МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
по дисциплине
«Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии»

Кафедра физической и органической химии
химического факультета

Образовательная программа
04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Профиль подготовки
Физическая химия

Уровень высшего образования
специалитет

Форма обучения
очная

Статус дисциплины: входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений, дисциплина по выбору

Махачкала, 2021 г.

Рабочая программа по дисциплине «Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии» составлена в 2021 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (уровень специалитет) от «13» июля 2017 г. № 652.

Разработчик: кафедра физической и органической химии, Шабанов Осман Мехтиевич, профессор.

Рабочая программа по дисциплине «Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии» одобрена:

на заседании кафедры физической и органической химии от «28» мая 2021г., протокол № 9.
Зав. кафедрой _____ проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета от «18» 06 2021г., протокол № 10.
Председатель _____ доц. Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа по дисциплине «Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии» согласована с учебно-методическим управлением «09» 07 2021г. _____
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина «Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии» входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений и является дисциплиной по выбору по специальности 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия».

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: общепрофессиональных ОПК – 6; профессиональных ПК – 1, 2, 3, 4, 5.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, лабораторные занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости: текущий контроль успеваемости в форме контрольных работ и коллоквиумов; промежуточный контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 3 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий

Семестр	Учебные занятия							Форма промежуточной аттестации
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем						СРС, в том числе экзамен	
	Всего	из них						
		Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	КСР	Консультации		
8	108	20	38	–	–	–	50	Зачет

1. Цели освоения дисциплины заключаются в изучении современных полуэмпирических и неэмпирических методов квантовой химии при построении химических систем.

В настоящее время доступно большое количество пакетов программ для квантово-химических расчетов. Каждый из этих пакетов включает набор различных неэмпирических и полуэмпирических методов. В данной дисциплине будут рассмотрены правила применения различных методов расчета для конкретных химических систем; рассмотрены возможности различных пакетов программ для квантово-химических расчетов.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП специалитета

Дисциплина «Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии» входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений и является дисциплиной по выбору специальности 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия».

В информационном и логическом планах дисциплина «Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии» последовательно развивает общие курсы «Физическая химия», «Квантовая химия», «Строение вещества» и, в свою очередь, служит методологической основой при изучении курса «Теоретические основы органической химии». Курс информационно и логически связан с общими курсами «Математика», «Физика» и «Общая и неорганическая химия».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Код и наименование компетенции из	Код и наименование индикатора достижения	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения

ОПОП	компетенций (в соответствии с ОПОП)		
ОПК-6. Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	**ОПК-6.1.** Грамотно составляет отчет о проделанной работе в письменной форме	**Знает:** требования к рабочему журналу химика; правила составления протоколов отчетов химических опытов; требования к представлению результатов исследований в виде курсовых и квалификационных работ. **Умеет:** представить результаты опытов и расчетных работ согласно требованиям в данной области химии; представить результаты химических исследований в соответствии с требованиями к квалификационным работам. **Владеет:** опытом представления результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в виде протоколов испытаний, отчетов, курсовых и квалификационных работ.	Устный опрос, письменный опрос
	ОПК-6.2. Представляет результаты работы в виде научной публикации (тезисы доклада, статья, обзор) на русском и английском языке	**Знает:** требования к тезисам и научным статьям химического профиля. **Умеет:** составить тезисы доклада и отдельные разделы статьи на русском и английском языке. **Владеет:** навыками представления результатов собственных научных изысканий в компьютерных сетях и информационной научно-образовательной среде	Устный опрос, письменный опрос
	ОПК-6.3. Представляет результаты работы в устной форме на русском и английском языке	**Знает:** грамматику, орфографию и орфоэпию русского и английского языка. **Умеет:** представить результаты исследований в виде постера; формулировать вопросы к членам профессионального сообщества и отвечать на вопросы по теме проведенного исследования; грамотно и логично изложить результаты проделанной	Устный опрос, письменный опрос

		работы в устной форме на русском и английском языке. **Владеет:** свободно русским и английским языком.	
ПК-1. Способен проводить сбор, анализ и обработку литературных данных для решения поставленной задачи в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	**ПК-1.1.** Собирает информацию по тематике научного проекта в выбранной области химии с использованием открытых источников информации и специализированных баз данных	**Знает:** Знает перечень открытых источников информации и специализированных баз данных в области физической химии. **Умеет:** Пользоваться электронными ресурсами и базами данных, а также периодическими изданиями в области физической химии. **Владеет:** навыками сбора информации по тематике научного проекта в области физической химии с использованием открытых источников информации и специализированных баз данных, в том числе Scopus и Web of Science.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-1.2. Анализирует и обрабатывает литературные данные по тематике исследования в выбранной области химии	**Знает:** знает методы систематизации и классификации литературных данных по тематике исследования в области физической химии. **Умеет:** систематизировать и классифицировать литературные данные по тематике исследования в области физической химии. **Владеет:** навыками систематизации и классификации литературных данных по тематике исследования в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос
ПК-2. Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	**ПК-2.1.** Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	**Знает:** методы составления планов отдельных стадий и общего плана исследования в области физической химии. **Умеет:** составлять планы отдельных стадий и общий плана исследования в области физической химии. **Владеет:** навыками составления общего плана исследования в области физической химии и детальных планов отдельных стадий.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-2.2. Выбирает экспериментальные и	**Знает:** экспериментальные и расчетно-теоретические	Устный опрос,

	расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	методы решения поставленной задачи в области физической химии. **Умеет:** выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи в области физической химии исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов. **Владеет:** навыками выбора экспериментальных и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя в области физической химии из имеющихся материальных и временных ресурсов.	письменный опрос
	ПК-2.3. Планирование и проведение научно-исследовательских работ по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство	**Знает:** нормативные документы по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство. **Умеет:** планировать и проводить научно-исследовательские работы по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство. **Владеет:** навыками планирования и проведения научно-исследовательских работ по разработке и внедрению нормативных документов по системам стандартизации, разработки и постановки продукции на производство.	Устный опрос, письменный опрос
ПК-3. Способен проводить экспериментальные и расчетно-теоретические работы по заданной теме в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	**ПК-3.1.** Проводит экспериментальные исследования по заданной теме в выбранной области химии	**Знает:** методы проведения экспериментальных исследований по заданной теме в области физической химии. **Умеет:** проводить экспериментальные исследования по заданной теме в области физической химии. **Владеет:** навыками проведения экспериментальных исследований под руководством руководителя	Устный опрос, письменный опрос

		по заданной теме в области физической химии.	
	ПК-3.2. Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	**Знает:** методы расчетно-теоретических исследования по заданной теме в области физической химии. **Умеет:** проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в области физической химии. **Владеет:** необходимыми навыками качественного проведения расчетно-теоретических исследований по заданной теме в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-3.3. Управляет высокотехнологичным химическим оборудованием	**Знает:** технические характеристики высокотехнологического оборудования. **Умеет:** управлять высокотехнологичным оборудованием. **Владеет:** навыками управления и обслуживания высокотехнологичного оборудования.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-3.4. Проводит испытания новых образцов продукции	**Знает:** методы проведения испытания новых образцов продукции. **Умеет:** проводить испытания новых образцов продукции. **Владеет:** навыками испытания новых образцов продукции.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-3.5. Разрабатывает новые методики контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции	**Знает:** методологию разработки новых методик контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции. **Умеет:** проверять правильность новых методик контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции. **Владеет:** навыками разработки новых методик контроля сырья, прекурсоров и готовой продукции и проверки их правильности.	Устный опрос, письменный опрос
ПК-4. Способен обрабатывать и интерпретировать результаты проведенных работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией	**ПК-4.1.** Обрабатывает полученные данные с использованием современных методов анализа информации	**Знает:** современные методы анализа информации. **Умеет:** применять современные методы анализа информации для обработки полученных данных. **Владеет:** навыками обработки полученных результатов анализа	Устный опрос, письменный опрос

науках с использованием различных методов и подходов		реальных объектов с использованием современных методов анализа информации.	
	ПК-4.2. Грамотно интерпретирует результаты исследований в выбранной области химии	**Знает:** методы интерпретации результатов исследований в области физической химии. **Умеет:** грамотно интерпретировать результаты исследований в области физической химии. **Владеет:** навыками интерпретации и наглядного представления результатов исследований в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-4.3. Анализирует результаты испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции; оценивает степень их соответствия нормативным документам (стандартам и технологическим регламентам)	**Знает:** стандарты и технологические регламенты сырья, прекурсоров, готовой продукции. **Умеет:** анализировать результаты испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции. **Владеет:** навыками статистической обработки результатов испытаний сырья, прекурсоров, готовой продукции; оценки степени их соответствия стандартам и технологическим регламентам.	Устный опрос, письменный опрос
ПК-5. Способен проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	**ПК-5.1.** Критически анализирует полученные результаты исследований в выбранной области химии, выявляет достоинства и недостатки	**Знает:** методы критического анализа полученных результатов исследований в области физической химии, способы выявления достоинств и недостатков. **Умеет:** критически анализировать полученные результаты научных исследований в области физической химии. **Владеет:** навыками критического анализа полученных результатов научных исследований в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-5.2. Готовит отдельные разделы отчетов по результатам НИР и НИОКР в выбранной области химии	**Знает:** методологию подготовки отчетов по результатам НИР и НИОКР в области физической химии. **Умеет:** готовить отдельные разделы отчетов по результатам НИР и НИОКР в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос

		Владеет: навыками подготовки отдельных разделов отчетов по результатам НИР и НИОКР в области физической химии.	
	ПК-5.3. Формулирует рекомендации по продолжению исследования в выбранной области химии	**Знает:** способы подготовки рекомендаций по продолжению исследования в области физической химии. **Умеет:** формулировать рекомендации по продолжению исследования в области физической химии. **Владеет:** навыками формулировки рекомендаций по продолжению исследования в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-5.4. Анализирует полученные результаты и формулирует предложения по оптимизации отдельных стадий технологического процесса	**Знает:** методы анализа полученных результатов и оптимизации отдельных стадий технологического процесса. **Умеет:** анализировать полученные результаты и формулировать предложения по оптимизации отдельных стадий технологического процесса. **Владеет:** навыками анализа полученных результатов и разработки предложений по оптимизации отдельных стадий технологического процесса.	Устный опрос, письменный опрос
	ПК-5.5. Разрабатывает техническую документацию и регламенты	**Знает:** виды технической документации и регламентов в области физической химии. **Умеет:** разрабатывать техническую документацию и регламенты в области физической химии. **Владеет:** навыками и практическим опытом разработки технической документации и регламентов в области физической химии.	Устный опрос, письменный опрос

4. Объем, структура и содержание дисциплины

4.1. Объем дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 академических часов.

4.2. Структура дисциплины

№	Разделы и темы дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (*в часах*)	Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (*по неделям*

				Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	КСР		*семестра*). Форма промежуточной аттестации (*по семестрам*)
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы									
1	Метод Хартри-Фока	7		2	–	8	–	7	Устный опрос, тестирование
2	Расчет молекулярных характеристик	7		4	–	8	–	7	Устный опрос, тестирование
Итого по модулю 1		36		6	–	16	–	14	Коллоквиум
Модуль 2. Полуэмпирические методы квантовой химии									
1	Сущность полуэмпирических методов	7		4	–	8	–	6	Устный опрос, тестирование
2	Современные полуэмпирические методы и их особенности	7		4	–	8	–	6	Устный опрос, тестирование
Итого по модулю 2		36		8	–	16	–	12	Коллоквиум
Модуль 3. Неэмпирические методы квантовой химии									
1	Неэмпирические методы (*ab initio*) и их особенности	7		6	–	6	–	24	Устный опрос, тестирование
Итого по модулю 3		36		6	–	6	–	24	Коллоквиум
Итого		108		20	–	38	–	50	Зачет

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине

Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы

Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Решение задачи о состояниях одноэлектронного атома. Угловая и радиальная задачи: сферические и радиальные функции; орбитали s-, p-, d- типа; радиальные функции распределения электронной плотности. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные функции.

Тема 1. Метод Хартри-Фока

Фокиан, кулоновские и обменные операторы. Канонические уравнения Хартри-Фока и канонические орбитали. Ограниченный и неограниченный варианты метода Хартри-Фока. Приближение МО ЛКАО.

Тема 2. Расчет молекулярных характеристик

Расчет энергетических характеристик, геометрии и распределение электронной плотности молекул.

Модуль 2. Полуэмпирические методы квантовой химии

Тема 1. Сущность полуэмпирических методов

Основные преимущества и недостатки полуэмпирических методов. Применения и ограничения полуэмпирических методов.

Тема 2. Современные полуэмпирические методы и их особенности

Особенности полуэмпирических методов CNDO, INDO, MINDO, AM1, MNDO и т.д.

Модуль 3. Неэмпирические методы квантовой химии

Тема 1. Неэмпирические методы (*ab initio*) и их особенности

Классификация неэмпирических методов квантовой химии. Точность и масштабирование методов *ab initio*. Теория функционала плотности.

4.4. Лабораторные работы

№	Содержание лабораторной работы	Часы
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы		
1	**Лабораторная работа №1.** Решение уравнения Шредингера для атома водорода	4
2	**Лабораторная работа №2.** Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома	4
Модуль 2. Полуэмпирические методы квантовой химии		
1	**Лабораторная работа №3.** Расчет молекулярных характеристик органических молекул	4
2	**Лабораторная работа №4.** Оценка реакционной способности органических молекул	4
Модуль 3. Неэмпирические методы квантовой химии		
1	**Лабораторная работа №5.** Расчет спектральных характеристик ИК-спектра органических молекул неэмпирическим методом B3LYP/6-311G(d, p)	4

5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки специалистов широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС предусматривается использование при проведении занятий следующих активных методов обучения:

- самостоятельное изучение теоретического материала;
- подготовка к лабораторным работам;
- оформление результатов лабораторной работы;
- подготовка к промежуточному контролю;
- подготовка к зачету.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка к отчетам по лабораторным работам.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Подготовка к зачету.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методическое обеспечение
1	Изучение рекомендованной литературы	Устный опрос по разделам дисциплины	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
2	Подготовка к отчетам	Проверка выполнения расчетов, оформления	См. разделы 7.1, 8,

	по лабораторным работам	работы в лабораторном журнале и проработки вопросов к текущей теме по рекомендованной литературе	9 данного документа
3	Решение задач	Проверка домашнего задания	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
4	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
5	Подготовка к зачету	Устный опрос, либо компьютерное тестирование	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа

1. Текущий контроль: подготовка к отчетам по лабораторным работам.

2. Текущий контроль: решение задач.

3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения. Каждую неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка «отлично» ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка «хорошо» ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка «удовлетворительно» ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка «неудовлетворительно» ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Типовые контрольные задания

Контрольные вопросы к зачету

1. Основные принципы квантовой механики.

2. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии, σ- и π- орбитали.

3. Временное и стационарное уравнение Шредингера.

4. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей.

5. Приближения, используемые при решении уравнения Шредингера.

6. Одноэлектронное приближение. Принцип тождественности частиц и принцип Паули. Определитель Слейтера.

7. Метод Хартри-Фока. Фокиан, кулоновские и обменные операторы.

8. Приближение МО ЛКАО.

9. Общие представления о полуэмпирических методах квантовой химии.

10. Анализ заселенностей, расчет зарядов на атомах и порядков связей.

11. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции.

12. Электронные параметры атомов и связей в методе МОХ.

13. Поляризуемости атомов и связей.

14. Индексы реакционной способности молекул.

15. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения.

Примерная тематика рефератов

1. Теория функционала плотности.

2. Современные методы моделирования эффектов растворителя и супрамолекулярного окружения.

3. Применение статистических методов для описания химических процессов.

4. Современные методы молекулярной механики.

5. Теория возмущений Меллера-Плессета.

Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговой контроль (экзамен). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- допуск к выполнению лабораторных работ (10 баллов);
- выполнение и сдача лабораторных работ (20 баллов);
- тестирование (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (с включением задач) – 20 баллов.

Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса «Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии», изучавшим в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

7.2. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающая из текущего контроля – 70% и промежуточного контроля – 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий – 5 баллов;
- участие на практических занятиях – 7 баллов;
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ – 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос – 30 баллов;
- письменная контрольная работа – 30 баллов;
- тестирование – 30 баллов.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Боженко, К.В. Основы квантовой химии: учебное пособие / К.В. Боженко. – Москва: Российский университет дружбы народов, 2010. – 128 с. – ISBN 978-5-209-03510-7. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/11404.html (дата обращения: 25.02.2020).

2. Венер, М.В. Строение молекул и основы квантовой химии: учебное пособие / М.В. Венер. – Москва: Московский городской педагогический университет, 2010. – 90 с. – ISBN 2227-8397. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/26626.html (дата обращения: 25.02.2020).

3. Гельман Г. Квантовая химия. – М.: Бином Лаборатория знаний, 2012. – 533 с.

4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. – М.: Химия, 1986. – 249 с.

5. Фларри Р. Квантовая химия. – М.: Мир, 1985. – 472 с.

б) дополнительная литература:

1. Кручинин, Н.Ю. Метод функционала плотности. Ab initio молекулярная динамика: методические указания к лабораторным работам / Н.Ю. Кручинин. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2014. – 67 с. – ISBN 2227-8397. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/51558.html (дата обращения: 25.02.2020).

2. Давтян О.К. Квантовая химия. – М.: Высшая школа, 1962. – 782 с.

3. Цюлике Л. Квантовая химия. – М.: Мир, 1976. – 512 с.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. – Москва, 1999. – Режим доступа: http://elibrary.ru/defaultx.asp (дата обращения: 21.10.2019). – Яз. рус., англ.

2. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения обо всех видах литературы, поступающих в фонд НБ ДГУ / Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: http://elib.dgu.ru, свободный (дата обращения: 21.10.2019).

3. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: http://www.iprbookshop.ru/31168.html (дата обращения: 21.10.2019).

10. Методические указания для обучающихся студентов по освоению дисциплины

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д.

Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- глоссарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций;
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторные занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- литературный поиск, используя онлайн поисковую систему NIST/TRC;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине «Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии» используются следующие информационные технологии:

- занятия компьютерного тестирования;
- демонстрационный материал применением проектора;
- компьютерные программы для статистической обработки результатов анализа;
- программы пакета Microsoft Office.

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

В соответствии с требованиями ФГОС ВО кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных занятий, которая укомплектована техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком). Имеются лаборатории с необходимым оборудованием и реактивами.