

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

АПАТИТСКИЙ ФИЛИАЛ

УТВЕРЖДАЮ  
Директор АФ ФГБОУ ВО «МГТУ»  
к.г.-м.н., доцент И.В. Чикирёв

*И.В.Ч.*



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

По дисциплине: Б1В.03ДВ.02.02 Методы квантово-химических расчетов  
указывается цикл (раздел) ОП, к которому относится дисциплина, название дисциплины

для направления подготовки (специальности) 04.03.01 Химия  
код и наименование направления подготовки (специальности)

Неорганическая химия и химия координационных соединений  
наименование профиля /специализаций/образовательной программы

Квалификация выпускника, уровень подготовки бакалавр  
(указывается квалификация (степень) выпускника в соответствии с ФГОС ВО)

Кафедра - разработчик: химии и строительного материаловедения  
название кафедры - разработчика рабочей программы

Апатиты  
2019

**Лист согласования**

1 Разработчик(и)

доцент  
должность

химии и СМ  
кафедра

  
подпись

О.Р. Стародуб  
И.О. Фамилия

2. Рассмотрена и одобрена на заседании кафедры-разработчика рабочей программы  
химии и строительного материаловедения  
название кафедры

"28" июня 2019 г. протокол № 11.  
дата

И.о. заведующего кафедры – разработчика

"28" июня 2019 г.



А.И. Николаев

дата

подпись

И.О.Фамилия

### **Лист изменений и дополнений**

к рабочей программе по дисциплине «**Методы квантово-химических расчетов**», входящей в состав ОПОП по направлению подготовки 04.03.01 Химия, направленности (профилю) Неорганическая химия и химия координационных соединений. 2019 года начала подготовки.

**Таблица 1.** Изменения и дополнения

<b>№ п/п</b>	<b>Дополнение или изменение, вноси- мое в рабочую программу в час- ти</b>	<b>Содержание дополнения или изменения</b>	<b>Основание для вне- сения дополнения или изменения</b>	<b>Дата внесе- ния допол- нения или изменения</b>
1				
2				
3				

Дополнения и изменения внесены «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ г

### Аннотация рабочей программы дисциплины

Коды циклов дисциплин, модулей, практик	Название циклов, разделов, дисциплин, модулей, практик	Краткое содержание (Цель, задачи, содержание разделов дисциплины, реализуемые компетенции, формы промежуточного контроля, формы отчетности)
		1
Б1В.03ДВ.02.02	Методы квантово-химических расчетов	<p><b>Цель дисциплины:</b> ознакомиться с теорией движения материи в микромире, когда изучаемые объекты представляют собой электроны, атомы, молекулы и их малые ансамбли, к описанию движения которых не применимы методы классической механики.</p> <p><b>Задачей дисциплины</b> является освоение студентами следующих основных понятий:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• особенности поведения частиц в микромире, корпускулярно-волновой дуализм, принцип неопределенности Гейзенберга;</li> <li>• основные постулаты квантовой механики, предпосылки их появления, несовместимость с принципами классической механики и согласованность обоих подходов в предельном случае;</li> <li>• уравнение Шредингера как уравнение движения в микромире, способы его решения. Стационарное уравнение Шредингера. Полярные координаты;</li> <li>• функция состояния системы, вероятностный характер получаемый с её помощью информации;</li> <li>• понятие операторов квантовой механики. Собственные функции и собственные значения операторов; теория химической связи в молекулах с позиций квантовой теории;</li> <li>• основные подходы решения квантово-химических задач, включая молекулы химических соединений;</li> <li>• общие принципы упрощения векового уравнения при решении квантово-химических задач;</li> <li>• решение квантово-химических задач в тг-приближении простым методом Хюккеля. Порядок химической связи и плотности зарядов на атомах.</li> </ul> <p><b>В результате изучения дисциплины бакалавр должен:</b></p> <p><b>Знать:</b> строгую теорию формулирования квантово-химической задачи, структуру гамильтонiana для атомных и молекулярных систем, принципы упрощения задач, не имеющих решения в рамках строгой теории и способы проведения их к решаемому типу. Формулировать в общем виде результаты решения задачи.</p> <p><b>Уметь:</b> составить уравнение Шредингера для простых и сложных атомных и молекулярных систем, провести соответствующие упрощения и составить принципиальный алгоритм решения задачи на ЭВМ, подготовить исходные данные (координаты атомов) для квантово-химических расчетов, проводить вычисления на вычислительном комплексе и интерпретировать результаты вычислений с химических позиций. В простом методе Хюккеля уметь самостоятельно решить задачу, не прибегая к вычислительной технике и сложным алгоритмам.</p> <p><b>Обладать:</b> теоретическим материалом по лекциям, предлагаемым учебниками, учебно-методическим пособиям и оригинальным научным источникам;</p> <p>подробным разбором наиболее сложных теоретических вопросов на лекциях, практическим решением задач по квантовой механике,</p>

	<p>квантовой химии, как на практических занятиях, так и во время самостоятельной работы;</p> <p>практическим освоением методов квантово-химических расчетов.</p> <p><b><u>Содержание разделов дисциплины:</u></b></p> <p><b>1. Введение</b></p> <p>Методы квантово-химических расчетов как передовой и мощный инструмент на нынешнем этапе развития науки и техники, дающий возможность не только решать все новые исследовательские задачи, но и проектировать материалы, системы и наносистемы с необходимыми свойствами.</p> <p><b>2. Общие принципы</b></p> <p>Особенности поведения частиц в микромире, корпускулярно-волновой дуализм, принцип неопределенности Гейзенберга.</p> <p>Основные постулаты квантовой механики, предпосылки их появления, несовместимость с принципами классической механики и согласованность обоих подходов в предельном случае.</p> <p>Функция состояния системы, вероятностный характер получаемый с её помощью информации.</p> <p><b>3. Основные подходы решения и упрощения квантово-химических задач</b></p> <p>Основные подходы решения квантово-химических задач, включая молекулы химических соединений.</p> <p>Общие принципы упрощения векового уравнения при решении квантово-химических задач.</p> <p>Решение квантово-химических задач в <math>\pi</math>-приближении простым методом Хюккеля. Порядок химической связи и плотности зарядов на атомах.</p> <p><b><i>Реализуемые компетенции</i></b> ПК-1-т, ПК-2-т</p> <p><b><i>Формы отчетности</i></b> Семестр 7 – зачет, реферат</p>
--	---

### **Пояснительная записка**

1. **Рабочая программа** составлена на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Минобразования и науки РФ 17 июля 2017 года, № 671, учебного плана в составе ОП по направлению подготовки 04.03.01 Химия, профилю «Неорганическая химия и химия координационных соединений».

2. **Цели и задачи учебной дисциплины (модуля).**

**Целью дисциплины** (модуля) «Методы квантово-химических расчетов» является подготовка обучающегося в соответствии с квалификационной характеристикой бакалавра и рабочим учебным планом направления 04.03.01 Химия, что предполагает ознакомление обучаемых с теорией движения материи в микромире, когда изучаемые объекты представляют собой электроны, атомы, молекулы и их малые ансамбли, к описанию движения которых не применимы методы классической механики

**Задачей дисциплины** является освоение студентами следующих основных понятий:

- особенности поведения частиц в микромире, корпускулярно-волновой дуализм,

- принцип неопределенности Гейзенберга;
- основные постулаты квантовой механики, предпосылки их появления, несовместимость с принципами классической механики и согласованность обоих подходов в предельном случае;
  - уравнение Шредингера как уравнение движения в микромире, способы его решения. Стационарное уравнение Шредингера. Полярные координаты;
  - функция состояния системы, вероятностный характер получаемый с её помощью информации;
  - понятие операторов квантовой механики. Собственные функции и собственные значения операторов; теория химической связи в молекулах с позиций квантовой теории;
  - основные подходы решения квантово-химических задач, включая молекулы химических соединений;
  - общие принципы упрощения векового уравнения при решении квантово-химических задач;
  - решение квантово-химических задач в тг-приближении простым методом Хюккеля. Порядок химической связи и плотности зарядов на атомах.

### **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Методы квантово-химических расчетов»**

Процесс изучения дисциплины «Методы квантово-химических расчетов» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия:

**ПК-1-т** Способность выбирать технические средства и методы испытаний для решения технологических задач, поставленных специалистом более высокой квалификации;

**ПК-2-т** Способность осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции

Результаты формирования компетенций и планируемые результаты обучения представлены в таблице 2.

**Таблица 2 – Планируемые результаты обучения**

<b>№ п/п</b>	<b>Код компетен- ции</b>	<b>Компоненты компетен- ции, степень их реализа- ции</b>	<b>Результаты обучения</b>
<b>1</b>	<b>ПК-1-т</b> Способность выбирать технические средства и методы испытаний для решения технологических задач, поставленных специалистом более высокой квалификации;	Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью	<b>Знать:</b> основы применения численных методов для решения квантово-химических задач моделирования систем и процессов; <b>Уметь:</b> использовать специализированное ПО (GAMESS, ChemDraw) для решения квантово-химических задач и задач обработки данных квантово-химического эксперимента; - представлять полученные экспериментальные данные в виде отчетов, графиков и т.д. - владеть компьютерными технологиями обработки экспериментальных данных, пользоваться средствами электронной почты для делового общения; - определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения; - понимать принципы работы современ-

			<p>ной научной аппаратуры;</p> <p><b>Владеть:</b> современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов при проведении научных исследований</p> <p><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b></p> <p>ПК-1-т-1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИОКР</p> <p>ПК-1-т-2 Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИОКР</p> <p>ПК-1-т-3. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИОКР</p>
2	<p><b>ПК-2-т</b></p> <p>Способность осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции</p>	<p>Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью</p>	<p><b>Знать:</b> основы применения численных методов для решения квантово-химических задач моделирования систем и процессов;</p> <p><b>Уметь:</b> использовать специализированное ПО (GAMESS, ChemDraw) для решения квантово-химических задач и задач обработки данных квантово-химического эксперимента;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- представлять полученные экспериментальные данные в виде отчетов, графиков и т.д.</li> <li>- владеть компьютерными технологиями обработки экспериментальных данных, пользоваться средствами электронной почты для делового общения;</li> <li>- определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения;</li> <li>- понимать принципы работы современной научной аппаратуры;</li> </ul> <p><b>Владеть:</b> современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов при проведении научных исследований</p> <p><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b></p> <p>ПК-2-т-1. Выполняет стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства</p> <p>ПК-2-т-2. Составляет протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе по заданной форме</p>

#### 4. Структура учебной дисциплины (модуля)

**Таблица 3<sup>\*</sup> - Распределение учебного времени дисциплины**

\* Разработчикам РП можно убирать столбцы с формами обучения, если данная форма не реализуется в МГТУ

**Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетная единица, 72 часа**

Виды учебной нагрузки, часов	Номер семестра обучения			Всего Часов
	6	7	8	
Лекции	-	32	-	<b>32</b>
Практические занятия	-	13	-	<b>13</b>
Лабораторные работы	-	-	-	-
Самостоятельная работа	-	27	-	<b>27</b>
Подготовка и сдача экзамена	-	-	-	-
Всего часов по дисциплине	-	72	-	<b>72</b>

Формы контроля, количество

Экзамен	-	-	-	-
Зачет / зачет с оценкой	-	+/-	-	+/-
Курсовая работа (проект)	-	-	-	-
Количество РГЗ	-	-	-	-
Количество контрольных работ	-	-	-	-
Количество рефератов	-	1	-	1
Количество эссе	-	-	-	-

## 5. Содержание учебной дисциплины (модуля)

**Таблица 4\* - Содержание разделов дисциплины (модуля), виды работы**

№ п\п	Содержание разделов (модулей), тем дисциплины	Количество часов, выделяемых на виды учебной подготовки			
		Очная форма			
		Объем работы в часах			
		Лекции	ПР	ЛР	СР
<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>	<b>6</b>
1.	Основные методы приближенного решения уравнения Шредингера.	4			2
2.	Метод самосогласованного поля Хартри.	2			2
3.	Метод Хартри-Фока.	2			2
4.	Приближение Борна—Оппенгеймера.	2			2
5.	Метод валентных связей.	2			2
6.	Метод молекулярных орбиталей.	2			2
7.	Приближение линейных комбинаций атомных орбиталей. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. МО гомоядерных двухатомных молекул. Электронные конфигурации гомоядерных молекул. МО гетероядерных двухатомных молекул.	4	4		4
8.	Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам.	2			2
9.	Метод молекулярных орбиталей Хюккеля.	4	4		2

\* Разработчикам РП можно убирать столбцы с формами обучения, если данная форма не реализуется в МГТУ

	Расчет энергий МО: циклобутадиен, бензол, этилен, циклические полиены, молекулы с гетероатомами, полициклоароматические соединения.			
10.	Базисные ряды атомных орбиталей. Слете-ровские функции. Расщепленные валентные орбитали. Эффективные потенциалы остова. Критерии сходимости.	2		2
11.	Визуализация пространственной структуры молекул. Редактирование структурных химических формул в программе ChemDraw. Визуализация молекулярных структур с ис-пользованием программы Chem3D.	4	5	3
12.	Знакомство с базами данных по спектроско-пии и термодинамическим характеристикам соединений различных классов.	2		2
	<b>Итого:</b>	<b>32</b>	<b>13</b>	<b>-</b>
				<b>27</b>

**Таблица 5 - Соответствие компетенций, формируемых при изучении дисциплины (модуля), и видов занятий с учетом форм контроля**

Перечень компетенций	Виды занятий								Формы контроля
	Л	ЛР	ПЗ	КР/КП	р	к/р	э	СРС	
ПК-1-т	+		+		+			+	Конспект, участие в дискуссии на лекции, выполнение практических и контрольных работ
ПК-2-т	+		+		+			+	Конспект, участие в дискуссии на лекции, выполнение практических и контрольных работ

Примечание: Л – лекции, ЛР – лабораторные работы, ПЗ – практические занятия, КР/КП – курсовая работа (проект), р – реферат, к/р – контрольная работа, э - эссе, СРС – самостоятельная работа студентов

**Таблица 6 - Перечень лабораторных работ**

Не предусмотрены

**Таблица 7- Перечень практических работ**

№ п\п	Наименование практических работ	Кол-во часов	№ темы по табл. 4
1	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
1	Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. МО гомоядерных двухатомных молекул. Электронные конфигурации гомоядерных молекул. МО гетероядерных двухатомных молекул.	4	7
2	Расчет энергий МО по методу Хюкеля: циклобутадиен, бензол, этилен, циклические полиены, молекулы с гетероатомами, полициклоароматические соединения.	4	9
3	Визуализация пространственной структуры молекул. Редактирование структурных химических формул в программе ChemDraw.	5	11

	<b>Итого:</b>	<b>13</b>	
--	---------------	-----------	--

## **7. Перечень примерных тем курсовой работы (проекта)**

Не предусмотрены

## **6. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)\***

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся приводится в Методических указаниях к самостоятельной работе по дисциплине «Методы квантово-химических расчетов».

## **7. Фонд оценочных средств**

ФОС входит в состав образовательной программы в качестве самостоятельного документа.

## **8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

№ п\п	Название учебников, учебных пособий и других источников	Авторы (под ред.)	Издательство	Год изда-ния
1	2	3	4	5
<b>Основная:</b>				
1.	Лекции по квантовой механике и квантовой химии: учебное пособие по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» для студентов специальности 020101.65 Химия»	О.Р. Стародуб	Мурманский го-сударственный технический университет	2012
<b>Дополнительная:</b>				
1.	Квантовая механика и квантовая химия.	Н.Ф.Степанов	Москва, «Мир», Изд-во Моск. Ун-та	2001
5.	Квантовая механика :учебник <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785927507061.html?SSr=010134171b106b0b2512518">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785927507061.html?SSr=010134171b106b0b2512518</a>	Ведринский Р.В	Изд-во ЮФУ	2009
6.	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие <a href="https://e.lanbook.com/book/113631">https://e.lanbook.com/book/113631</a>	Барановский В.И.	Издательство "Лань"	2019

## **9. Перечень ресурсов информационно - телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)\***

расчетные квантово-химические программы: ChemOffice, GAMESS, ABINIT

\*В перечень входят методические указания к: выполнению практических, лабораторных, контрольных, самостоятельных, расчетно-графических, курсовых работ и др.

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» (Договор № 530-10/18 от 01.11.2018 г. ООО «Современные цифровые технологии», с 16.11.2018 г. по 15.11.2019 г.),  
 ЭБС «Издательства Лань» (Договор № 19/85 от 12 сентября 2018 г. ООО «ЭБС Лань», с 02.10.2018 г. по 01.10.2019 г., Договор № 19/159 от 28 мая 2019 г. ООО «Издательство Лань», с 02.10.2019 г. по 01.10.2020 г.),  
 ЭБС «Консультант студента» (Договор № 100 СЛ/03-2018 от 20 марта 2018 г. ООО «Политехресурс», с 21.04.2018 г. по 20.04.2019 г., Договор № 19/37 от 11.03.2019 г. ООО «Политехресурс», с 21.04.2019 г. по 20.04.2020 г.),  
 ЭБС «IPR books» (Лицензионный договор № 3768 18 от 15.03.2018 г. ООО «Ай Пи Эр Медиа», с 20.04.2018 г. до 20.04.2019 г., Лицензионный договор № 4979/ 19 от 01.04.2019 г. ООО «Ай Пи Эр Медиа», с 20.04.2019 г. до 20.04.2020 г.),  
 ЭБС «Троицкий мост» (Договор № 19/38 от 11 марта 2019 г. ООО «Издательско-торговая компания дом «Троицкий мост», с 01.04.2019 г. по 31.03.2020 г.),  
**Национальная электронная библиотека (НЭБ)** (Договор № 101/НЭБ/2370 от 09.08.2017 г., с 09.08.2017 г.по 08.08.2022 г.),  
 Электронная база данных «EBSCO» (Сублицензионный договор № 45.49/19.85 от 09.01.2019 г. ООО ЦНИ НЭИКОН, с 01.01.2019 г. по 31.12.2019 г.).

**10. Перечень информационных технологий и лицензионного программного обеспечения, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем .**

- 1 Операционная система Microsoft Windows Vista Business Russian Academic OPEN, лицензия № 44335756 от 29.07.2008 (договор №32/379 от 14.07.08 г.)
2. Офисный пакет Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN, лицензия № 45676388 от 08.07.2009 (договор 32/224 от 14.0.2009 г.)
- 3.Система оптического распознавания текста ABBYY FineReader Corporate 9.0 (сетевая версия), 2009 год (договор ЛЦ-080000510 от 28 апреля 2009 г.). Операционная система Microsoft Windows Vista Business Russian Academic OPEN, лицензия № 44335756 от 29.07.2008

**Таблица 8 - Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)**

<b>№ п./п.</b>	<b>Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>	<b>Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>
1.	<b>Помещение № 105</b> Учебная аудитория для проведения лекционных и практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной аттестации. г. Апатиты, Академгородок, д. 50а.	Укомплектовано специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации обучающимся: <ul style="list-style-type: none"> <li>- учебные столы – 9 шт.;</li> <li>- письменные столы – 2 шт;</li> <li>- стеллаж для книг – 1 шт;</li> <li>- доска аудиторная – 1 шт.;</li> <li>- оверхед – 1 шт;</li> <li>- проекционный экран – 1 шт.;</li> <li>- ноутбук <i>Lenovo B50-30 – 1 шт.</i>;</li> <li>- мультимедийный DLP-проектор – 1 шт;</li> <li>- учебно-наглядные пособия.</li> </ul> Посадочных мест – 18.

<p>2.</p>	<p><b>Помещение № 210</b>  <b>Компьютерный класс</b>  Специальное помещение для проведения практических занятий и самостоятельной работы обучающихся.</p> <p>г. Апатиты, Академгородок, д. 50 а</p>	<p>Укомплектовано специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления информации, мультимедийным оборудованием:</p> <p>DLP-проектор, проекционный экран, ПЭВМ Intel Pentium G4400 3.3 GHz с ЖК-монитором 19”, объединенными в локальную вычислительную сеть с доступом к интернету, электронно-библиотечным системам и к электронной информационно-образовательной среде университета и предназначено для самостоятельной работы обучающихся – 12 шт.;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- компьютерные столы – 12 шт;</li> <li>- учебные столы – 10 шт.;</li> <li>- стол письменный – 1 шт.;</li> <li>- доска аудиторная – 1 шт.;</li> <li>- кафедра – 1 шт;</li> <li>- проекционный экран – 1 шт.;</li> <li>- ноутбук <i>Lenovo B50-30</i> – 1 шт.;</li> <li>- мультимедийный DLP-проектор – 1 шт.</li> </ul> <p>Посадочных мест – 12 (компьютерные столы), 20 (учебные столы).</p> <p>Персональные компьютеры с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета со специализированным программным обеспечением:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Операционная система Windows Professional 8.1 Russian Upgrade OLP NL AcademicEdition, лицензия № 64570101 от 26.12.2014 (договор S4093290 от 20.12.2014 г.).</li> <li>2. Офисный пакет Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN, лицензия № 42024925 от 04.11.2007 (договор 32/224 от 14.07.2009 г.).</li> <li>3. Система оптического распознавания текста ABBYY FineReader Corporate 9.0 (сетевая версия), (договор ЛЦ-080000510 от 28 апреля 2009 г.).</li> <li>4. Statsoft STATISTICA Advanced 10 for Windows Ru (лицензия от 28.09.2012).</li> <li>5. MathCAD Education (лицензия № 2689694 от 13.09.2012).</li> <li>6. ArcGIS ArcInfo Lab Pack Desktop 10 (договор № 18-02-11 от 01.12.2011).</li> <li>7. CorelDRAW Graphics Suite X5, лицензия № 4087619 от 20.12.2011 (договор № MAV-030/11 от 30.11.2011).</li> <li>8. Autodesk Autocad Revit Series 8.1 (акт передачи-приемки ПО с МГТУ).</li> <li>9. Adobe Photoshop Extended CS5 12.0, лицензия № 8085097 (договор 134136735 от 15.11.2010).</li> <li>10. ScanEx Image Processor с модулем Thematic Pro</li> </ol>
-----------	---	--

		(договор № 15/1203-ПО от 03.12.2015).
--	--	---------------------------------------

**Таблица 9 - Технологическая карта дисциплины (промежуточная аттестация - зачет)**  
**Дисциплина «Методы квантово-химических расчетов»**

№ п/п	Контрольные точки	Зачетное количество бал- лов		График прохождения (недели сдачи)
		min	max	
<b>Текущий контроль</b>				
1	2	3	4	5
1.	Работа на практических занятиях № 1	10	15	6-я неделя
2.	Работа на практических занятиях № 2	10	15	7-я неделя
3.	Работа на практических занятиях № 3	10	15	7-я неделя
4.	Реферат	10	15	11-я неделя
5.	Выполнение домашних заданий	3	6	в течение семестра
6.	Своевременность выполнения контрольных точек	2	4	в течение семестра
7.	Посещение занятий	10	20	Свыше 75% посещенных занятий – 20, от 75 до 50% - 10, менее 50% - 0
8.	Отработка пропущенного времени	5	10	в течение семестра
	<b>Итого за работу в семестре:</b>	<b>60</b>	<b>100</b>	
<b>Промежуточная аттестация – зачет</b>				
	<b>Итоговые баллы по дисциплине</b>	<b>60</b>	<b>100</b>	Зачетная неделя