

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

АПАТИТСКИЙ ФИЛИАЛ

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



подпись  
"28" июня 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

По дисциплине: Б1.В.02.05 Квантовая механика и квантовая химия  
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.

  
подпись

А.И. Николаев

дата

подпись

И.О.Фамилия

### Лист изменений и дополнений

к рабочей программе по дисциплине «**Квантовая механика и квантовая химия**», 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, вносимое в рабочую программу в части</b>	<b>Содержание дополнения или изменения</b>	<b>Основание для внесения дополнения или изменения</b>	<b>Дата внесения дополнения 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	2	3
Б1.В.02.05	Квантовая механика и квантовая химия	<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 гамильтониана 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></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- теоретическим материалом по лекциям, предлагаемым учебниками, учебно-методическим пособиям и оригинальным научным источникам;</li> </ul>

- подробным разбором наиболее сложных теоретических вопросов на лекциях, практическим решением задач по квантовой механике, квантовой химии, как на практических занятиях, так и во время самостоятельной работы;
- практическим освоением методов квантово-химических расчетов.

**Содержание разделов дисциплины:**

**1. Введение**

Квантовая химия как теоретическая основа представлений современной химии. Причины и предпосылки ее возникновения

**2. Общие принципы**

Постулаты квантовой механики. Временное и стационарное уравнения Шрёдингера для атомов и молекул. Адиабатическое приближение. Уравнение Шредингера, движение электрона в кулоновском поле ядра. Радиальное уравнение Шредингера

Основные методы приближенного решения уравнения Шредингера. Теория возмущений и вариационный метод Ритца.

Электронное строение атома. Спин электрона. Атом в магнитном поле.

**3. Методы квантовой химии**

ЭПР. Вырождение волновых функций. Гамильтониан для атома гелия. Одноэлектронное приближение. Метод самосогласованного поля Хартри.

Принцип Паули и определители Слэтера. Метод Хартри-Фока. Орбитальные энергии и теорема Купманса. Электронная корреляция, методы ее учета.

Описание межмолекулярных взаимодействий в рамках квантовой химии. Составляющие межмолекулярных взаимодействий.

Периодическая система элементов Д. И. Менделеева с позиций квантовой химии.

Теория химической связи. Приближение Борна—Оппенгеймера. Метод валентных связей. расчет молекулы водорода методом валентных связей

Метод молекулярных орбиталей. уравнения Рутаана. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО.

Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул

**4. Симметрия ядерной конфигурации**

Группы симметрии ядерной конфигурации. Представления групп симметрии.

Симметрия и свойства молекул. Классификация состояний молекул и классификация орбиталей по симметрии.  $\sigma$ - и  $\pi$ -Орбитали,  $\pi$ -электронное приближение. Различные типы орбиталей (локализованные орбитали, орбитали симметрии и т.п.). Гибридизация и гибридные орбитали. Представления об атомах в молекуле.

**5. Полуэмпирические методы квантовой химии**

Основные принципы перехода к полуэмпирическим методам. Необходимость полуэмпирических методов. Методы на основе нулевого дифференциального перекрывания.

Расширенный и простой методы Хюккеля. Правило Хюккеля ( $4n+2$ ). Графический метод Фроста.

***Реализуемые компетенции***

ПК-1-н

***Формы отчетности***

Семестр 8 – экзамен, 2 контрольные работы

## Пояснительная записка

1. **Рабочая программа** составлена на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки РФ от 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) «Квантовая механика и квантовая химия» является подготовка обучающегося в соответствии с квалификационной характеристикой бакалавра и рабочим учебным планом направления 04.03.01 Химия, что предполагает освоение обучающимися знаний в области теории 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 «Квантовая механика и квантовая химия»

Процесс изучения дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» направлен на формирование элементов компетенции в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия:

**ПК-1-н** Способность выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации

Результаты формирования компетенций и планируемые результаты обучения представлены в таблице 1.

**Таблица 1 – Планируемые результаты обучения**

№ п/п	Код компетенции	Компоненты компетенции, степень их реализации	Результаты обучения
-------	-----------------	---	---------------------

1	ПК-1-н Способность выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью	<p><b>Знать:</b> основные современные методы квантовой химии (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности), иметь представления о приближениях и допущениях, использованных при разработке этих методов, иметь представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры и химических реакций</p> <p><b>Уметь:</b> определять необходимую информацию для расчета электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов; ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов</p> <p><b>Владеть:</b> основными понятиями квантово-механической теории; навыками квантово-химических расчетов физико-химических характеристик веществ и квантово-химического моделирования химических реакций.</p> <p><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b></p> <p><b>ПК-1-н-1.</b> Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР</p> <p><b>ПК-1-н-2.</b> Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР</p> <p><b>ПК-1-н-3.</b> Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР</p> <p><b>ПК-1-н-4.</b> Готовит объекты исследования</p>
---	--	---	---

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

Таблица 2\* - Распределение учебного времени дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 часов

Виды учебной нагрузки, часов	Распределение трудоемкости дисциплины по формам обучения			
	Очная			Всего Часов
	Номер семестра обучения			
	6	7	8	

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

Лекции	-	-	70	70
Практические занятия	-	-	20	20
Лабораторные работы	-	-	10	10
Самостоятельная работа	-	-	44	44
Подготовка и сдача экзамена	-	-	36	36
Всего часов по дисциплине	-	-	180	<b>180</b>

Формы промежуточного и текущего контроля

Экзамен	-	-	+	+
Зачет / зачет с оценкой	-/-	-/-	-/-	-/-
Курсовая работа (проект)	-	-	-	-
Количество РГЗ	-	-	-	-
Количество контрольных работ	-	-	2	2
Количество рефератов	-	-	-	-
Количество эссе	-	-	-	-

## 5. Содержание учебной дисциплины (модуля)

Таблица 3\* - 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
1	2	3	4	5	6
	<b><u>Квантовая механика</u></b>				
1	Введение. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки. Основные этапы развития квантовой теории.	2	2		-
2	Корпускулярно-волновой дуализм в микромире. Вывод волнового уравнения для движения частицы как плоской гармонической волны, исходя из волны Де-Бройля. Трехмерные временные уравнения Шредингера.	2			2
3	Понятие операторов в квантовой механике. Коммутаторы операторов. Примеры коммутирующих и некоммутирующих операторов. Принцип неопределенности Гейзенберга. Условие одновременности измерения физических величин.	4	2		2
4	Стационарное уравнение Шредингера. Оператор Гамильтона и стационарное уравнение Шредингера для атома He.	2			2
5	Основные постулаты квантовой механики.	4			2

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

	Описание системы функцией состояния $\Psi(q_i, t)$ . Свойства функции состояния, вычисление средних значений физических величин. • Соответствие между динамическими переменными квантовой системы и самосопряженными линейными операторами. • Функция состояния удовлетворяющая уравнению Шредингера. Полная система собственной функции. Принцип Паули.				
6	Собственные функции и собственные значения операторов. Оператор проекции импульса $\hat{p}_x$ . Оператор проекции углового момента.	2			2
7	Теория момента количества движения. Сферическая система координат. Уравнение Шредингера в сферических координатах.	2	2		2
8	Разделение переменных в уравнении Шредингера на радиальную и сферические составляющие. Радиальное уравнение Шредингера.	2	2		2
9	Разделение переменных $\theta$ и $\varphi$ в сферической части уравнения Шредингера.	2	2		2
10	Одномерный прямоугольный потенциальный ящик.	2	-		-
11	Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали. Водородоподобные волновые функции атомов.	4	-		2
12	Квантовые числа. Физический смысл.	2			-
13	Средние значения физических величин.	2	2		-
14	Многоэлектронные системы. Приближение независимых частиц.	1	2		-
15	Периодическая система элементов им. Д.И.Менделеева. Правила Хунда.	1			-
16	Слетеровские детерминанты. Принцип Паули. Метод Хартри-Фока для многоэлектронных задач.	4	2		2
17	Теория химической связи в молекулах. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера	2	-		-
18	Вариационный метод Ритца	2	-		2
19	Теория матриц	-	2		2
20	Уравнения Рутана для молекулярных систем. Схема самосогласованного поля. Алгоритм вычислений.	2	-		2
21	Общие принципы упрощения векового уравнения при решении квантово-химических задач. Нулевое дифференциальное перекрытие.	2			2
22	Метод валентных связей	2	-		-
	<b>Квантовая химия</b>				
23	Метод молекулярных орбиталей, сопоставление с теорией многоэлектронного атома.	4	-		2

	Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО). Выбор базисных атомных функций. Закрытые и открытые оболочки.				
24	Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Основные состояния, связывающие и разрыхляющие орбитали. Полная энергия молекулы водорода.	2	2		2
25	Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Фотоэлектронные спектры, Теорема Купманса.	2	-		2
26	Молекулярные орбитали гетероядерных двухатомных молекул. Дипольные моменты.	2	-		2
27	Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия. Многоконфигурационное взаимодействие. Теория возмущений.	2	-		2
28	Поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул. Пути и энергетика химических реакций. ППЭ и динамика химических реакций.	2	-		-
29	Квантово-химические расчеты молекул и химическая реакционная способность. Электронные плотности, заряды на атомах, порядки связей.	2	-	4	2
30	Электронные и колебательные спектры молекул, методы расчетов.	2	-		-
31	Расчеты термодинамических величин		-	2	-
32	Решение квантово-химических задач в $\pi$ -приближении простым методом Хюккеля	4	-	4	4
	Итого:	<b>70</b>	<b>20</b>	<b>10</b>	<b>44</b>

**Таблица 4 - 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-н	+	+	+			+	+	+	Выполнение ПЗ и защита выводов, конспект, участие в дискуссии на лекции, защита лабораторных 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 5 - Перечень лабораторных работ**

№ п\п	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов	№ темы по табл. 4
1	2	3	4
ЛР1	Неэмпирический квантовохимический расчет молекулы.	4	29

ЛР2	Подготовка исходных данных в программе GAMESS и проведение неэмпирического квантовохимического расчета молекулы.	6	31,32
	<b>Итого:</b>	10	

**Таблица 6- Перечень практических работ**

№ ПЗ	Наименование тем, их содержание	Кол-во часов	№ темы по табл.4
1	2	3	4
1	Экспериментальные предпосылки появления квантовой механики. Принцип неопределенности Гейзенберга. Операторы квантовой механики. Понятие операторов, их свойства, примеры операторов.	2	1,3
2	Переход к сферическим координатам. Оператор Лапласа в сферических координатах. Уравнение Шредингера в сферических координатах и разделение переменных $\theta$ и $\varphi$ . Радиальная часть волновой функции. Разбор задачи.	2	7,8,9
3	Контрольная работа по закреплению темы. Расчет средних величин. Многоэлектронные атомы. Приближение независимых частиц.	2	13,14
4	Принцип Паули. Определители Слетера. Задача об атоме водорода. Физический смысл квантовых чисел.	2	16
5	Векторы и матрицы. Основные понятия и определения. Свойства. Преобразование векторов. Преобразование матриц. Многомерные и комплексные пространства. Диагонализация матриц.	2	19
6	Квантово-химические расчеты молекулярных систем. Адиабатическое приближение. Общая схема квантово-химических расчетов методом самосогласованного поля.	2	17,20
7	Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Вариационный метод Ритца.	2	18,20, 24
8	Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул. Теория химической связи в молекулах. Гамильтониан молекулярной системы.	2	25,29
9	Учет конфигурационного взаимодействия. Ортонормированный базис для квантовохимических расчетов. Периодическая система Менделеева с позиций квантовой химии.	2	15,27
10	Метод самосогласованного поля Хартри. Метод Хартри-Фока.	2	16
	<b><u>Всего часов:</u></b>		<b>20</b>

**6. Перечень примерных тем курсовой работы (проекта)**

Не предусмотрена.

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

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

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся приводится в Методических указаниях к самостоятельной работе по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия».

## 8. Фонд оценочных средств

ФОС входит в состав образовательной программы в качестве самостоятельного документа.

## 7. 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 издания
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 государственный технический университет	2012
<b>Дополнительная:</b>				
1	Квантовая механика и квантовая химия.	Н.Ф. Степанов	Москва, «Мир», Изд-во Моск. Унта	2001
2	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
3.	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

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

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.).

**11. 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

расчетные квантово-химические программы: ChemOffice, GAMESS, ABINIT

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

№ п./п.	Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
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: - учебные столы – 9 шт.; - письменные столы – 2 шт; - стеллаж для книг – 1 шт; - доска аудиторная – 1 шт.; - оверхед – 1 шт; - проекционный экран – 1 шт.; - ноутбук <i>Lenovo B50-30</i> – 1 шт.; - мультимедийный DLP-проектор – 1 шт; - учебно-наглядные пособия.  Посадочных мест – 18.
2.	<b>Помещение № 205</b> Специальное помещение предназначено для самостоятельной работы обучающихся	Укомплектовано специализированной мебелью и техническими средствами: -офисный стол – 1 шт.; - письменный стол – 5 шт; - кресло офисное – 1 шт.; - 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 – 4 шт.; - цветной лазерный принтер A3 EPSON C9100 – 1 шт.

		Посадочных мест – 6.
3.	<p><b>Помещение № 210</b>  <b>Компьютерный класс</b>          Специальное помещение для проведения практических, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающихся.</p> <p>г. Апатиты, Академгородок, д. 50 а</p>	<p>Укомплектовано оборудованием и техническими средствами обучения, необходимыми для освоения программ дисциплин (модулей), в том числе имеется:          компьютер Intel Pentium 4 Гб ОЗУ;          расчетные квантово-химические программы: ChemOffice, GAMESS, ABINIT;          базы данных, информационно-справочные и поисковые системы  <b>Cambridge Crystallographic Data Centre, База данных по свойствам химических элементов "Elements"</b>  <a href="http://phases.imet-db.ru/elements/main.aspx">http://phases.imet-db.ru/elements/main.aspx</a></p>

**Таблица 9 - Технологическая карта дисциплины (промежуточная аттестация - экзамен)**

Дисциплина «Квантовая механика и квантовая химия»

№ п/п	Контрольные точки	Зачетное количество баллов		График прохождения (недели сдачи)
		min	max	
<b>Текущий контроль</b>				
1	2	3	4	5
1.	Выполнение практического занятия №1, 2	5	6	5-я неделя
2.	Выполнение практического занятия №3, 4	5	6	6-я неделя
3.	Выполнение практического занятия №5, 6	5	6	7-я неделя
4.	Выполнение практического занятия №7, 8	5	6	8-я неделя
5.	Выполнение практического занятия №9, 10	5	6	9-я неделя
6.	Выполнение лабораторной работы №1	6	8	10-я неделя
7.	Выполнение лабораторной работы №2	6	8	11-я неделя
8.	Выполнение контрольной работы №1.	6	8	9-неделя
9.	Выполнение контрольной работы №2.	6	8	13-неделя
10.	Своевременное выполнение заданий	6	8	в течение семестра
11.	Посещение занятий	5	10	Свыше 75% посещенных занятий – 10, от 75 до 50% - 5, менее 50% - 0
	Итого:	60	80	60 баллов и более – допуск к экзамену
<b>Промежуточная аттестация – экзамен</b>				
	Экзамен	10	20	Экзаменационная сессия
				Оценка «5» - 20 баллов;

				<i>Оценка «4» - 15 баллов; Оценка «3» - 10 баллов.</i>
	<b>Итоговые баллы по дисциплине</b>	<b>70</b>	<b>100</b>	69 и менее баллов – «неудовлетворительно»; 70-80 – «удовлетворительно»; 81-90 – «хорошо»; 91-100 – «отлично».