

*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
«Многоуровневое квантомеханическое моделирование физических си-
стем»**

Направление подготовки 03.03.01 Прикладные математика и физика

Профиль подготовки
«Конвергентные нано-, био-, информационные и когнитивные технологии»

Квалификация (степень) выпускника – бакалавр

Форма обучения – очная

Год начала подготовки - 2026

Утверждена в составе ОПОП.

Владикавказ, 2026

1. Структура и общая трудоемкость дисциплины – 3 з.е. (108 ч.)

	Очная форма обучения
Курс	4
Семестр	7
Лекции	14
Практические занятия	-
Лабораторные занятия	14
Консультации	-
Итого аудиторных занятий	28
Самостоятельная работа	44
Курсовая работа	
Контроль	36
Экзамен	+
Зачет	-
Общее количество часов	108

2. Цели и задачи освоения дисциплины

Цель дисциплины:

- изучение научных принципов и методов исследования когнитивных процессов, подготовка к дальнейшему профессиональному использованию этих знаний при разработке перспективных конвергентных технологий.

Задачи дисциплины:

- ознакомление студентов с базовыми теоретическими понятиями и методическими процедурами в области когнитивных наук и технологий;
- демонстрация практического значения междисциплинарных исследований, направленных на изучение когнитивных процессов у человека;
- выработка навыков самостоятельного поиска и оценки информации в области когнитивных наук и технологий;
- подготовка к экспериментальным исследованиям когнитивных процессов у человека в кооперации с представителями когнитивных наук - антропологами, психологами, лингвистами, физиологами, разработчиками систем искусственного интеллекта и робототехники.

3. Место дисциплины в структуре ОПОП бакалавриата

Дисциплина «Многоуровневое квантомеханическое моделирование физических систем» относится к дисциплинам вариативной части Блока 1,Б1.В.11, осваивается на 4 курсе в 7 семестре.

4. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесённых спланируемыми результатами освоения образовательной программы)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций и достижение следующих результатов обучения.

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций, индикаторов
УК-2 Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений	УК-2.1 Формулирует совокупность взаимосвязанных задач в рамках поставленной цели работы, обеспечивающих ее достижение. Определяет ожидаемые результаты решения поставленных задач	Знать: типы базисных функций для неэмпирических расчётов, их классификацию, наборы атомных базисных функций, часто используемые в неэмпирических расчётах, базисную суперпозиционную ошибку и методы её коррекции; классификацию электронных состояний молекулярных систем, и их электронных оболочек, корреляционные свойства полной волновой функции и орбиталей; Уметь: оценивать возможности теоретического исследования многоэлектронных систем различными квантовомеханическими и полуэмпирическими методами; владеть: методом Хартри-Фока, методами теории функционала плотности, методом конфигурационного взаимодействия, многоконfigurационным методом самосогласованного поля, методами теории возмущений
УК-6 Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.2 Способен планировать самостоятельную деятельность в решении профессиональных задач; подвергать критическому анализу предложенную работу; находить и творчески использовать имеющийся опыт в соответствии с задачами саморазвития	знать: многоконfigurационные волновые функции, натуральные орбитали, определение корреляционной энергии, описание Фермиевской дырки, статическую и динамическую корреляцию; метод псевдопотенциала, теорему Гельмана-Феймана, теорему вириала; уметь: оценивать необходимость применения многоконfigurационных волновых функций для описания многоэлектронных систем владеть: основными методами теории электронной структуры систем многих частиц

ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.1 Знает принципы работы и диапазоны рабочих параметров используемого научного оборудования	знать: теорию функционала плотности, теорему и вариационный принцип Хохэнберга-Кона, уравнение Кона-Шама, приближение локальной плотности и известные функционалы; одно и двухэлектронную функцию плотности, представление функционала энергии через функции плотности, анализ заселённости молекулярных орбиталей; вариационный принцип в нерелятивистской квантовой механике, уравнение Хартри-Фока, Хартри и метод самосогласованного поля, принцип заполнения орбиталей электронами, теорему Купманса;
	ПК-3.2 Знает области и критерии применимости используемых теоретических подходов и умение оценивать точность приближенных аналитических методов вычислений	знать: приближения, позволяющие разделять ядерные и электронные переменные в уравнение Шрёдингера, область их применимости, колебания и вращения систем многих частиц; приближение линейной комбинации атомных орбиталей, включая полноту наборов базисных функций и сходимость к точным решениям; правила Слэтера вычисления матричных элементов между детерминантами, теорему Бриллюэна; вычислительную сложность неэмпирических методов, теорию ССП итераций и методы ускорения их сходимости; методы оптимизации геометрии молекулярных систем; вычисление собственных значений матриц степенным методом, методом обратных итераций со сдвигом, методом итераций с отношением Релея, методом ортогонального проектирования, методами подпространства Крылова. уметь: оценивать возможность применения адиабатического приближения и приближения Борна-Оппенгеймера при описании многоэлектронных систем;
	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вы-	знать: представление многоэлектронных антисимметричных волновых функции рядами по детерминантам Слэтера, функционал энергии многоэлектронной системы; метод конфигурационного взаимодействия, многоконфигурационный метод самосогласованного поля, теорию возмущений Мёллера-Плессета; уметь:

	числительных ресурсов	использовать теорему Купманса для оценки потенциалов ионизации многоэлектронных систем
--	-----------------------	--

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

№	Наименование тем (вопросов), изучаемых по данной дисциплине	Занятия		Самостоятельная работа студентов		Формы контроля	Литература
		лек	лаб	Содержание	часы		
1.	Другие приближения и методы, необходимые для описания многоэлектронных систем.	2	2	Электронные функции плотности для однопериодической волновой функции, включая случай замкнутых оболочек. Анализ заселённости молекулярных орбиталей. Неограниченный метод Хартри-Фока. Методы молекулярной механики. Методы молекулярной динамики.	8	Устный опрос, доклад, конспект	[1-6]
2.	Описание многоэлектронных систем в рамках метода Хартри-Фока.	4	4	Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока. Локализованные МО и принципы их локализации. Виртуальные орбитали в методе Хартри-Фока и их физический смысл. Корреляционные свойства полной волновой функции, молекулярных орбиталей и орбитальных	12	Устный опрос, доклад, конспект	[1-6]

				энергий. Многоэлектронные спиновые волновые функции.			
3.	Описание многоэлектронных систем корреляционными методами.	4	4	Метод конфигурационного взаимодействия и его вычислительная схема. Многоконфигурационный метод самосогласованного поля. Теория возмущений Мёллера-Плессетта. Модель Томаса-Ферми. Теория функционала плотности, теорема и вариационный принцип Хохэнберга-Кона, уравнение Кона-Шама, приближение локальной плотности и известные функционалы. Неэмпирические композитные методы. Теоретическая термодинамика.	12	Устный опрос, доклад, конспект	[1-6]
4.	Основные положения квантово-механического описания систем многих частиц.	2	2	Одноэлектронные волновые функции. Матричные элементы одно- и двухэлектронных операторов. Функционал энергии многоэлектронной системы.	6	Устный опрос, доклад, конспект	[1-6]
5.	Основные численные методы неэмпирических вычислений.	2	2	Вычисление собственных значений матриц степенным методом, методом обратных итераций со сдвигом, методом итераций с отношением Релея, методом ортогонального проектирования. Метод истощения для вычисления всех собственных значений. Методы подпространства Крылова и обзор современ-	6	Устный опрос, доклад, конспект	[1-6]

				ных итерационных методов нахождения экстремальных собственных значений симметричных матриц большой размерности.			
Итого		14	14		44		

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 платформы дистанционного обучения Moodle, личный кабинет студента на сайте СОГУ, других элементов ЭИОС СОГУ.

6. Образовательные технологии

Согласно учебному плану в ходе преподавания дисциплины используются традиционные образовательные технологии: лекции, семинарские занятия, самостоятельная работа студентов.

Также при проведении занятий и самостоятельной работе студентов могут быть использованы:

- *интерактивные технологии* («мозговой штурм», дебаты, коллоквиумы, презентационный метод, работа в группах и др.);
- *технологии контекстного обучения* – система дидактических форм, методов и средств, направленная на моделирование содержания будущей профессиональной деятельности специалиста (анализ конкретных ситуаций, методы работы с информационными базами данных, моделирование исторических ситуаций и др.);
- *технологии электронного обучения* (реализуется при помощи электронной образовательной среды СОГУ при использовании ресурсов ЭБС, при проведении автоматизированного тестирования и т. д.).

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 дисциплины может осуществляться через индивидуальные консультации преподавателя очно, в часы консультаций, по электронной почте и с использованием платформ дистанционного обучения (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.

К видам самостоятельной работы при изучении данной дисциплины относится: написание докладов, подготовка презентаций, самостоятельное изучение литературы по теме и составление по ней конспектов, работа со справочными материалами (терминологическими и иными словарями, энциклопедиями) и т.д.

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

Методические рекомендации по дисциплине прилагаются.

Методические рекомендации по выполнению контрольной работы

Критерии оценки контрольной работы могут быть как общие, так и частные. К общим критериям можно отнести следующие:

- соответствие контрольной работы теме;
- глубина и полнота раскрытия темы;
- адекватность передачи содержания первоисточника; логичность, связность; доказательность;
- структурная упорядоченность (наличие введения, основной части, заключения, их оптимальное соотношение);
- оформление (наличие плана, списка литературы, культура цитирования, сноски и т. д.); языковая правильность.

Частные критерии относятся к конкретным структурным частям контрольной работы: введению, основной части, заключению.

1. Критерии оценки введения: наличие обоснования выбора темы, ее актуальности; наличие сформулированных целей и задач работы; наличие краткой характеристики первоисточников.

2. Критерии оценки основной части: структурирование материала по разделам, параграфам, абзацам; наличие заголовков к частям текста и их соответствие содержанию; проблемность и разносторонность в изложении материала; выделение в тексте основных понятий и терминов, их толкование; наличие примеров, иллюстрирующих теоретические положения.

3. Критерии оценки заключения: наличие выводов по результатам анализа; выражение своего мнения по проблеме; наличие приложения: рисунков и схем (при необходимости).

Все требования к контрольной работе сообщаются задолго до его написания. Общая оценка за контрольную работу выставляется следующим образом: от 65% до 80% - «удовлетворительно»; 80-90% - «хорошо»; 90-100% - «отлично».

Методические указания для преподавателей по проведению практических занятий

В начале занятия рекомендуется рассмотреть соответствующий теоретический материал. Затем идет практический разбор изучаемого материала, решаются задачи из сборников по введению в языкознание, разбирается каждый конкретный пример.

В начале практического занятия следует обратить 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.

После предварительной части следует начинать разбирать вопросы, имеющие более длинные сценарии взаимодействия основных идей темы занятия.

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, попытается объективность 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).

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 сообщений, написанию докладов, подготовку презентаций и обсуждений по темам дисциплины - работу в активной и интерактивной формах.

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 занятиях с целью проверки наличия знаний, необходимых для усвоения нового материала или для выяснения степени усвоения изложенного материала; рефераты, доклады, презентации, контрольные работы и др.

Рубежный контроль осуществляется по окончании изучения материала в конце семестра в заранее установленное время. Рубежный контроль проводится с целью определения качества усвоения материала учебного модуля или дисциплины в целом.

8.1. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости

Основными формами *текущего контроля* знаний по дисциплине являются:

- выполнение практических работ;
- задания по теме, вынесенной на самостоятельное изучение;
- проверка домашнего конспекта.

Форма *рубежного контроля*: тест

Формы *промежуточной аттестации*: зачет/экзамен.

Формы контроля и критерии оценивания

Эт ап	Форма контро- ля	Критерии оценивания (процент от максимального кол-ва баллов)			
		86-100 %	71–85%	50–70%	Менее 50%
		отлично / зачет	хорошо / зачет	удовлетвори- тельно / зачет	неудовлетвори- тельно / незачет
1. Текущий контроль (max 40 баллов)					
		33–37 баллов	28–32 баллов	19–27 баллов	0–18 баллов
	Текущая работа в течение модуля (max 37	Студент актив- но работает на занятиях, пре- восходно вы- полняет все за-	Студент актив- но работает на занятиях, хоро- шо выполняет задания препо-	Студент недо- статочно актив- но работает на занятиях, удовлетвори-	Студент недоста- точно активно работает на заня- тиях, неудовле- творительно вы-

	б.)	дания преподавателя.	давателя.	тельно выполняет задания преподавателя.	полняет задания преподавателя.
		3 балла	2 балла	1 балл	0 баллов
	Реферат / доклад / конспект (маx 3б.)	Тема полностью раскрыта. Превосходное владение материалом. Высокий уровень самостоятельности, логичности, аргументированности. Превосходный стиль изложения.	Тема в основном раскрыта. Хорошее владение материалом. Средний уровень самостоятельности, логичности, аргументированности. Хороший стиль изложения.	Тема частично раскрыта. Удовлетворительное владение материалом. Низкий уровень самостоятельности, логичности, аргументированности. Удовлетворительный стиль изложения.	Тема не раскрыта. Неудовлетворительное владение материалом. Недостаточный уровень самостоятельности, логичности, аргументированности. Неудовлетворительный стиль изложения.
2. Рубежный контроль (30 б.)					
	тест/контрольная работа	Количество баллов за выполнение каждого задания указываются в тесте/контрольной работе.			
3. Промежуточная аттестация по дисциплине – 30 баллов					
		Критерии оценивания (процент от максимального кол-ва баллов)			
		86–100 %	71–85%	50–70%	0–49 %
	Зачет/Экзамен	Дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос. Ответ формулируется в терминах науки, изложен литературным языком, логичен, доказателен, демонстрирует авторскую позицию студента.	Дан полный ответ на поставленный вопрос, показано умение выделить существенные и несущественные признаки, причинно-следственные связи. Но допущены незначительные ошибки, исправленные студентом с помощью «наводящих» вопросов преподавателя.	Дан недостаточно полный ответ. Студент не способен самостоятельно выделить существенные и несущественные признаки и причинно-следственные связи. Речевое оформление требует поправок, коррекции.	Не получены ответы по базовым вопросам дисциплины или дан неполный ответ и допущены грубые ошибки. Речь неграмотная. Уточняющие вопросы преподавателя не приводят к коррекции ответа студента не только на поставленный вопрос, но и на другие вопросы дисциплины.

8.2. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Примерный перечень вопросов в тестах

1. Записать условие применимости адиабатического приближения и приближе-

ния Борна-Оппенгеймера.

2. Написать выражение для функционала энергии многоэлектронной системы в адиабатическом приближении с однодетерминантной волновой функцией.

3. Сформулировать метод неопределённых множителей Лагранжа нахождения условного экстремума некоторого функционала.

4. Записать уравнение Хартри-Фока и оператор Фока для однодетерминантной волновой функции.

5. Сформулировать теорему Купманса.

6. Записать правила Слэтера вычисления матричных элементов между детерминантными волновыми функциями.

7. Сформулировать теорему Бриллюэна.

8. Записать оператор возмущения в теории возмущений Мёллера-Плессета.

9. Сформулировать теорему Хохэнберга-Кона.

10. Записать уравнение Кона-Шама.

11. Сформулировать теорему Гельмана-Феймана.

12. Сформулировать теорему вириала.

13. Записать алгоритм вычисления собственных значений матриц степенным методом.

14. Записать алгоритм вычисления собственных значений матриц методом обратных итераций со сдвигом.

Примерный перечень контрольных вопросов в билетах

1. Адиабатическое приближение и приближение Борна-Оппенгеймера, их применимость.

2. Многоэлектронные антисимметричные волновые функции. Одноэлектронные волновые функции. Матричные элементы одно- и двухэлектронных операторов с однодетерминантной волновой функцией. Функционал энергии многоэлектронной системы с однодетерминантной волновой функцией.

3. Вариационный принцип в нерелятивистской квантовой механике и метод неопределённых множителей Лагранжа. Уравнение Хартри-Фока и Хартри. Метод самосогласованного поля.

4. Уравнение Хартри-Фока для состояний с замкнутыми оболочками. Теорема Купманса.

5. Неограниченный метод Хартри-Фока. Физический смысл виртуальных орбиталей.

6. Правила Слэтера вычисления матричных элементов между детерминантными волновыми функциями. Теорема Бриллюэна.

7. Метод конфигурационного взаимодействия и его вычислительная схема. Преобразование двухэлектронных интегралов из базиса АО в базис МО.

8. Теория возмущений Мёллера-Плессета.

9. Теория функционала плотности. Теорема Хохэнберга-Кона. Уравнение Кона-Шама.

1. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Полнота наборов базисных функций и сходимость к точным решениям. Метод Хартри-Фока для состояний с замкнутой оболочкой в приближении ЛКАО.

2. Неограниченный метод Хартри-Фока в приближении ЛКАО.

3. Типы базисных функций для неэмпирических расчётов и их классификация. Сгруппированные базисные функции гауссова типа. Атомные базисные функции, часто используемые в неэмпирических расчётах.

4. Теорема Гельмана-Феймана. Теорема вириала.

5. Теория самосогласованных итераций. Метод динамического сдвига уровней.

6. Экстраполяция в итерационных методах. Линейные и нелинейные проекционные методы экстраполяции.

7. Приведение обобщённой задачи на собственные значения к задаче на собственные значения матрицы с использованием унитарного (ортогонального) разложения и преобразования Холецкого.

8. Вычисление собственных значений матриц степенным методом, методом обратных итераций со сдвигом, методом итераций с отношением Релея.

9. Вычисление собственных значений матриц методом ортогонального проектирования и методом Ланцоша.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Успешное освоение курса требует напряжённой самостоятельной работы студента. В программе курса приведено минимально необходимое время для работы студента над темой. Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение и конспектирование рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала (по конспектам лекций, учебной и научной литературе), подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения, доказательство отдельных утверждений, свойств;
- решение задач, предлагаемых студентам на лекциях и семинарах;
- подготовку к семинарам, коллоквиумам, экзамену.

Руководство и контроль за самостоятельной работой студента осуществляется в форме индивидуальных консультаций. Показателем владения материалом служит умение решать задачи. Для формирования умения применять теоретические знания на практике студенту необходимо решать, как можно больше задач. При решении задач каждое действие необходимо аргументировать, ссылаясь на известные теоретические сведения. Значительно облегчить решение задачи может хорошо выполненный чертёж, если он соответствует условию задачи (прямой угол нарисован прямым, равнобедренный треугольник - равнобедренным и т. д. При подготовке к семинарам необходимо повторять ранее изученные основные определения, формулировки теорем. В начале занятия, как правило, проводится короткий (10-15 минут) опрос по материалу прошедших занятий в устной или письменной форме. Обычно придерживаются следующей схемы: изучение материала лекции по конспекту в тот же день, когда была прослушана лекция (10-15 минут); повторение материала накануне следующей лекции (10-15 минут), проработка учебного материала по конспектам лекций, учебной и научной литературе, подготовка ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения (1 час неделю), подготовка к семинару, решение задач (1 час). Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к лектору или преподавателю, ведущему семинары.

Обязательным требованием является выполнение домашних работ, которые оформляются в специально отведённой для этого тетради и систематически сдаются на проверку. Промежуточный контроль знаний проводится в виде коллоквиумов, на которых

студенту предлагается письменно ответить на теоретический вопрос и решить две задачи по теме коллоквиума, а также студенту в ходе освоения курса необходимо выполнить две домашних индивидуальных работы с их последующей защитой.

10. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебник для вузов / Н. Ф. Степанов. — М. : Мир ; Изд-во МГУ, 2001. — 519 с.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия. - М: Академия, 2008.
3. Цирельсон В. Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твёрдые тела. - М: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010.

б) дополнительная литература:

1. Квантовая химия Т 1. Основы и общие методы / Л. Цюликe ; пер. с нем. М. М. Беренфельда [и др.] ; под ред. М. В. Базилевского. — М. : Мир, 1976. — 512 с.
2. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. - М: Мир, 1983.
3. Абаренков И. В., Братцев В. Ф., Тулуб А. В. Начала квантовой химии. - М: Высшая школа, 1989.
4. Мак-Вини Р., Сатклиф Б. Квантовая механика молекул. - М: Мир, 1972.
5. Слэтер Дж. Электронная структура молекул. - М: Мир, 1965.
6. Кларк Т Компьютерная химия. - М: Мир, 1990.
7. Helgaker T., Jørgensen P., Olsen J. Molecular Electronic-Structure Theory. - New York: Wiley, 2000.
8. Hehre W. J., Radom L., Schleyer P. v. R., Pople J. A. Ab Initio Molecular Orbital Theory. - New York: John Wiley & Sons, 1986.
9. Czabo A., Ostlund N. S. Modern quantum chemistry (Introduction to advanced electronic structure theory). - New York: Dover Publications, Inc., 1989.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

- необходимый для обеспечения данной дисциплины комплект лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства, а также электронные библиотечные системы, с которыми у СОГУ имеется действующий договор:

№ п/п	Наименование	№ договора(лицензия)	Страна-производитель
1.	Windows 10 Enterprise	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г	США
2.	Windows 10 Pro for Workstations	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г	США
3.	Windows 7 Enterprise	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г	США
4.	Windows 7 Professional	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г	США
5.	Office Standard 2016	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г	США

6.	Office Standard 2013	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г	США
7.	Office Standard 2010	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016 г	США
8.	Корпоративная электронная почта (Яндекс.Почта)	№КИС-1965-2025 от 12.01.2026	Россия
9.	Программное обеспечение 1С: Предприятие. Бухгалтерский Учет. Типовая конфигурация 8 сетевая версия	№ СД/108 от 29.08.2017 «МАКСИМУМ-СОФТ СОФТ» бессрочно	Россия
10.	Система поиска текстовых заимствований «Антиплагиат. ВУЗ»	№ SBR003-250010357500001 от 05.02.2025 (действителен до 04.02.2026) с ОАО «АнтиПлагиат»	Россия
11.	Программное обеспечение 1С: Предприятие 8.3 Управление торговлей	№КП /108 от 29.08.2017 с ООО «Максимум» (бессрочно)	Россия
12.	Программное обеспечение 1С: Зарплата и кадры государственного учреждения 8	№СД./ №9., 08.06.2025 г. «МАКСИМУМ-СОФТ СОФТ» бессрочно	Россия
13.	1С: Бухгалтерия 8. Базовая версия	№9 от 21.05.2019, «МАКСИМУМ-СОФТ СОФТ» бессрочно	Россия
14.	Планы	№2191-24, от 09.01.2025 г. (тех.поддержка до 26.02.2026 г.) ООО ЛММИС	Россия
15.	ПО Лаборатории ММИС (Деканат, ПК, Ведомости, Тестирование, интернет расширение и др.)	№2435-24 от 04.03.2025 ООО ЛММИС	Россия
16.	VSDESK	№ 210406/01 от 06.04.2021г. ИП И,А.Сергеевич	Россия
17.	DIRECTUM RX – Система электронного документооборота	ООО Галактика ИТ договор № 120320/Д/А от 14.03.2022	Россия
18.	MOODLE	Бесплатное	-
19.	ЭБС «Консультант студента»	http://www.studentlibrary.ru Требуется регистрация в библиотеке СОГУ	Россия
20.	РусГард	Бесплатное	Россия
21.	Система веб-конференций (bigbluebutton)	Бесплатное	-
22.	Средства криптографической защиты (КриптоПро CSP, Крипто АРМ)	№120680, от 21.01.2025 ООО «Цифровые технологии»	Россия
23.	Средства криптографической защиты (ViPNet)	№0000-000008 от 17.01.2025 ООО Экспресс-линк	Россия
24.	Средства криптографической защиты (Континент	№25/08/22 СЛ от 04.09.2025 ООО СКБ-Сервис	Россия

	TLS)		
25.	Kaspersky Endpoint Security	№ СФ00-001239 от 13.02.2025 ООО Системный Софт	Россия

**Реестр электронных библиотечных систем (ЭБС)
и электронных образовательных ресурсов, доступ к которым обеспечен
для обучающихся по образовательным программам,
реализуемым в 2026-2027 учебном году**

Название базы данных	Платформа и (или) адрес в сети Интернет	Реквизиты	Правообладатель	Количество ключей
«Университетская библиотека Online» Базовая коллекция	https://biblioclub.ru Требуется регистрация.	Договор № 571-12/2025 от 12.01.2026 г. С 01.01.2026 г. - 31.12.2026 г.	ООО «НексМедиа»	Без ограничения количества пользователей
Информационно-аналитическая система SCIENCE INDEX: рефераты и полные тексты научных статей и публикаций, российские научные и научно-технические журналы	eLIBRARY.RU http://elibrary.ru/org Требуется регистрация.	Лицензионный договор № 310-5051/2025 от 31.03.2025 г. С 14.04.2025 г. - 20.04.2026 г.	ООО «Научная электронная библиотека eLibrary.ru»	Доступ по IP адресам вуза без ограничений по количеству пользователей
eLIBRARY.RU - интегрированный научный информационный портал в российской зоне сети Интернет, включающий базы данных научных изданий и сервисы для информационного обеспечения науки и высшего образования.	eLIBRARY.RU http://elibrary.ru/org Требуется регистрация.	Ресурс открытого доступа	ООО «Научная электронная библиотека eLibrary.ru»	Доступ осуществляется по IP адресам вуза без ограничений по количеству пользователей
«Юрайт» - Учебники по всем специальностям и направлениям подготовки. - ЦУМК по федеральному проекту «Кадры для цифровой экономики»	«Юрайт» https://urait.ru/info/courses?utm_source=m_campaign Требуется регистрация.	Договор № 6237 от 05.12.2023 г. С 31.12.2023 - 31.12.2026 г.	ООО «Электронное издательство ЮРАЙТ»	Доступ по IP адресам вуза без ограничений по количеству пользователей
Универсальная база данных East View - полнотекстовый доступ к научным журналам	https://dlib.eastview.com Логин: Khetagurov. Пароль: Khetagurov.	№210-П от 12.01.2026 г. С 01.01.2026 г. - 31.12.2026 г.	ООО «ИВИС»	Без ограничения количества пользователей
«SocHum» - электронная библиотека социогуманитарного знания (коллекция учебно-методической литературы и научных журналов социогуманитарной коллекции научно-исследовательских институтов	https://sochum.ru	Ресурс открытого доступа	Государственный академический университет гуманитарных наук (ГАУГН)	Доступ осуществляется по IP адресам вуза без ограничений по количеству пользователей.

РАН				
Polpred.com - открытая электронная библиотечная система и интернет-сервисы «Деловые средства массовой информации». Доступ к статьям 600 газет, журналов информ-агентств с архивом за 20 лет: - обзор СМИ; - Россия и зарубежье; - Федеральные округа РФ. - внешняя экономика, право.	https://www.polpred.com/	Ресурс открытого доступа		Доступ осуществляется по IP адресам вуза без ограничений по количеству пользователей.
Национальная электронная Библиотека «НЭБ»	https://rusneb.ru/ Требуется регистрация.	Договор № 4513-п от 26.12.2023 г. (на 10 лет с последующей автоматической пролонгацией) Без ограничения срока	Российская государственная библиотека	Доступ осуществляется по IP адресам вуза без ограничений по количеству пользователей

Электронные образовательные ресурсы

Наименование ресурса	Содержание ресурса	Ссылка на ресурс в сети Интернет
Единое окно доступа к образовательным ресурсам	Каталог образовательных интернет-ресурсов и полнотекстовая электронная учебно-методическая библиотека для общего и профессионального образования	https://web.archive.org/web/20191122092928/http://window.edu.ru/
«КиберЛенинка»	Собрание научных статей, в основном на русском языке, хотя есть и иностранные публикации.	https://cyberleninka.ru/
Всенаука	Естественные, гуманитарные и социальные науки, психология	Всенаука https://vsenauka.ru/
Библиотекарь. Ру	Бесплатная интернет-библиотека. Книги, статьи, документы по русской и мировой истории, искусству, культуре, прикладным наукам, учебники, научные статьи, методические пособия. Электронные книги, учебники, периодика, графика, справочная и техническая литература. На сайте представлено около 10.000 книг доступных для онлайн чтения. - более 50 полнотекстовых справочников и энциклопедий; - Древнерусская литература - летописи, жития святых, воинские повести древней Руси; - сведения иностранных писателей о средневековой России; - большой раздел репринтов книг, газет и журналов 19 века; - биографии и труды русских учёных и писателей; - классическая литература. Мемуары, дневники; - учебники и научные работы по 20 дисциплинам; - более 15.000 картин и художественных изображений.	https://bibliotekar.ru/

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного и семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также самостоятельной работы обучающихся: преподавательский стол; стул; столы обучающихся; стулья; кафедра; классная доска, мультимедийный комплекс (проектор, экран), ноутбук, колонки, программное обеспечение.

Библиотека, в том числе читальный зал: столы, стулья, ПК обучающихся, программное обеспечение.

Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
 - продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
 - продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
 - при наличии по дисциплине курсовой работы продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.