

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Байханов Исмаил Баутдильдин
Должность: Декан
Дата подписания: 13.07.2023 08:51:55
Уникальный программный идентификатор:
442c337cd125e1d014f62698c9d813e502697764

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ЧЕЧЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Кафедра химии и методики преподавания химии

Утверждаю:
И.о.зав.кафедры: **И.В. Ибрагимова**



Протокол № _____ заседания
кафедры от 28.04 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ И ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ»
(наименование дисциплины)

Направление подготовки
44.03.05 Педагогическое образование
(код и направление подготовки)

Профили подготовки
«Химия» и «Биология»

Квалификация
Бакалавр

Форма обучения
очная/заочная/очно-заочная

Год набора - 2023

Грозный, 2023

1. ПАСПОРТ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к вариативной части (Б1.В.01.02) основной образовательной программы подготовки бакалавров направления 44.03.05. «Педагогическое образование» (с двумя профилями подготовки) по профилям «Химия» и «Биология».

Обучающиеся изучают данную дисциплину в 8 семестре 4 курса. Её изучению предшествует освоение таких дисциплин учебного плана, как Б1.В.01.04 Экспериментальные методы в химии, Б1.О.07.01.01 Решение химических задач, Б1.О.07.02.01 Общая и неорганическая химия, Б1.О.07.02.03 Аналитическая химия, Б1.О.07.02.04 Органическая химия, Б1.О.07.01.02 Внеурочная работа по химии, Б1.О.07.02.02 Неорганический синтез, является необходимой основой для последующего изучения таких дисциплин учебного плана, Б1.О.07.02.05 Органический синтез, Б1.О.07.01.03 Теория и методика обучения химии, Б1.О.07.02.06 Биохимия, Б1.О.07.02.09 Химия окружающей среды, Б1.В.01.01 Химия высокомолекулярных соединений, Б1.В.01.03 Научно-исследовательская работа по химии, Б1.В.ДВ.01.02 Избранные главы органической химии.

Также освоение дисциплины Б1.В.01.02 Строение молекул и основы квантовой химии является основой для прохождения таких практик, как Б2.О.01.01(У) Технологическая практика (проектно-технологическая практика), Б2.О.02.01(П) Педагогическая практика, Б2.О.01.02(У) Научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы), Б2.О.02.05(П) Производственная практика, научно-исследовательская работа, Б2.О.02.04(Пд) Преддипломная практика, Б3.01(Г) Подготовка к сдаче и сдача государственного экзамена, Б3.02(Д) Выполнение и защита выпускной квалификационной работы.

1.2. Цель освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» является формирование у обучающихся компетенций модуля «Химия» и приобретение ими знаний в области теоретических основ фундаментальных разделов химии, владения фундаментальными химическими понятиями, представлений о структуре вещества в современной химии; формирование готовности использовать полученные знания при решении профессиональных задач, в частности, использовать возможности квантовой теории для описания и предсказания свойств химических соединений, а также для грамотного изложения соответствующего материала школьного курса Химии на современном уровне развития науки.

1.3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Достижение цели освоения дисциплины обеспечивается через формирование следующих компетенций: *ПК-1*.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенций, которые формирует дисциплина (модуль)	Планируемые результаты обучения
ПК-1 - Способен осваивать и использовать теоретические знания и практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач	ПК-1.1. Знает структуру, состав и дидактические единицы предметной области (преподаваемого предмета). ПК-1.2. Умеет осуществлять отбор учебного содержания для его реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО. ПК-1.3. Демонстрирует умение	Знает: - теоретические основы фундаментальных и прикладных разделов химии; - требования ФГОС ОО к содержанию и результатам обучения по предметной области «Химия».

	<p>разрабатывать различные формы учебных занятий, применять методы, приемы и технологии обучения, в том числе информационные.</p>	<p>Умеет: - применять теоретические знания, практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач; - осуществлять отбор учебного содержания для реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО; - разрабатывать различные формы учебных занятий по химии.</p> <p>Владеет: - навыком безопасного обращения с химическими веществами с учетом их химических и физических свойств; - умением использовать в профессиональной деятельности различные методы, приемы и технологии обучения, в том числе информационные.</p>
--	---	--

1.4. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 23.е. (72 академ. часа)

Таблица 2

Вид учебной работы	Количество академ. часов		
	Очно	Заочно	Очно-заочная
4.1. Объем контактной работы обучающихся с	30	12	20
4.1.1. аудиторная работа	30	12	20
в том числе:			
лекции	10	4	10
практические занятия, семинары, в том числе практическая	20	8	10
лабораторные занятия	-	-	
4.1.2. внеаудиторная работа			
в том числе:			
индивидуальная работа обучающихся с преподавателем			
курсовое проектирование/работа			
групповые, индивидуальные консультации и иные виды учебной деятельности, предусматривающие групповую или индивидуальную работу обучающихся с преподавателем			

4.2. Объем самостоятельной работы обучающихся	42	56	52
в том числе часов, выделенных на подготовку к экзамену		4	

2. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Тематическое планирование дисциплины:

Таблица 3

№ п/ п	Наименование темы (раздела) дисциплины (модуля)	Общая трудоёмкость в акад. часах			Трудоёмкость по видам учебных занятий (в акад. часах)								
					Лекции			Практ. занятия			Сам. работа		
		Оч но	Заоч н.	Оч но- зао чн ая	Оч но	Зао чн.	Оч но- зао чн ая	Оч но	Зао чн.	Оч но- зао чна я	Очн о	Заоч н.	Очн о- заоч ная
1.	Описание вещества в квантовой механике.	14	14	14	2	2	2	4	2	2	8	10	10
2.	Задача о движении электрона в атоме водорода.	16	16	14	2	2	2	4	2	2	10	12	10
3.	Адиабатическое приближение.	14	12	14	2	-	2	4	2	2	8	10	10
4.	Спин электрона.	14	12	14	2	-	2	4	-	2	8	12	10
5.	Антисимметричность волновой функции.	14	14	16	2	-	2	4	2	2	8	12	12
6.	Подготовка к экзамену (зачету)		4										
7.	Итого:	72	72	72	10	4	10	20	8	10	42	56	52

2.2 Содержание разделов дисциплины:

Таблица 4

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Содержание дисциплины (дидактические единицы) <i>(для педагогических профилей наполняется с учетом ФГОС основного общего и среднего общего образования)</i>
8 семестр		
1	Описание вещества в квантовой механике.	1. Постулаты квантовой механики. Волновая функция, ее свойства, вероятностная трактовка квадрата модуля, нормировочный множитель волновой функции. Квантово-механические операторы: энергии (оператор Гамильтона), координаты, импульса. Временное и стационарное уравнения Шрёдингера. 2. Модельные задачи квантовой механики. Рассмотрение задач о свободном движении частицы и о её движении в потенциальном поле.

2	Задача о движении электрона в атоме водорода.	Этапы решения уравнения Шрёдингера: отделение центра масс, переход в сферические координаты, отделение радиальной и угловой частей. Уравнение, зависящее от угловых переменных. Радиальное уравнение. Энергетический спектр. Комплексные и вещественные атомные орбитали вырожденных уровней. Граничные поверхности волновых функций
3	Адиабатическое приближение.	Молекулярный гамильтониан. Электронный гамильтониан. Адиабатическое приближение и приближение БорнаОппенгеймера. Потенциальные кривые, поверхности потенциальной энергии — основные понятия
4	Спин электрона.	Спин, или собственный угловой момент электрона. Спиновые функции. Определение функций, собственных для операторов S_z и S^2 .
5	Антисимметричность волновой функции.	Перестановочная симметрия волновой функции, описывающей одинаковые частицы. Антисимметризатор. Детерминант Слейтера.

3. УСЛОВИЯ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Таблица 5

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Вид самостоятельной работы обучающихся
1.	Описание вещества в квантовой механике.	Чтение специальной литературы. Работа с конспектом лекций. Подготовка к учебным занятиям. Выполнение домашних заданий
2.	Задача о движении электрона в атоме водорода.	Чтение специальной литературы. Работа с конспектом лекций. Подготовка к учебным занятиям. Выполнение домашних заданий
3.	Адиабатическое приближение.	Чтение специальной литературы. Работа с конспектом лекций. Подготовка к учебным занятиям. Выполнение домашних заданий. Подготовка к контрольной работе №1.
4.	Спин электрона.	Чтение специальной литературы. Работа с конспектом лекций. Подготовка к учебным занятиям. Выполнение домашних заданий
5.	Антисимметричность волновой функции.	Чтение специальной литературы. Работа с конспектом лекций. Подготовка к учебным занятиям. Выполнение домашних заданий. Подготовка к контрольной работе №2.

3.2. Учебно-методическое и информационное обеспечение программы дисциплины

3.2.1. Основная и дополнительная литература

Таблица 6

Виды литературы	Автор, название литературы, город, издательство, год	Количество часов, обеспеченных указанной	Количество обучающихся	Количество студентов	Режим доступа ЭБС/ электронный носитель (CD,DVD)	Обеспеченность обучающихся литературой,
1	2	3	4	5	6	7
Основная литература						
1	Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул / И. Майер; под редакцией А. Л. Чугреева; перевод М. Б. Дарховский, А. М. Токмачев. — 4-е изд. — Москва: Лаборатория знаний, 2021. — 385 с. — ISBN 978-5-93208-516-5. — Текст: электронный.	30/42	25		Цифровой образовательный ресурс IPR SMART: [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/103017.html	100%
2	Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. — 5-е изд. — Москва: Лаборатория знаний, 2021. — 520 с. — ISBN 978-5-93208-518-9. — Текст: электронный.	30/42	25		Цифровой образовательный ресурс IPR SMART: [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/105769.html	100%
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, 2022. — 183 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00127-3. — Текст: электронный.	30/42			Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/491725	
Дополнительная литература						

4	Бурмистрова, Н. А. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студентов, обучающихся по направлению подготовки 04.03.01 «Химия» / Н. А. Бурмистрова, М. В. Пожаров, М. П. Смотров. — Саратов: Издательство Саратовского университета, 2020. — 68 с. — ISBN 978-5-292-04637-0. — Текст: электронный.	30/42	25		Цифровой образовательный ресурс IPR SMART: [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/106265.html	100%
5	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, 2022. — 402 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст: электронный.	30/42	25		Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/491726	100%

3.2.2. Интернет-ресурсы

1. Цифровой образовательный ресурс «IPR SMART». <https://www.iprbookshop.ru>
 2. Образовательная платформа «Юрайт». <https://urait.ru/>
 3. Электронно-библиотечная система «Лань». <https://e.lanbook.com/>
 4. МЭБ (межвузовская электронная библиотека) НГПУ. <https://icdlib.nspu.ru/>
 5. Научная электронная библиотека ELIBRARY.RU. <https://www.elibrary.ru/>
 6. СПС «Консультант Плюс». <http://www.consultant.ru/>
- ОТКРЫТЫЙ РЕСУРС**
7. Единое окно доступа к образовательным ресурсам. <http://window.edu.ru/catalog/>
 8. Научная электронная библиотека «Киберленинка». <https://cyberleninka.ru/>

3.3. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для осуществления образовательного процесса по дисциплине необходима следующая материально-техническая база:

Таблица 7

Помещения для осуществления образовательного процесса	Перечень основного оборудования (с указанием количества посадочных мест)	Адрес (местоположение)
Аудитория для проведения лекционных занятий		
Аудитория 3-16. Специализированная для проведения лекционных занятий по дисциплине.	Интерактивная доска, компьютер, мультимедийный проектор для демонстрации иллюстративного материала на лекциях, подключение к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ЧГПУ. Имеется 25 посадочных мест.	Г. Грозный, Ахматовский р-н, ул. С. Кишиевой, 33.

Аудитории для проведения практических занятий, контроля успеваемости		
Аудитория 3-16. Специализированная для проведения практических занятий по дисциплине.	Интерактивная доска, компьютер, мультимедийный проектор для демонстрации иллюстративного материала, подключение к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ЧГПУ. Доска меловая, демонстрационный материал, слайды и схемы, плакаты и таблицы по курсу «Органическая химия». Имеется 25 посадочных мест	Г. Грозный, Ахматовский р-н, ул.С.Кишиевой, 33.
Помещения для самостоятельной работы		
Методический кабинет факультета естествознания.	Литературные источники (учебники, учебно-методические пособия, задачки и др.) в печатном издании.	Г. Грозный, Ахматовский р-н, ул.С.Кишиевой, 33.
Библиотека ЧГПУ.	Литературные источники в печатном издании, подключение к сети Интернет и обеспечение доступа в электронную информационно-образовательную среду ЧГПУ, ЭБС – IPRSMART, «ЮРАЙТ», «Лань», МЭБ и др.	Г. Грозный, Ахматовский р-н, ул.С.Кишиевой, 33.

4. КОНТРОЛЬ И ОЦЕНКА РЕЗУЛЬТАТОВ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. ХАРАКТЕРИСТИКА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения практических занятий, контрольных работ, а также выполнения обучающимися индивидуальных заданий, проектов, исследований и т.д.

Таблица 8

№ п/п	Наименование темы (раздела) с контролируемым содержанием	Код и наименование проверяемых компетенций	Оценочные средства	
			текущий контроль	промежуточная аттестация
8 семестр				
1.	Описание вещества в квантовой механике.	ПК-1 - Способен осваивать и использовать теоретические	Коллоквиум, решение задач.	Зачет
2.	Задача о движении электрона в атоме водорода.		Коллоквиум, тестовые задания решение задач,	
3.	Адиабатическое приближение.		Коллоквиум, решение задач, контрольная работа	

4.	Спин электрона.	знания и практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач.	Коллоквиум, решение задач, презентация или доклад.
5.	Антисимметричность волновой функции.		Коллоквиум, тестовые задания, решение задач, контрольная работа. №2.

4.2. Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости

4.2.1. Наименование оценочного средства: *тест*

Примерные вопросы для тестирования

1. Квантовая химия изучает:

- а. Качественный и количественный анализ веществ
- б. Взаимное превращение одного вида энергии в другой.
- в. Химические процессы на основе физических законов.
- г. Поверхностные явления на разделе фаз.
- д. Строение вещества на основе математики и других наук.

2. В теории химического строения вещества коллективное взаимодействие можно рассматривать как образование:

- а. Всевозможных связей между атомами
- б. Парных связей между атомами
- в. «Связанных» и «несвязанных» атомов

3. Теория строения вещества объясняет, что:

- а. Все взаимодействия между атомами являются главными («сильными»);
- б. Часть взаимодействий между атомами являются главными («сильными»), часть взаимодействий между атомами слабыми;
- в. Невозможно определить наличие главных и слабых связей между атомами.

4. В теории строения вещества представлена взаимосвязь между строением вещества и его свойствами как

- а. функция парциальных свойств только эффективных атомов и химических связей;
- б. функция парциальных свойств химических связей и пар несвязанных атомов;

5. Синхротронное излучение имеет природу:

- а. светового луча
- б. электрического поля
- в. электромагнитного поля;

6. Постулаты Бора характеризуют атом в:

- а. неустойчивом состоянии
- б. переходном состоянии;
- в. стационарном состоянии;

7. Гипотеза Ле де Бройля объясняет, что электрон способен:

- а. дифрагировать подобно волнам сохраняя свои свойства;
- б. дифрагировать подобно волнам не сохраняя свои свойства;

8. Выберите формулу, которая характеризует монохроматическое излучение атома при переходе из одного стационарного состояния в другое:

- а. $E_2 h \omega = E_1 + E_2$
- б. $h \omega = E_1 -$
- в. $h / \omega = E_1 - E_2$

9. Волновая функция характеризуется:

- а. как комплексная величина;
- б. как величина не зависящая от времени;
- в. как величина, обладающая свойством дискретности;

12. Возникновение волнового пакета:

- а. не зависит от изменения величины волновой функции.
- б. зависит от резкого понижения волновой функции
- в. зависит от резкого возрастания волновой функции.

Критерии оценивания результатов тестирования

Таблица 9

Уровень освоения	Критерии	Баллы
Максимальный уровень	Выполнены правильно все задания теста (тест зачтен)	2
Средний уровень	Выполнено правильно больше половины заданий (тест зачтен)	1
Минимальный уровень	Выполнено правильно меньше половины заданий (тест не зачтен)	0

4.2.2. Наименование оценочного средства: практико-ориентированное задание по решению типовых задач

Примерные практико-ориентированные задания по решению типовых задач:

Задача 1.

Какую энергию (в эВ) и скорость приобретает электрон отдачи при комптоновском рассеянии света с длиной волны $\lambda=0.1$ нм на угол $\theta=90^\circ$?

Задача 2.

Длины волн видимой части спектра находятся в пределах от $0.4=\lambda_1$ мкм до $2\lambda_2=0.75$ мкм. В каких пределах заключена энергия квантов света и скорости электронов, энергия которых равна энергии квантов? ($3 \cdot 10^{-16}$ эВ, $1.04 \cdot 10^6 - 7.62 \cdot 10^5$ м/с)

Задача 3.

Записать уравнение Шредингера для электрона (1) в атоме водорода; (2) в водородоподобном атоме; (3) в атоме гелия.

Критерии оценивания результатов выполнения практико-ориентированного задания

Таблица 10

Уровень освоения	Критерии	Баллы
Максимальный уровень	Задание выполнено правильно: выводы аргументированы, основаны на знании материала.	3
Средний уровень	Задание выполнено в целом правильно: но допущены ошибки в решении, обнаружено поверхностное владение материалом.	2
Минимальный уровень	Задание выполнено с ошибками в решении и обнаружено слабое владение материалом.	1
Минимальный уровень не достигнут	Задание не выполнено или выполнено с серьёзными ошибками	0

4.2.3. Наименование оценочного средства: доклад/презентация

Примерные темы докладов/презентаций:

1. Основные положения квантовой химии
2. Электронное строение атома. Принцип Паули, правило Хунда, принцип наименьшей энергии.
3. Особенности движения электронов в атоме.
4. Квантовая теория образования химических связей.

5. Адиабатическое приближение и понятие о поверхностях потенциальной энергии слоя.
6. Расчетные методы квантовой химии»
7. Валентность. Валентные электроны. Атом в возбужденном состоянии. π - и σ -связи.
8. Строение и свойства сопряженных молекул координационных соединений: теория МО и теория полилигандов.
9. Квантовая теория химических реакций.
10. Квантовая теория образования химических связей.

Критерии и шкалы оценивания доклада/сообщения (в форме презентации):

Таблица 11

Уровень освоения	Критерии	Баллы
Максимальный уровень	<ul style="list-style-type: none"> – продемонстрировано умение выступать перед аудиторией; – содержание выступления даёт полную информацию о теме; – продемонстрировано умение выделять ключевые идеи; – умение самостоятельно делать выводы, использовать актуальную научную литературу; – высокая степень информативности, компактность слайдов 	3
Средний уровень	<ul style="list-style-type: none"> – продемонстрирована общая ориентация в материале; – достаточно полная информация о теме; – продемонстрировано умение выделять ключевые идеи, но нет самостоятельных выводов; – невысокая степень информативности слайдов; – ошибки в структуре доклада; – недостаточное использование научной литературы 	2
Минимальный уровень	<ul style="list-style-type: none"> – продемонстрирована слабая (с фактическими ошибками) ориентация в материале; – ошибки в структуре доклада; – научная литература не привлечена 	1
Минимальный уровень не достигнут	<ul style="list-style-type: none"> – выступление не содержит достаточной информации по теме; – продемонстрировано неумение выделять ключевые идеи; – неумение самостоятельно делать выводы, использовать актуальную научную литературу. 	0

4.2.4. Наименование оценочного средства: контрольная работа

Примерное задание для контрольной работы №1:

1. Что представляют собой: собственная функция и собственное значение, оператор, волновая функция, мнимая единица, вероятность обнаружить частицу в заданном объеме?
2. Рассчитайте радиус, при котором электронная плотность вероятности будет максимальной, для состояния атома водорода $3d$.
3. Запишите трехмерное стационарное уравнение Шрёдингера для свободной частицы. Проведите разделение переменных.

Примерное задание для контрольной работы №2:

1. Дайте определения терминам: функционал, поворотная ось симметрии. Запишите уравнения Хартри-Фока, поясните входящие в уравнения обозначения. Сформулируйте вариационный принцип квантовой механики.

2. Имеет ли собственное значение ϵ_1 оператора Фока физический смысл одноэлектронной энергии? Ответ поясните.

3. Атом гелия в основном состоянии имеет электронную конфигурацию (1s) Постройте детерминантную функцию для этой конфигурации. Определите, какой мультиплетности она соответствует.

Критерии оценивания результатов контрольной работы

Таблица 12


Балл (интервал баллов)	Уровень освоения	Критерии оценивания уровня освоения компетенций*
10	Максимальный уровень (интервал)	Контрольная работа оформлена в соответствии с предъявляемыми требованиями, содержит 1-2 мелких ошибки; ответы студента правильные, четкие, содержат 1-2 неточности
[6-8]	Средний уровень (интервал)	Контрольная работа содержит одну принципиальную или 3 или более недочетов; ответы студента правильные, но их формулирование затруднено и требует наводящих вопросов от преподавателя
[3-5]	Минимальный уровень (интервал)	Контрольная работа оформлена в соответствии с предъявляемыми требованиями, неполное раскрытие темы в теоретической части и/или в практической части контрольной работы; ответы студенты формально правильные, но поверхностны, плохо сформулированы, содержат более одной принципиальной ошибки
Менее 3	Минимальный уровень (интервал) не достигнут.	Контрольная работа содержит более одной принципиальной ошибки моделей решения задачи; контрольная работа оформлена не в соответствии с предъявляемыми требованиями; ответы студента путанные, нечеткие, содержат множество ошибок, или ответов нет совсем; несоответствие варианту.

4.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации

Представлено в приложении №1.

Автор рабочей программы дисциплины:

доцент кафедры химии и МПХ, к.х.н.

 Асуева Л.А.
(подпись)

СОГЛАСОВАНО:

Директор библиотеки

 Арсагириева Т.А.
(подпись)

Оценочные средства
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине
«Строение молекул и основы квантовой химии»
Направление подготовки
44.03.05 ПЕДАГОГИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ
(с двумя профилями подготовки)
Профили подготовки «Химия» и «Биология»
Форма обучения: очная, заочная и очно-заочная
Год приема: 2023

1. Характеристика оценочной процедуры:

Семестр—8.

Форма аттестации – зачет.

2. Оценочные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

2.1. Вопросы для промежуточной аттестации по дисциплине:

8 семестр (зачет)

1. Постулаты квантовой механики.
2. Волновая функция, ее свойства, вероятностная трактовка квадрата модуля, нормировочный множитель волновой функции.
3. Постулаты квантовой механики.
4. Квантово-механические операторы: энергии (оператор Гамильтона), координаты, импульса.
5. Временное и стационарное уравнения Шредингера.
6. Собственные функции и собственные значения операторов.
7. Модельная задача о движении свободной частицы. Уравнение Шредингера и его решение.
8. Модельная задача о движении частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
9. Уравнение Шредингера и его решение.
10. Задача о движении электрона в атоме водорода.
11. Этапы решения уравнения Шредингера: отделение центра масс, переход в сферические координаты, отделение радиальной и угловой частей.
12. Задача о движении электрона в атоме водорода.
13. Уравнение, зависящее от угловых переменных.
14. Радиальное уравнение.
15. Энергетический спектр атома водорода.
16. Комплексные и вещественные атомные орбитали вырожденных уровней.
17. Граничные поверхности волновых функций.
18. Электронный гамильтониан.
19. Адиабатическое приближение и приближение Борна-Оппенгеймера.
20. Потенциальные кривые, поверхности потенциальной энергии — основные понятия.
21. Спин, или собственный угловой момент электрона.
22. Спиновые функции.
23. Определение функций, собственных для операторов S_z и S^2 .
25. Перестановочная симметрия волновой функции, описывающей одинаковые частицы.

- 26. Антисимметризатор.
- 27. Детерминант Слейтера.
- 24. Вариационный метод в квантовой механике.
- 25. Вариационный принцип

2.2. Структура билета для зачета (примерная):

1. *Теоретический вопрос:* Постулаты квантовой механики.

2. *Практико-ориентированное задание:* Рассчитайте радиус, при котором электронная плотность вероятности будет максимальной, для состояния атома водорода 3d.

Критерии и шкала оценивания устного ответа обучающегося на экзамене (зачете)

Максимальное количество баллов на зачете – 30, из них:

- 1. Ответ на первый вопрос, содержащийся в билете – 15 баллов.
- 2. Ответ на второй вопрос, содержащийся в билете – 15 баллов.

Таблица 14

№ п/п	Характеристика ответа	Баллы
1.	Ответ на поставленный вопрос правильный, полный (исчерпывающий), с пояснениями и примерами.	13-15
2.	Ответ на поставленный вопрос правильный и полный, формулировки приведены верно, но не приведены пояснения и (или) примеры	10-12
3.	Ответ на поставленный вопрос не полный, в формулировках имеют место существенные ошибки и неоднозначность.	7-9
4.	Ответ на поставленный вопрос не полный, в формулировках имеют место грубые ошибки и неоднозначность. Ответ на поставленный вопрос не содержит правильных положений, в формулировках имеют место существенные ошибки. Ответ отсутствует.	6 и менее

Расчет итоговой рейтинговой оценки

Таблица 15

До 50 баллов включительно	«неудовлетворительно»
От 51 до 70 баллов	«удовлетворительно»
От 71 до 85 баллов	«хорошо»
От 86 до 100 баллов	«отлично»

3. Уровни сформированности компетенций по итогам освоения дисциплины

Таблица 16

Индикаторы достижения компетенции (ИДК)	Уровни сформированности компетенций			
	«отлично»	«хорошо»	«удовлетворительно»	«неудовлетворительно»
	86-100	71-85	51-70	Менее 51
	«зачтено»			«не зачтено»
Код и наименование формируемой компетенции				
ПК-1-Способен осваивать и использовать теоретические знания и	Знает: - теоретические основы фундаментальных и прикладных разделов химии;	Знает:- теоретические основы фундаментальных и прикладных разделов химии;	Знает:- теоретические основы фундаментальных и прикладных разделов	Не знает: - теоретические основы фундаментальных и прикладных раз-

практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач.	- требования ФГОС ОО к содержанию и результатам обучения по предметной области «Химия».	- требования ФГОС ОО к содержанию и результатам обучения по предметной области «Химия».	химиически; - требования ФГОС ОО к содержанию и результатам обучения по предметной области «Химия».	делов химии; - требования ФГОС ОО к содержанию и результатам обучения по предметной области «Химия».	
	Умеет: - применять теоретические знания, практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач; - осуществлять отбор учебного содержания для реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО; - разрабатывать различные формы учебных занятий по химии.	Умеет: - применять теоретические знания, практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач; - осуществлять отбор учебного содержания для реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО; - разрабатывать различные формы учебных занятий по химии.	Умеет: - применять теоретические знания, практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач; - осуществлять отбор учебного содержания для реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО; - разрабатывать различные формы учебных занятий по химии.	Умеет: - применять теоретические знания, практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач; - осуществлять отбор учебного содержания для реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО; - разрабатывать различные формы учебных занятий по химии.	Не умеет: - применять теоретические знания, практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач; - осуществлять отбор учебного содержания для реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО; - разрабатывать различные формы учебных занятий по химии.
	Владеет: - навыком безопасного обращения с химическими веществами с учетом их химических и физических свойств; - умением использовать в профессиональной деятельности различные методы, приемы и технологии обучения, в том	Владеет: - навыком безопасного обращения с химическими веществами с учетом их химических и физических свойств; - умением использовать в профессиональной деятельности различные методы, приемы и технологии обучения, в том	Владеет: - навыком безопасного обращения с химическими веществами с учетом их химических и физических свойств; - умением использовать в профессиональной деятельности различные методы, приемы и технологии обучения, в том	Владеет: - навыком безопасного обращения с химическими веществами с учетом их химических и физических свойств; - умением использовать в профессиональной деятельности различные методы, приемы и технологии обучения, в том числе	Не владеет: - навыком безопасного обращения с химическими веществами с учетом их химических и физических свойств; - умением использовать в профессиональной деятельности различные методы, приемы и технологии обучения, в том

	числе информационные.	числе информационные, с возможными незначительными погрешностями, не препятствующим и успешному выполнению задач в целом.	информационные, но не оптимальным способом и с существенными ошибками, значительно ухудшающими качество решения задач.	числе информационные.
--	-----------------------	---	--	-----------------------

4. Рейтинг-план изучения дисциплины

Таблица 17

I	БАЗОВАЯ ЧАСТЬ РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЫ		
Виды контроля	Контрольные мероприятия	Мин. кол-во баллов на занятиях	Макс. кол-во баллов на занятиях
8 семестр			
Текущий контроль №1	Тема № 1. Описание вещества в квантовой механике.	0	10
Текущий контроль №2	Тема № 2. Задача о движении электрона в атоме водорода.	0	10
	Тема № 3 Адиабатическое приближение		
Рубежный контроль: контрольная работа №1 (Темы 1-3)		0	10
Текущий контроль №3	Тема 4. Спин электрона.	0	10
Текущий контроль №4	Тема 5. Антисимметричность волновой функции.	0	10
Рубежный контроль: контрольная работа №2 (Темы 4,5)		0	10
Допуск к промежуточной аттестации		Мин 36	
II	ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЧАСТЬ РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЫ	Мин.	Макс.
1	Поощрительные баллы	0-10	10
	Подготовка доклада с презентацией по дисциплине	0-1	1
	Посещаемость лекций (100%)	0-2	2
	Участие в работе круглого стола, студенческой	0-2	2

	конференции		
	Соц.-личностный рейтинг	0-3	3
	Участие в общественной, культурно-массовой и спортивной работе	0-2	2
2	Штрафные баллы		0-3
	Пропуск учебных лекций	за пропуск лекции снимается балльная стоимость лекции (2:8=0,25)	0,25 x N (N – количество пропущенных лекций)
	Несвоевременное выполнение контрольной (аттестационной) работы №1	минус 5% от максимального балла	- 0,5
	Несвоевременное выполнение контрольной (аттестационной) работы №2	минус 5% от максимального балла	- 0,5
III	ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ		0-30
Форма итогового контроля:	Зачет	0-30	30
ИТОГО БАЛЛОВ ЗА СЕМЕСТР:			0-100

**ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.01.02 «Строение молекул и основы квантовой химии»
(наименование дисциплины)
Направление подготовки 44.03.05 Педагогическое образование
Профили «Химия» и «Биология»
(год набора 2023, форма обучения очная, заочная и очно-заочная)
на **2023 / 2024 учебный год****

В рабочую программу дисциплины вносятся следующие изменения:

№ п/п	Раздел рабочей программы (пункт)	Краткая характеристика вносимых изменений	Основание для внесения изменений