

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Щёкина Вера Витальевна

Должность: Ректор

Дата подписания: 31.05.2024 08:08:15

Уникальный программный ключ:

a2232a55157e576551899911190892af53989120420736ffb573e474e57789




**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Благовещенский государственный педагогический  
университет»**

**ОСНОВНАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА  
Рабочая программа дисциплины**

**УТВЕРЖДАЮ**

**Декан естественно-географического  
факультета ФГБОУ ВО «БГПУ»**

  
**И.А. Трофимцова**  
**«22» мая 2019 г.**

**Рабочая программа дисциплины  
ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ХИМИЮ**

**Направление подготовки  
04.03.01 ХИМИЯ**

**Профиль  
«АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

**Уровень высшего образования  
БАКАЛАВРИАТ**

**Принята на заседании кафедры химии  
(протокол № 8 от «15» мая 2019 г.)**

**Благовещенск 2019**

## СОДЕРЖАНИЕ

1	ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА	3
2	УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ.....	4
3	СОДЕРЖАНИЕ ТЕМ (РАЗДЕЛОВ) .....	8
4	МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) ДЛЯ СТУДЕНТОВ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ .....	11
5	ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ.....	13
6	ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА.....	18
7	ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ.....	34
8	ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ.....	34
9	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ.....	35
10	МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА.....	35
11	ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ.....	38

## 1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

**1.1 Цель дисциплины:** познакомить студентов с основными понятиями, методами и законами квантовой механики, продемонстрировать возможность их применения в решении проблем современной химии, сформировать у студентов представления о современных квантово-химических расчетах.

### 1.2 Место дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина «Введение в квантовую химию» относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений блока Б1 (Б1.В.06).

**1.3 Дисциплина направлена на формирование следующих компетенций:** УК-1; ОПК-3; ПК-1:

- **УК-1.** Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач, **индикаторами** достижения которой является:

- УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие;
- УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи;
- УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов;
- УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения, в том числе с применением философского понятийного аппарата.

• УК-1.5. Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

- **ОПК-3** Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники, **индикаторами** достижения которой является:

- ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности
- ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

– **ПК-1.** Владеет системой фундаментальных химических понятий и законов, **индикаторами** достижения которой является:

- ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования.
- ПК-1.2. Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности
- ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин

### 1.4 Перечень планируемых результатов обучения.

В результате изучения дисциплины студент должен:

– **Знать:**

- начала квантовой теории, примеры применения квантовой механики;
- основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач;
- основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности;
- стандартные операции по предлагаемым методикам

– **Уметь:**

- анализировать задачу, выделяя ее базовые составляющие: приближенные методы решения уравнения Шредингера, метод возмущения, вариационные методы, основные пути введения приближений: упрощение аналитического вида пробных волновых функций, приближенное вычисление интегралов, параметризация на основе экспериментальных данных;

- проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач;
- применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов;
- выбирать методы диагностики веществ и материалов, проводить стандартные измерения.

– **Владеть:**

- навыками при обработке информации отличать факты от мнений, интерпретаций, оценок, формировать собственные мнения и суждения, аргументировать свои выводы и точку зрения, в том числе с применением философского понятийного аппарата. навыками работы с научными и образовательными порталами;

- базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу;

- навыками планирования, анализа.

**1.5 Общая трудоемкость дисциплины «Введение в квантовую химию» составляет 5 зачетных единицы (далее – ЗЕ) (180 часов).**

Программа предусматривает изучение материала на лекциях и лабораторных занятиях. Предусмотрена самостоятельная работа студентов по темам и разделам. Проверка знаний осуществляется фронтально, индивидуально.

**1.6 объем дисциплины и виды учебной деятельности**

**Объем дисциплины и виды учебной деятельности**

<b>Вид учебной работы</b>	<b>Всего часов</b>	<b>Семестр 8</b>
Общая трудоемкость	180	180
Аудиторные занятия	86	86
Лекции	44	44
Лабораторные работы	42	42
Самостоятельная работа	58	58
Вид итогового контроля	36	36 экзамен