации по использованию информационно-коммуникативных технологий обучения

Для изучения лекционного материала дисциплины применяются аудиовизуальные (мультимедийные) технологии, которые не отрицают традиционные, проверенные временем методы преподавания, но, при этом, они повышают наглядность, информативность, оперативность в подаче информации, позволяют экономить время занятий.

Каждое семинарское занятие имеет свою особую форму проведения, свою методологическую специфику, что позволяет развивать у студентов различные как общекультурные, так и профессиональные компетенции. Постановка проблемы, разбор актуальных конкретных и гипотетических ситуаций, создание атмосферы диалога между преподавателем и группой позволяет работать индивидуально и в малых группах, коллективно обсуждать определенный тематический материал, а также инициировать самостоятельную работу студентов. При осмыслении содержания вопросов практических занятий преследуется цель соблюдать преемственность в профессиональном и в творческом развитии студентов.

Контроль самостоятельной работы студентов призван сделать процесс обучения более целостным и органичным. Его задача не оставить без внимания даже, на первый взгляд, малозначительные вопросы.

Компьютерное тестирование позволяет осуществлять итоговый контроль знаний студентов. Тестовый материал включает в себя содержание вопросов по каждому из обозначенных программой разделов.

Каждый вопрос предполагает несколько вариантов ответов, среди которых имеются абсолютно неверный, правильный и в большей или меньшей степени раскрывающий сущность вопроса. В процессе компьютерного тестирования задача студентов определяется как выбор правильного ответа из многообразия вариантов. В тестовых заданиях есть вопросы на соответствие. В процессе компьютерного тестирования, задача студента определяется как выбор правильного ответа из многообразия вариантов.

8. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, рубежной аттестации и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Рабочая программа предусматривает проведение лекционных и практических занятий, а также следующие виды работ: самостоятельную работу студентов по подготовке устных докладов, написанию рефератов, подготовку презентаций и обсуждений по темам дисциплины - работу в активной и интерактивной формах.

Виды контроля.

Рабочая программа предполагает текущий и промежуточный контроль знаний.

Текущий контроль – это непрерывно осуществляемый мониторинг уровня усвоения знаний и формирования умений и навыков в течение семестра или учебного года. Текущий контроль знаний, умений и навыков студентов осуществляется в ходе учебных (аудиторных) занятий, проводимых по расписанию. Формами текущего контроля выступают *опросы на семинарских и практических занятиях, а также короткие (до 15 мин.) задания*, выполняемые студентами в начале лекции с целью проверки наличия знаний, необходимых для усвоения нового материала или в конце лекции для выяснения степени усвоения изложенного материала.

Рубежный контроль осуществляется по более или менее самостоятельным разделам – учебным модулям курса и проводится по окончании изучения материала модуля в заранее установленное время. Рубежный контроль проводится с целью определения качества усвоения материала учебного модуля в целом. В течение семестра проводится два таких контрольных мероприятия по графику.

Методика формирования результирующей оценки.

Итоговая оценка складывается как средневзвешенная по результатам всех оцениваемых работ на протяжении семестра, куда входят посещение лекций и семинаров, ответы и дополнения на семинарах, контрольные работы (контрольные срезы по итогам модуля), дополнительные оценки по рефератам в сумме с итоговыми результатами балльно-рейтингового тестирования.

Проведение текущего и промежуточного контроля по дисциплине осуществляется в соответствии с Положением СОГУ.¹

БАЛЛЬНАЯ СТРУКТУРА ОЦЕНКИ

<i>Форма контроля</i>	Макс. кол-во баллов
Текущая оценка студента в течение 1-8 недели состоит из:	25
• Выполнения заданий на практических занятиях (подготовка к семинарам, выполнения домашних заданий)	7
• Выполнения контрольной работы	10
• Подготовка рефератов, презентаций к практическим занятиям	8
1-я рубежная письменная контрольная работа (тестирование)	25
Текущая оценка студента в течение 10-15 недели состоит из:	25
• Выполнения заданий на практических занятиях (подготовка к семинарам, выполнения домашних заданий)	7
• Выполнения контрольной работы	10
• Подготовка рефератов, презентаций к практическим занятиям	8
2-я рубежная письменная контрольная работа (тестирование)	25
Итого	100

Методика формирования результирующей оценки.²

В ходе текущего контроля студенты могут набрать 0-100 баллов:

1-я рубежная аттестация - максимально 50 баллов; из них:

От 0 до 25 баллов (рубежная аттестация) – тестирование в центре тестирования СОГУ или указывается используемая при изучении данной дисциплины форма (письменная работа, коллоквиум, эссе и т.д.);

От 0 до 25 баллов (текущая оценка) – активная работа за данный период на семинарских (практических) занятиях

2-я рубежная аттестация – максимально 50 баллов; из них:

От 0 до 25 баллов (рубежная аттестация) – тестирование в центре тестирования СОГУ;

От 0 до 25 баллов (текущая оценка) – активная работа за данный период на семинарских (практических) занятиях

Промежуточный контроль:

Для зачета:

За устный ответ на зачете студент получает 0-50 баллов.

Студенты, получившие в ходе текущего и рубежного контроля 56-100 баллов автоматически получают «Зачет».

Результирующая оценка складывается по соответствующей БРС формуле.

Шкала итоговой академической успеваемости студентов по дисциплине

Система оценок СОГУ		
Сумма баллов	Название	Числовой эквивалент
86 - 100	отлично	5
71-85	хорошо	4
56-70	удовлетворительно	3

Тематика рефератов

1. Механическая картина мира

¹ Положение о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, магистратуры и специалитета в СОГУ.(в последней редакции от 08.07.20 г. Пр.№ 173)

² В соответствии с Положением о БРС оценивания обучающихся очной формы по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата и специалитета в ФГБОУ ВО СОГУ (от 05.03.2018 г., пр.№ 47)

2. Электродинамическая картина мира
3. «Ультрафиолетовая катастрофа»
4. Волновая природа света
5. Фото- и Комптон – эффекты
6. Спонтанное и индуцированное излучение
7. Теория Бора
8. Опыты Франка и Герца
9. Опыты Штерна и Герлаха
10. Причинность в классической механике и в СТО
11. Законы сохранения в классической механике и в СТО
12. Принцип соответствия в физике
13. Спор Эйнштейна и Бора
14. Принцип дополнительности
15. Элементы теории столкновений
16. Элементы теории излучения
17. Философские проблемы квантовой механики
18. Квантово-полевая картина мира
19. Различные представления квантовой механики
20. Новое в квантовой механике (открытия последних лет)
21. Биографии де Бройля, Бора, Шредингера, Гейзенберга
22. Квантовая физика вакуума
23. Многофотонные процессы
24. Фото-ионизация атомов (от Эйнштейна до XXI в.)
25. Атомные механизмы диффузии
26. Квантовые точки

Оценочный лист защиты рефератов (докладов)

Наименование показателя	Выявленные недостатки и замечания	Баллы
1. КАЧЕСТВО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ (РЕФЕРАТА, ДОКЛАДА)		
1. Грамотность изложения и качество оформления работы		1
2. Самостоятельность выполнения работы, глубина проработки материала, использование рекомендованной и справочной литературы		2
3. Обоснованность и доказательность выводов		1
Общая оценка за выполнение ИР		4
II. КАЧЕСТВО ДОКЛАДА		
1. Соответствие содержания доклада содержанию работы		0,5
2. Выделение основной мысли работы		0,5
3. Качество изложения материала		1,5
Общая оценка за доклад		2,5
III. ОТВЕТЫ НА ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ПО СОДЕРЖАНИЮ РАБОТЫ		

Вопрос 1		0,5
Вопрос 2		0,5
Вопрос 3		0,5
Общая оценка за ответы на вопросы		1,5
ИТОГОВАЯ ОЦЕНКА ЗА ЗАЩИТУ		8

Темы презентаций

1. Интерпретации квантовой механики
2. Квантовые свойства света
3. Дискретность состояний микрообъектов
4. Описание состояния микросистем
5. Принцип причинности в квантовой механике
6. Туннельный эффект
7. Надбарьерное рассеяние
8. Законы сохранения в квантовой механике
9. Предельный переход от квантовой к классической механике
10. Сверхтекучесть (Бозе-конденсат)
11. Сверхпроводимость
12. Квантовая телепортация
13. Квантовая запутанность (Квантовая нелокальность, «Квантовое Вуду»)
14. Парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена
15. Парадокс Клейна
16. Квантовый парадокс Зенона («Парадокс незакипающего чайника», связанный с аксиомой идеального измерения)
17. Теорема о запрете клонирования

Критерии оценивания студента за подготовку презентации

Критерии/баллы	8	6	4 (требуется доработка)	2
Содержание презентации	Четко сформулирована цель и раскрыта тема исследования. В краткой форме дана полная информация по теме исследования и дан ответ на проблемный вопрос. Даны ссылки на используемые ресурсы.	Сформулирована цель и тема исследования. Частично изложена информация по теме исследования и дан ответ на проблемный вопрос. Даны ссылки на используемые ресурсы.	Сформулирована цель и тема исследования. Содержание полностью не раскрыто. Информация по теме исследования неточна. Проблема до конца не решена. Не даны ссылки на используемые ресурсы.	Не сформулирована цель и тема исследования. Проблема не решена.

Дизайн презентации	Соблюдается единый стиль оформления. Презентация красочная и интересная. Используются эффекты анимации, фон, фотографии. В презентации присутствуют авторские находки.	Соблюдается единый стиль оформления. Слайды просты в понимании. Используются некоторые эффекты и фон.	Не соблюдается единый стиль оформления. Слайды просты в понимании. Эффекты и фон не используются.	Не соблюдается стиль оформления. Слайды просты в понимании.
Представление презентации	Автор хорошо владеет материалом по теме исследования. Использует научную терминологию. Обладает навыками ораторского искусства. Полно и точно цитируется использованная литература	Автор владеет материалом по теме исследования, но не смог заинтересовать аудиторию. Недостаточно цитируется литература.	Автор не показал компетентности в представлении презентации. Использованные факты не вызывают доверия. Недостаточно цитируется литература.	Представлены искаженные данные

Задания для первой рубежной письменной контрольной работы

Вариант №1

1. Принцип неопределённости В. Гейзенберга. Почему электрон не падает на притягивающее его ядро? Дайте ответ с учётом принципа неопределённости.
2. Можно ли считать функцию $e^{im\varphi}$ собственной функцией оператора $\frac{d^2}{d\varphi^2}$? Ответ подтвердите прямой подстановкой.
3. Докажите теорему о том, что если оператор самосопряжённый, то его собственные значения вещественны.

Вариант №2

1. Постулат квантовой механики о волновой функции. Какие из следующих функций отвечают требованиям, предъявляемым к функциям состояния, и в какой области изменения аргумента: e^x ; e^{x^2} ; $x^m e^{-x^2}$; $\sin x \cdot e^{-x^2}$?
2. Можно ли считать функцию $\cos \vartheta$ собственной функцией оператора $\frac{d^2}{d\vartheta^2}$?
Ответ подтвердите прямой подстановкой.
3. Что такое атомная орбиталь? Какова пространственная конфигурация s -, p_x -, p_y - и d_{xy} -электронных орбиталей?

Вариант №3

1. Постулат об операторах. Перечислите какой из динамических переменных ставится в соответствие тот или другой оператор. Каким требованиям должен соответствовать квантовомеханический оператор?
2. Подействуйте оператором $i \cdot \frac{d^2}{d\varphi^2}$ на функцию $e^{im\varphi}$. Можно ли считать её собственной функцией данного оператора?
3. Докажите теорему о том, что собственные функции самосопряжённого оператора, принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны между собой.

Вариант №4

1. Какие операторы будут называться коммутирующими? В каком случае две физические величины могут быть измерены одновременно?
2. Пусть $\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2}$. При каком значении L функция $f = \sin kx$ является решением уравнения $\hat{L} f = Lf$?
3. Докажите теорему о том, что если несколько собственных функций принадлежат одинаковым собственным значениям, то любая линейная комбинация из этих функций является решением того же операторного уравнения и с тем же собственным значением.

Вариант №5

1. Какому уравнению должна удовлетворять функция состояния? Кем это уравнение было постулировано? Какая функция называется собственной функцией оператора?
2. Удовлетворяет ли функция e^{ax} уравнению $\hat{L} f = Lf$, если $\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2}$?
3. Докажите теорему о том, что если два оператора имеют общую полную систему собственных функций, они коммутируют.

Вариант №6

1. В чём состоит принцип суперпозиции? Каково значение этого принципа в квантовой механике?
2. Удовлетворяет ли функция $\sin kx$ уравнению $\hat{L} f = Lf$, если $\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2}$?
3. Докажите теорему о том, что если два оператора коммутируют, то они имеют общие собственные функции.

Вариант №7

1. Постулат квантовой механики о среднем значении физической величины и способах её расчёта. Какие выводы следуют из этого постулата?
2. Докажите, что уравнению $\frac{d^2 f}{dx^2} = -k^2 f$ удовлетворяет функция $f = \cos kx$, а также линейная комбинация вида $f = c_1 \sin kx + c_2 \cos kx$, где c_1 и c_2 - произвольные постоянные.
3. Объясните смысл теоремы о том, что система собственных функций операторного уравнения полна, и обоснуйте её.

Вариант №8

1. Постулат квантовой механики об антисимметрии волновой функции электронов. Кем введён был этот постулат и в связи с чем? Каково его значение?
2. Дан оператор $\hat{A} = \frac{d}{dx}$. Найдите функцию, в которую переводит оператор \hat{A}^2 функцию $\sin x$.
3. Как задать в квантовой механике состояние системы? Чем отличается описание состояния частиц в квантовой механике от описания его в классической механике?

Вариант №9

1. Вариационный метод. Теорема, на которой он основывается. Что такое пробная волновая функция? Чем она отличается от собственной волновой функции данного оператора?

2. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2}$ на расстоянии $[0, a]$ при $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$ в одномерном потенциальном ящике.
3. Что подразумевается под утверждением, что задание волновой функции Ψ полностью определяет состояние системы?

Вариант №10

1. Решение уравнения Шрёдингера для движения частицы по окружности. Какие выводы можно сделать из этого решения?
2. Покажите, что если Ψ_1 и Ψ_2 - две собственные функции оператора \hat{H} , соответствующим различным собственным значениям E_1 и E_2 , то их любая линейная комбинация не будет собственной функцией этого оператора.
3. Какие эксперименты указывают на невозможность классического описания движения микрочастиц?

Вариант №11

1. Понятие об одномерном потенциальном ящике. Решение уравнения Шрёдингера для одномерного потенциального ящика. Какие выводы следуют из этого решения?
2. Докажите, что произведение двух линейных операторов \hat{A} и \hat{B} является линейным оператором. Приведите примеры.
3. Могут ли одновременно давать точные значения величины x и p_y ? Ответ обоснуйте.

Вариант №12

1. Понятие о трёхмерном потенциальном ящике. Решение уравнения Шрёдингера для трёхмерного потенциального ящика. Какие выводы из него следуют?
2. Проверьте, являются ли самосопряжёнными операторами $\frac{d}{dy}$ и $i \cdot \frac{d}{dy}$. Ответ обоснуйте.
3. Почему для описания движения микрочастиц нельзя пользоваться понятием траектория или орбита?

Вариант №13

1. Задача об атоме водорода. Понятие о сферической системе координат. Вид оператора Лапласа в сферической системе координат. Разделение переменных.
2. Какие из операторов линейны: $\frac{d}{dx}$; $\frac{d^n}{dx^n}$; $\cos x$; Δ . Ответ обоснуйте.
3. Операторное уравнение имеет вид $-i \frac{df(\varphi)}{d\varphi} = mf(\varphi)$. Убедитесь прямой подстановкой, что его решение есть $f = \exp(im\varphi)$. При каких значениях m функция f будет периодической с периодом 2π ? Ответ поясните.

Вариант №14

1. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей. Различные представления полной $2p_x$ волновой функции: трёхмерное представление, контурная карта, диаграмма изменения волновой функции $2p_x$ вдоль оси x .
2. Нормирована ли функция $f = \exp(im\varphi)$, где m - целое число?

3. Как задать в квантовой механике состояние системы? Ответ поясните.

Вариант №15

1. Понятие об атомных орбиталях. Каков физический смысл квантовых чисел?

2. Подействуйте оператором $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ на функцию $e^{im\varphi}$,

где $\Delta_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} \cdot (\sin \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$. Является ли эта функция собственной функцией указанного оператора?

3. Что означает ортогональность двух волновых функций?

Вариант №16

1. Решение Φ -уравнения для атома водорода методом прямой подстановки предполагаемой собственной функции. Каковы в этом случае собственные значения оператора?

2. Являются ли функции $e^{im\varphi}$ и $\cos \vartheta$ собственными функциями оператора

$\nabla^2_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta}) + (\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2})$? Ответ обоснуйте.

3. Эрмитов ли оператор $i \frac{d}{dx}$? Ответ подтвердите расчётом.

Примерные тестовые вопросы (итоговый тест) для контроля знаний

Тестовое задание №1

1. Подействуйте оператором $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ на функцию $A e^{im\varphi}$, где $\Delta_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} \cdot (\sin \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$.

Является ли данная функция собственной функцией указанного оператора? Варианты ответа:

а) Да, является

б) Нет, не является

в) Предложите иной мотивированный ответ:

Код: М.: с. 59, №42, от. с. 85.

2. Определите, какой динамической переменной соответствует оператор

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\nabla^2_{\vartheta,\varphi}}{r^2} \right\} :$$

а) полной энергии электрона в атоме водорода

б) кинетической энергии электрона в атоме водорода

в) вектору импульса свободного электрона.

Код: М.: с. 71.

3. Если при измерении какой-либо величины получается разброс значений, нужно вычислить среднее значение. Можно ли ограничиться этим для оценки результатов измерения? Варианты ответа:

а) Да, можно

б) Нет, нельзя

в) Сформулируйте более полный мотивированный ответ

Код: М., с. 78, № 59, от. с. 99, 249.

4. Какой вид имеет оператор Гамильтона для молекулы водорода в приближении Борна - Оппенгеймера? Каков смысл приводимых обозначений? Дайте свободный обоснованный ответ.

Код: Мин.: с. 90.

5. Что такое гибридизация валентных атомных орбиталей? Какое строение имеют молекулы типа AB_n , если связь в них образуется за счёт sp -, sp^2 -, sp^3 -, sp^3d -, sp^3d^2 -гибридизации орбиталей атома А? Приведите примеры подобных молекул. Ответ свободный.

Код: Мин. с. 152.

Тестовое задание №2

1. Является ли функция $\cos k\vartheta$ собственной функцией оператора

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta}) + (\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}) ?$$
 Варианты ответа:

а) Да, является

б) Нет, не является

в) Укажите возможный более полный мотивированный ответ:

Код: М., с. 59, № 43, от. с. 121

2. Определите, какой динамической переменной соответствует оператор $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U(x, y, z, t)$:

а) импульсу частицы

б) полной энергии частицы в декартовых координатах

в) кинетической энергии частицы в декартовых координатах.

Код: М., с. 71.

3. Может ли величина $L - \bar{L}$ иметь всего один знак? Варианты ответа:

а) Да, может

б) Нет, не может

в) Укажите возможный более полный и мотивированный ответ

Код: М., с. 78, № 60, от. 99.

4. Какой вид имеет оператор Гамильтона для многоэлектронного атома? Каков физический смысл основного и кулоновского интегралов в этом операторе? Дайте свободный обоснованный ответ.

Код: Мин. с. 51.

5. Какая ковалентная связь называется σ -, π -, δ -связью? Приведите примеры соединений с такими связями. Ответ свободный.

Тестовое задание №3

1. Является ли функция $\psi = c_1 \sin \vartheta + c_2 \cos \vartheta$ собственной функцией оператора

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta}) + (\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}) ?$$
 Варианты ответа:

- а) Да, является
- б) Нет, не является
- в) Приведите иной возможный вариант аргументированного ответа:

2. Определите, какой динамической переменной ставится в соответствие оператор

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}};$$

- а) полной энергии атома водорода
- б) полной энергии атома гелия
- в) моменту импульса частицы

3. Как вы относитесь к утверждению, что средняя величина разности $L - \bar{L}$ всегда равняется нулю?
Варианты:

- а) Утверждение верно
- б) Утверждение неверно
- в) Иной возможный ответ сформулируйте сами

Код: М., с. 78, № 61, от. с. 87

4. Дайте определение понятию энергия сопряжения (делокализации). Чему равна эта энергия для молекулы бутадиена-1,3? Проведите расчёт по методу Хюккеля и постройте энергетическую диаграмму молекулы. Ответ свободный.

5. Как метод ВС объясняет тетраэдрическое строение молекулы CCl_4 и октаэдрическое - SF_6 ? Ответ свободный.

Перечень контрольных вопросов и типовых задач для зачета по дисциплине

«Основы квантовой химии»

1. Механический способ описания. Наблюдаемые величины, их численные значения. Допустимые значения наблюдаемых величин, спектр наблюдаемой величины. Функции распределения. Механическое состояние. Уравнение состояния и функции состояния. Фундаментальный набор, число степеней свободы. Пространство состояний, изображающая точка и вектор состояния. Сравнение классической, статистической и квантовой механики.
2. Механика микрочастиц. Особенности процедуры измерения и конструкции приборов. Дискретно-вероятностный характер микроскопических явлений. Оптико-механическая аналогия, гипотеза Де-Бройля, корпускулярная и волновая механика.
3. Вероятности и амплитуды. Свойства амплитуд вероятности, их изменения в пространстве и времени. Сложение и умножение амплитуд.
4. Квантово-механическое состояние, вектор состояния, бра- и кет-векторы. Пространство состояний, его базисы, принцип суперпозиции. Вектор состояния и волновая функция.
5. Квантово-механические операторы наблюдаемых, их матричные представления. Собственные векторы и их функциональные представления (волновые функции). Собственные значения операторов, их физический смысл.
6. Совместно-измеримые и совместно-неизмеримые наблюдаемые. Коммутационные соотношения квантово-механических операторов. Принцип неопределенности Гейзенберга.
7. Эволюция наблюдаемых во времени. Уравнение эволюции. Оператор Гамильтона и уравнение Шредингера. Стационарные состояния, спектр энергий. Стационарное уравнение Шредингера. Сравнение классической, статистической и квантовой механики.

8. Суперпозиционные нестационарные состояния, их эволюция во времени. Квантовые переходы между стационарными состояниями в результате внешних возмущений.
9. Операторы импульса и момента импульса и их проекций, собственные состояния.
10. Неразличимость микрочастиц, симметричные и антисимметричные волновые функции. Принцип Паули. Фермионы и бозоны.
11. Спиповые свойства микрочастиц. Спиповой и магнитный моменты. Прибор Штерна-Герлаха. Характеристики спина: модуль и проекция, их допустимые значения. Мультиплетность. Спиповые волновые функции.
12. Принципы построения квантово-механических моделей многоэлектронных систем. Приближение невзаимодействующих частиц, построение глобальной волновой функции из одночастичных функций-орбиталей. Операторы для многочастичных систем. Глобальные и локальные наблюдаемые.
13. Системы из взаимодействующих частиц. Орбитальная модель, построение глобальной волновой функции в виде определителя Слэтера.
14. Проблема подбора и оптимизации орбиталей. Вариационный принцип. Понятие о методе ССП. Спин-орбитали.
15. Симметрия, ее разновидности. Способы описания симметрии: операции и элементы симметрии, группы симметрии. Типы симметрии (неприводимые представления групп). Таблицы характеров. Физико-химические приложения.
16. Векторы. Линейные векторные пространства. Операции с векторами (сложение и умножение на число). Скалярное произведение векторов, длина (норма) вектора, нормировка. Углы между векторами.
17. Линейные операторы и их свойства. Спектр оператора (собственные значения и собственные векторы) и методы его нахождения.
18. Модель свободной частицы. Стационарные состояния, наблюдаемые и волновые функции. Физико-химические приложения.
19. Модель частицы в трехмерном потенциальном ящике. Стационарные состояния, наблюдаемые и волновые функции. Влияние размеров и формы ящика. Взаимодействие частицы в ящике с термостатом. Физико-химические приложения.
20. Модель одномерного осциллятора. Стационарные состояния, наблюдаемые и волновые функции. Многомерный осциллятор. Нормальные колебания. Взаимодействие осциллятора с термостатом. Физико-химические приложения.
21. Модель плоского ротатора. Стационарные состояния, наблюдаемые и волновые функции. Взаимодействие ротатора с термостатом. Физико-химические приложения.
22. Эволюция волновой функции во времени. Молекулярный ион водорода. Квантово-механический резонанс. Физико-химические приложения.
23. Квантово-механическое описание одноэлектронного атома. Стационарные состояния. Квантовые числа. Волновые функции, их узловая структура и симметрия. Наблюдаемые, их допустимые значения.
24. Методика построения электронных волновых функций молекул в методах ВС и МО. Влияние симметрии объекта. Молекулярные орбитали, их типы (канонические и локализованные) и характеристики. Узловая структура волновых функций, и связь с энергией.
25. Энергетические и корреляционные диаграммы молекул. Электронные конфигурации. Конфигурационное взаимодействие в методе МО.
26. Простой метод Хюккеля. Область применимости. Общие закономерности.
27. Поверхность потенциальной энергии молекул. Структура ППЭ и методы ее описания (энергетические карты и энергетические профили). Химические формы и переходы между ними.

Типовые задачи для зачета

1. Для двух векторов с известными координатами вычислить их модули, скалярное произведение и величину угла между векторами.

2. Преобразовать вектор-строку и вектор-столбец с заданными координатами посредством матричного оператора.
3. Найти матрицу оператора, построенного из двух других известных операторов по некоторому правилу (сложение, умножение, возведение в степень).
4. Вычислить вероятность сложного события, если известны амплитуды элементарных событий.
5. Определить, к какому типу частиц (фермион или бозон) и систем (фермионная или бозонная) относится объект (ядро, атом, молекула, ион).
6. Вычислить спиновое квантовое число по мультиплетности.
7. Определить относительное положение на энергетической шкале для набора молекул, находящихся в изолированном потенциальном ящике в одинаковых условиях.
8. Составить волновую функцию в виде определителя Слетера для заданного атома, иона, молекулы.
9. Написать вид оператора Гамильтона для атома, иона или молекулы в декартовой системе координат.
10. Построить ЛМО в виде ЛКАО для указанной химической связи в заданной молекуле. Указать тип симметрии этой ЛМО (σ -, π - или δ -).
11. Указать мезомерные эффекты и их типы для заданной молекулы.
12. Для заданной молекулы с известной матрицей коэффициентов МО вычислить заряды атомов и порядки связей.

Оценивание ответа студента на зачете

<i>Характеристика ответа</i>	<i>баллы</i>
Дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, показана совокупность осознанных знаний об объекте, проявляющаяся в свободном оперировании понятиями, умении выделить существенные и несущественные его признаки, причинно-следственные связи. Знание об объекте демонстрируется на фоне понимания его в системе данной науки и междисциплинарных связей. Ответ формулируется в терминах науки, изложен литературным языком, логичен, доказателен, демонстрирует авторскую позицию студента.	46-50
Дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, показана совокупность осознанных знаний об объекте, доказательно раскрыты основные положения темы; в ответе прослеживается четкая структура, логическая последовательность, отражающая сущность раскрываемых понятий, теорий, явлений. Знание об объекте демонстрируется на фоне понимания его в системе данной науки и междисциплинарных связей. Ответ изложен литературным языком в терминах науки. Могут быть допущены недочеты в определении понятий, исправленные студентом самостоятельно в процессе ответа.	41-45
Дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, показано умение выделить существенные и несущественные признаки, причинно-следственные связи. Ответ четко структурирован, логичен, изложен в терминах науки. Однако допущены незначительные ошибки или недочеты, исправленные студентом с помощью «наводящих» вопросов преподавателя.	36-40
Дан полный, но недостаточно последовательный ответ на поставленный вопрос, но при этом показано умение выделить существенные и несущественные признаки и причинно-следственные связи. Ответ логичен и изложен в терминах науки. Могут быть допущены 1–2 ошибки в определении основных понятий, которые студент затрудняется исправить самостоятельно.	31-35
Дан недостаточно полный и недостаточно развернутый ответ. Логика и последовательность изложения имеют нарушения. Допущены ошибки в раскрытии понятий, употреблении терминов. Студент не способен самостоятельно выделить существенные и несущественные признаки и причинно-следственные связи. Студент может конкретизировать обобщенные знания, доказав на примерах их основные положения только с помощью преподавателя. Речевое оформление требует поправок, коррекции.	26-30

Дан неполный ответ, логика и последовательность изложения имеют существенные нарушения. Допущены грубые ошибки при определении сущности раскрываемых понятий, теорий, явлений, вследствие непонимания студентом их существенных и несущественных признаков и связей. В ответе отсутствуют выводы. Умение раскрыть конкретные проявления обобщенных знаний не показано. Речевое оформление требует поправок, коррекции.	21-25
Дан неполный ответ, представляющий собой разрозненные знания по теме вопроса с существенными ошибками в определениях. Присутствуют фрагментарность, нелогичность изложения. Студент не осознает связь данного понятия, теории, явления с другими объектами дисциплины. Отсутствуют выводы, конкретизация и доказательность изложения. Речь неграмотная. Дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя не приводят к коррекции ответа студента не только на поставленный вопрос, но и на другие вопросы дисциплины.	1-20
Не получены ответы по базовым вопросам дисциплины.	0

Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Уровень сформированности компетенций			
«Минимальный уровень не достигнут» (менее 55 баллов) Компетенции не сформированы. Знания отсутствуют, умения и навыки не сформированы.	«Минимальный уровень» (56-70 баллов) Компетенции сформированы. Сформированы базовые структуры знаний. Умения фрагментарны и носят репродуктивный характер. Демонстрируется низкий уровень самостоятельности практического навыка.	«Средний уровень» (71-85 баллов) Компетенции сформированы. Знания обширные, системные. Умения носят репродуктивный характер, применяются к решению типовых заданий. Демонстрируется достаточный уровень самостоятельности устойчивого практического навыка.	«Высокий уровень» (86-100 баллов) Компетенции сформированы. Знания твердые, аргументированные, всесторонние. Умения успешно применяются к решению как типовых, так и нестандартных творческих заданий. Демонстрируется высокий уровень самостоятельности и, высокая адаптивность практического навыка
Описание критериев оценивания			
Обучающийся демонстрирует: - существенные пробелы в знаниях учебного материала; - допускаются принципиальные ошибки при ответе на основные вопросы билета, отсутствует знание и понимание основных понятий и категорий;	Обучающийся демонстрирует: - знания теоретического материала; - неполные ответы на основные вопросы, ошибки в ответе, недостаточное понимание сущности излагаемых вопросов; - неуверенные и неточные ответы на дополнительные вопросы;	Обучающийся демонстрирует: - знание и понимание основных вопросов контролируемого объема программного материала; - твердые знания теоретического материала. - способность устанавливать и объяснять связь	Обучающийся демонстрирует: - глубокие, всесторонние и аргументированные знания программного материала; - полное понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых

<ul style="list-style-type: none"> - непонимание сущности дополнительных вопросов в рамках заданий билета; - отсутствие умения выполнять практические задания, предусмотренные программой дисциплины; - отсутствие готовности (способности) к дискуссии и низкую степень контактности. 	<ul style="list-style-type: none"> - недостаточное владение литературой, рекомендованной программой дисциплины; - умение без грубых ошибок решать практические задания, которые следует выполнить. 	<ul style="list-style-type: none"> практики и теории, выявлять противоречия, проблемы и тенденции развития; - правильные и конкретные, без грубых ошибок, ответы на поставленные вопросы; - умение решать практические задания, которые следует выполнить; - владение основной литературой, рекомендованной программой дисциплины; - наличие собственной обоснованной позиции по обсуждаемым вопросам. Возможны незначительные оговорки и неточности в раскрытии отдельных положений вопросов билета, присутствует неуверенность в ответах на вопросы 	<ul style="list-style-type: none"> процессов и явлений, точное знание основных понятий в рамках обсуждаемых заданий; - способность устанавливать и объяснять связь практики и теории; - логически последовательные, содержательные, конкретные и исчерпывающие ответы на все задания билета, а также дополнительные вопросы экзаменатора; - умение решать практические задания; - свободное использование в ответах на вопросы материалов рекомендованной основной и дополнительной литературы.
Оценка «неудовлетворительно» /незачтено	Оценка «удовлетворительно» / «зачтено»	Оценка «хорошо» / «зачтено»	Оценка «отлично» / «зачтено»

Темы лабораторных работ (Лабораторный практикум).

Лабораторный практикум учебным планом не предусмотрен.

Примерная тематика курсовых работ.

Курсовые работы учебным планом не предусмотрены.

9. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Литература

а) основная литература:

1. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. **Часть 1:** учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.

2. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. **Часть 2:** учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва:

Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>

3. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. **Часть 1.** Квантовая механика: учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва: Издательство Юрайт, 2019. — 183 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00127-3. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/437641>.

4. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. **Часть 2.** Квантовая химия: учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва: Издательство Юрайт, 2019. — 402 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/437642>.

5. Майер И., Избранные главы квантовой химии / И. Майер - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 387 с. - ISBN 978-5-00101-501-7 - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015017.html>

6. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон - Москва: Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. (Учебник для высшей школы) - ISBN 978-5-00101-502-4. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html> - Режим доступа: по подписке.

7. Боженко К.В., Основы квантовой химии: конспект лекций / К.В. Боженко. - М.: Издательство РУДН, 2010. - 124 с. - ISBN 978-5-209-03510-7 - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785209035107.html>

8. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». — Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. — 100 с. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>

9. Ведринский, Р.В. Квантовая механика / Р.В. Ведринский; Федеральное агентство по образованию Российской Федерации, Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Южный федеральный университет". — Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2009. — 384 с. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937>.

10. Квантовая теория / И.В. Копытин, А.С. Корнев, Н.Л. Манаков, М.В. Фролов. — 2-е изд., стер. — Москва; Берлин: Директ-Медиа, 2018. — 263 с.: ил., табл., схем. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=480949>. — Библиогр. в кн. — ISBN 978-5-4475-9530-2. — DOI 10.23681/480949. — Текст: электронный.

б) дополнительная литература

11. Агишев, А.Ш. Основы квантовой механики и ЯМР-спектроскопии / А.Ш. Агишев, И.П. Шишкина, М.А. Агишева; Министерство образования и науки России, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет». — Казань: Издательство КНИТУ, 2013. — 107 с.: ил., табл., схем. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=258680>

12. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с.

13. Елютин П.В., Квантовая механика (с задачами) / Под ред. Н.Н. Боголюбова. - изд. 2-е, перераб. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000. - 304 с. - ISBN 5-9221-0077-7 - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5922100777.html>

14. Крашенинин, В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>.
15. Крашенинин, В.И. Симметрия в химии / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013. – 80 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232679>
16. Громова, Е.Ю. Строение атома. Химическая связь / Е.Ю. Громова, Л.А. Альметкина, Г.В. Булидорова; Министерство образования и науки России, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет». – Казань: Издательство КНИТУ, 2017. – 108 с.: ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=500901>.
17. Общая и неорганическая химия / В.В. Денисов, В.М. Таланов, И.А. Денисова, Т.И. Дровозова; под ред. В.В. Денисова, В.М. Таланова. – Ростов-на-Дону: Издательство «Феникс», 2013. – 576 с.: ил., схем., табл. – (Высшее образование). – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=271598>.
18. Лупейко, Т.Г. Методологический базис химии. Как решаются научные задачи: учебник с результатами авторских исследований / Т.Г. Лупейко; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет», Химический факультет. – Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2018. – 447 с.: ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=499746>

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

Обеспечен доступ к современным профессиональным базам данных, информационным справочным и поисковым системам (библиотека СОГУ):

- **Электронная библиотека диссертаций и авторефератов РГБ (ЭБД РГБ)**
Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
- **ЭБС «Университетская библиотека ONLINE»**
Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
- **ЭБС «Научная электронная библиотека eLibrary.ru»**
Самостоятельная регистрация на сайте
- **ЭБС «Консультант студента» Студенческая электронная библиотека по медицинскому и фармацевтическому образованию, а также по естественным и точным наукам в целом**
Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
- **ЭБС «Юрайт» — образовательная среда, включающая виртуальный читальный зал учебников и учебных пособий от авторов из ведущих вузов России по всем направлениям и специальностям**
Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
- **Springer Customer Service Center GmbH** (база данных, содержащие электронные издания издательства Springer Nature за период 2011 — 2017 гг. (полнотекстовая коллекция в количестве 46 332 книг)

Сайт дистанционного обучения СОГУ <http://lms.nosu.ru/>

**Электронные ресурсы, обеспечивающие реализацию образовательных программ
ФГБОУ ВО «Северо-Осетинский государственный университет имени Коста Левановича Хетагурова»**

№ №	Наименование Электронного ресурса	Принад лежн ость	Адрес сайта	Сведения о право обладателе	№ договора на право использования ЭБС	Срок действия заключённого договора	Кол-во точек доступа/ пользователей	Характерист ика доступа
1	ЭБС "Университетская библиотека Online"	Сторонняя	http://www.biblioclub.ru	ООО «Некс- Медиа»	Договор № 135-06/14 от 12.09.2014 г.	12.09.2014 г.-11.09.2015 г.	7000	По IP-адресу безлимитный
					Договор № 167-08/15 от 12.09.2015 г.	12.09.2015 г.-11.03.2016 г.	7000	
					Договор № 58-02/16 от 09.03.2016 г.	12.03.2016г.-11.09.2016г.	7000	
					Договор № 202-08/16 от 24.08.2016 г.	12.09.2016 г.-11.03.2017 г.	7000	
					Договор № 069-02/17 от 13.03.2017	12.03.2017г. -11.03.2018г.	7000	
					Договор № 184-08/17 от 04.09.2017	12.09.2017-11.02.03.2018.	7000	
					Договор № 056-02/18 от 25.05.2018	16.04.2018г.- 16.10.2018г.	7000	
					Договор № 163-10/18 от 30.10.2018	17.10.2018г.-31.12.2018г.	7000	
					Договор № 21-02/2019 от 14.02.2019	01.01.2019г.- 30.06.2019г.	7000	
					Договор № 75-06,19 От 8.07.2019	01.07.19г.-31.12.2019г.	1000	
					Договор № 171-12,2019 от 10.02.2020	10.02.2020г. - 31.12.2020г.	1000	
2	Электронная библиотека	Сторонняя	https://dv.srsl.ru	ФГБУ "РГБ"	Договор № 095/040100 от 04. 04. 2014 г.	12.04.2014 г.-11.04.2015 г.	10	в читальном зале

	диссертаций РГБ (ЭБД РГБ)				Договор № 095/04/0216 от 18.05.2015 г.	18.05.2015 г.-17.05.2016 г.		НБ СОГУ безлимитный
					Договор № 095/04/0308 от 24.08.2016 г.	23.09.2016 г.-22.03.2017 г.		
					Договор № 095/04/0199 от 08.11.2017 г.	27.11.2017г. по 26.05.2018г		
					Договор № 095/04/0135 от 15.10.2018	15.10.2018г.-15.01.2019г.		
					Договор № 095/04/0029 от 19.02.2019	01.03.2019г.- 31.05.2019г		
					Договор №095/04/0130 От 01.07.2019	05.08.2019г. -05.11.19г. В связи с пандемией доступ продлен до 23.11..2020г.		
3	Электронная библиотека «Консультант студента»	Сторонняя	http://www.studmedlib.ru/	ООО «ГЭОТАР»	Договор №174КС/09-2014 от 11.09.2014	20.09.2014г. - 20.09.2015г.	200 карт доступа	безлимитный
				ООО«Политех ресурс»	Договор №145СЛ/02-2019 от 27.02.2019г.	01.03.2019г.01.03.2020г.	300ключей доступа. 300 карт доступа	безлимитный
				ООО«Политех ресурс»	Договор №208СЛ/01-2020	26.01-2020г.-26.02.2021г.		
4	Универсальная база данных «East- View»	Сторонняя	dlib.eastview.com	ООО «Ивис»	Договор № 77-П от 04.05.2016 г.	01.07.2016 г.-31.12.2016 г.	Кол-во доступов не ограничено	Безлимитный
					Договор № 310-П от 10.01.2017 г.	01.01.2017 г.-30.06.2017 г.		
5	Научная электронная библиотека eLibrary.ru	Сторонняя	http://elibrary.ru	ООО "Научная электронная библиотека"	Лицензионное соглашение № 5051 от 02.09.2009 г.	Бессрочное	Кол-во доступов не ограничено	Безлимитный

	База данных «ЭБС elibrary»			ООО РУНЭБ	Договор № SU-20-12/2016-1 от 28.12.2016 г. Лицензионное соглашение № 4758	29.12.2016 г.-28.12.2026 г.	Кол-во доступов не ограничено	По IP-адресу безлимитный
6	Электронная библиотека «Юрайт»	Сторонняя	biblio- online.ru	ООО «Юрайт»	Договор № 1ЭЮ от 27.02.19	01.03.2019г. – 01.03.2020г.	Кол-во доступов не ограничено	По IP-адресу безлимитный
					Договор №32008816384	01.03.2020 г. -28.02 2021 г.	Кол-во доступов не ограничено	По IP-адресу безлимитный

Рекомендуемые интернет-адреса по химии:

1. Weisberg M., Needham P., Hendry R. Philosophy of Chemistry (First published Mar 14, 2011) // The Stanford Encyclopedia of Philosophy. Edited by Edward N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/entries/chemistry/>
2. HYLE. International Journal for Philosophy of Chemistry. <http://www.hyle.org/journal/concept.htm>
3. ГОСТы <http://www.vsegost.com>
4. <http://www.chemistry-chemists.com/Uchebniki.html> - учебники, практикумы и справочники по химии.
5. <http://chemport.ru/> - различные учебно-методические материалы по химии.
6. <http://ximicat.com/> - образовательный сайт.
7. <http://www.nehudlit.ru/books/subcat281.html> - учебники, практикумы и справочники по химии.
8. <https://minobrnauki.gov.ru/> Официальный сайт Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.
9. База данных Реферативных журналов ВИНТИ http://www2.viniti.ru/index.php?id=238&Itemid=53&option=com_content&task=view
10. <https://www.edu.ru/> "Российское образование" Федеральный портал. Каталог образовательных интернет-ресурсов.
11. Российская государственная библиотека: <http://www.rsl.ru>
12. Научная электронная библиотека: <https://www.elibrary.ru/defaultx.asp>
13. Научная библиотека МГУ им. М.В. Ломоносова: <http://www.lib.msu.ru>
14. Электронные химические библиотеки: www.chemlib.ru, www.chemist.ru, www.chemnet.ru

Базы данных:

1. Scopus <https://www.scopus.com/>
2. Web of Science <https://clarivate.com/webofsciencegroup/solutions/web-of-science/>

Состав лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства

№ п/п	Наименование	№ договора (лицензия)
1.	Windows 7 Professional	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г.
2.	Office Standard 2016	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г.
3.	Антивирусное программное обеспечение KasperskyTotalSecurity	№17Е0-180222-130819-587-185 от 26.02. 2018 до 14.03.2019 г, продлена до 2021 г.
4.	Программа для ЭВМ «Банк вопросов для контроля знаний»	Разработка СОГУ Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015611829 от 06.02.2015 г. (бессрочно)
5.	CiscoWebex- Система проведения вебинаров.	ООО Айтэкдоговор № Д83-2020 от 10.08.2020-10.08.2021 г.
6.	Система поиска текстовых заимствований «Антиплагиат.ВУЗ»	№795 от 26.12.2020 (действителен до 30.12.2021г) с ЗАО «Анти-Плагиат»
7.	Программное обеспечение для редактирования химических формул Isis Draw	Свободное программное обеспечение(бессрочно)
8.	Система тестирования Sunrav	№468 от 03.12.2013 ИП Сунгатулин Р.Т.(бессрочно)

	WEB Class	
--	-----------	--

1.	Электронная библиотека диссертации и авторефератов РГБ(ЭБД РГБ)	https://dvs.rsl.ru Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
2.	ЭБС"Университетская библиотека ONLINE"	https://biblioclub.ru Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
3.	ЭБС «Научная электронная библиотека eLibrary.ru»	http://elibrary.ru Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
4.	Универсальная баз данных East View	https://dlib.eastview.com Логин: Khetagurov; Пароль: Khetagurov
5.	ЭБС «Консультант студента» Студенческая электронная библиотека по медицинскому и фармацевтическому образованию, а также по естественным и точным наукам в целом.	http://www.studentlibrary.ru Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
6.	ЭБС «Юрайт» - образовательная среда, включающая виртуальный читальный зал учебников и учебных пособий от авторов из ведущих вузов России по всем направлениям и специальностям	www.biblio-online.ru Требуется регистрация в библиотеке СОГУ

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

№ п/п	Наименование учебных предметов, курсов, дисциплин (модулей), практики, иных видов учебной деятельности, предусмотренных учебным планом образовательной программы	Наименование помещений для проведения всех видов учебной деятельности, предусмотренной учебным планом, в том числе помещения для самостоятельной работы, с указанием перечня основного оборудования, учебно-наглядных пособий и используемого программного обеспечения	Адрес (местоположение) помещений для проведения всех видов учебной деятельности, предусмотренной учебным планом (в случае реализации образовательной программы в сетевой форме дополнительно указывается наименование организации, с которой заключен договор)
1.	Основы квантовой химии	Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также самостоятельной работы обучающихся: преподавательский стол, стул, столы и стулья для обучающихся, кафедра, классная доска. Оборудование: мультимедийный комплекс (проектор, экран), ноутбук, колонки Программное обеспечение Microsoft Windows 7 Professional; Microsoft Office Standard 2016; 7-zip; WinRAR; Adobe Acrobat Reader; STDU Viewer; Mozilla Firefox; Google Chrome; Kaspersky Security Cloud демонстрационные и учебно-наглядные пособия (видеопрезентация).;	Российская Федерация, 362025, Республика Северная Осетия –Алания, город Владикавказ, улица Ватутина, дом 44-46, учебный корпус № 7, ауд. № 414
		Лаборатория Физико-химических методов анализа органических соединений для проведения занятий семинарского типа, лабораторных занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, а также самостоятельной работы обучающихся: преподавательский стол, стул, столы и стулья для обучающихся, лабораторные столы, кафедра, классная доска. Оборудование: Мультимедийный проектор с экраном (Мультимедийный проектор OPTOMA projector DX32, с потолочным креплением и наб. кабелей – 1 шт. Компьютер д/комп. класса Pentium 4-506 Foxconn 915 GL7MH-S 512 Mb ОЗУ+/клавиат – 1шт. Компьютер Pentium 4-506 Foxconn 915 GL7MH-S 512 Mb ОЗУ – 1шт. Компьютер в комплекте (Монитор (AOC E2250Swnk <Black>)//Системн – 3шт. Программное обеспечение: Microsoft Windows 7 Professional; Microsoft Office Standard 2016; 7-zip; WinRAR; Adobe Acrobat Reader; STDU Viewer; Mozilla Firefox; Google Chrome; Kaspersky Security Cloud); Система тестирования Sunrav WEB Class (Бессрочное ПО); Программное обеспечение для редактирования химических формул Isis Draw (Бесплатное ПО); Консультант плюс; демонстрационные и учебно-наглядные пособия	Российская Федерация, 362025, Республика Северная Осетия –Алания, город Владикавказ, улица Ватутина, дом 44-46, учебный корпус № 7, ауд. № 318

	<p>(видеопрезентация)</p> <p>Лабораторное оборудование: Вытяжной шкаф - 1 шт. Потенциометр ПП-63М -1шт. Поляриметр круговой СМ-3 -1шт. Спектрофотометр ПЭ 5400 УФ -1шт. Термостат Huber CC-K6 – 1шт. Хромато-масс-спектрометр ThermoScientific - TRACE 1300 ISQ (Thermo Fisher Scientif – 1 шт. Компьютер Dell (системный блок+монитор) – 1шт. Потенциостат SP 50 – 1шт. Источник бесперебойного питания APC-SURT6000 – 1шт. Компенсограф ОН 814 – 1шт. Весы аналитические ВА-35 – 1 шт. Весы лабораторные прецизионные ЕТ-300П – 1шт. Печь муфельная ЧОЛ -1шт. Мешалка верхнеприводная EUROSTAR 40 – 1шт. Мешалка магнитная IKA RST – 1шт. Мешалка магнитная многоместная б/под. – 1шт. Насос мембранный вакуумный V700 – 1шт. Насос вакуумный РВН-20 – 1шт. Холодильник двухкамерный SAMSUNG RT – 1шт.</p>	
	<p>Лаборатории: компьютерные классы для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации, а также самостоятельной работы обучающихся:</p> <p>преподавательский стол, стул, столы и стулья для обучающихся, кафедра, классная доска. Оборудование: Компьютеры для компьютерного класса в комплекте (12 рабочих мест) с программным обеспечением, выходом в сеть Интернет и доступом в электронную информационно-образовательную среду СОГУ; источники бесперебойного питания, Ippon, коммутатор для класса D-Link DGS-10240, интерактивная доска 78*(1702070/15112/11344/2+ проектор Beno MX503.</p> <p>Программное обеспечение: Microsoft Windows 7 Professional; Microsoft Office Standard 2016; 7-zip; WinRAR; Adobe Acrobat Reader; STDU Viewer; Mozilla Firefox; Google Chrome; Kaspersky Security Cloud); Система тестирования Sunrav WEB Class (Бессрочное ПО); Программное обеспечение для редактирования химических формул Isis Draw (Бессрочное ПО); Консультант плюс; Система поиска текстовых заимствований «Антиплагиат ВУЗ»; Программа для ЭВМ «Банк вопросов для контроля знаний»; Гарант; Cisco Webex; демонстрационные и учебно-наглядные пособия (видеопрезентация)</p>	<p>Российская Федерация, 362025, Республика Северная Осетия – Алания, город Владикавказ, улица Ватутина, дом 44-46, учебный корпус № 7, ауд. № 614</p>
	<p>Библиотека, в том числе читальный зал: столы и стулья для обучающихся, компьютеры в комплекте (10 рабочих мест) с программным обеспечением, выходом в сеть Интернет и доступом в электронную информационно-образовательную среду СОГУ</p> <p>Программное обеспечение: Microsoft Windows 7 Professional; Microsoft Office Standard 2016; 7-zip; WinRAR; Adobe Acrobat Reader; STDU Viewer; Mozilla Firefox; Google Chrome; Kaspersky Security Cloud); Консультант плюс; Гарант; Cisco Webex;</p> <p>ЭБС "Университетская библиотека ONLINE" https://biblioclub.ru</p> <p>ЭБС «Консультант студента» http://www.studentlibrary.ru</p> <p>ЭБС «Юрайт» www.biblio-online.ru</p>	<p>Российская Федерация, 362025, Республика Северная Осетия – Алания, город Владикавказ, улица Церетели/Ватутина, дом 16/19, учебный корпус № 6</p>

