

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева» (НГТУ)

Образовательно-научный институт физико-химических технологий и
материаловедения (ИФХТиМ)

УТВЕРЖДАЮ:

Директор института:

Мацулевич Ж.В.

“08” июня 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.3.2 Квантовые основы органической химии
для подготовки бакалавров

Направление подготовки: 11.03.01 Электроника и наноэлектроника

Направленность: Нанотехнологии в электронике

Форма обучения: очная

Год начала подготовки: 2021

Выпускающая кафедра: НТиБТ

Кафедра-разработчик: ТЭПиХОВ

Объем дисциплины: 144/4
часов/з.е

Промежуточная аттестация: экзамен (2 семестр)

Разработчик: Гринвальд И.И., д.х.н., профессор

Нижний Новгород
2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО 3++) по направлению подготовки 11.03.01 Электроника и наноэлектроника, утвержденного приказом МИНОБРНАУКИ РОССИИ от 19.09.2017 г. № 927 на основании учебного плана принятого УМС НГТУ, протокол от 17.06.2021 №8

Рабочая программа принята на заседании кафедры «Технология электрохимических производств и химии органических веществ»

Протокол заседания от «03» июня 2021 г. №7

Зав. кафедрой к.т.н., доцент, Ивашкин Е.Г. _____

Рабочая программа утверждена на заседании Учебно-методического совета института физико-химических технологий и материаловедения

Протокол заседания от «08» июня 2021 г. №1

Рабочая программа зарегистрирована в УМУ, регистрационный №11.03.04-Н-43.

Начальник МО _____

Заведующая отделом комплектования НТБ

Н.И. Кабанина

(подпись)

Оглавление

ОГЛАВЛЕНИЕ	3
1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	4
1.1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	4
1.2. ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	4
2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ	4
3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	4
4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ.....	8
4.1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТРУДОЁМКОСТИ ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВИДАМ РАБОТ ПО СЕМЕСТРАМ	8
4.2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ	9
5. ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	17
6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ	19
6.1. УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА, ПЕЧАТНЫЕ ИЗДАНИЯ БИБЛИОТЕЧНОГО ФОНДА	19
6.2. СПРАВОЧНО-БИБЛИОГРАФИЧЕСКАЯ ЛИТЕРАТУРА	20
6.3. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ, РЕКОМЕНДАЦИИ И ДРУГИЕ МАТЕРИАЛЫ К ЗАНЯТИЯМ	21
7. ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ.....	21
7.1. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	21
7.2. ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ	22
8. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ РЕСУРСЫ ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОВЗ	22
9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ, НЕОБХОДИМОЕ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ	22
10. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ОБУЧАЮЩИМСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ..	22
10.1. ОБЩИЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ, ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ	22
10.2. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ЗАНЯТИЙ ЛЕКЦИОННОГО ТИПА	23
10.3. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ НА ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТАХ	24
10.4. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЕ ОБУЧАЮЩИХСЯ.....	24
11. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	24
11.1. ТИПОВЫЕ ВОПРОСЫ ДЛЯ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ	24
11.2. ТИПОВЫЕ ВОПРОСЫ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ В ФОРМЕ ЭКЗАМЕНА	24
11.3. ТИПОВЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ	24

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целью освоения дисциплины являются формирование у студентов общего научного мировоззрения, цельного представления о процессах и явлениях, происходящих в неживой и живой природе, научного способа мышления, умения видеть естественнонаучное содержание проблем, возникающих в практической деятельности специалиста, а также развитие химического мышления.

1.2. Задачи освоения дисциплины (модуля):

- изучение законов окружающего мира в их взаимосвязи;
- ознакомление студентов с историей и логикой развития квантовых основ органической химии и основных её открытий
- освоение основных теорий органической квантовой химии, позволяющих описать явления в природе, и пределов применимости этих теорий для решения современных и перспективных технологических задач;
- формирование у студентов основ естественнонаучной картины мира;
- формирование навыков по применению положений фундаментальных квантовых основ органической химии к грамотному научному анализу ситуаций, с которыми инженеру приходится сталкиваться при создании новой техники и новых технологий;
- овладение фундаментальными принципами и методами решения научно-технических задач;

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Учебная дисциплина «Квантовые основы органической химии» включена в обязательный перечень дисциплин вариативной части образовательной программы направленности (профиля) «Нанотехнологии в электронике», «Микроэлектроника и твердотельная электроника»

Дисциплина реализуется в соответствии с требованиями ФГОС, ОП ВО и УП, по данному направлению подготовки.

Дисциплина базируется на следующих дисциплинах: «Химия» и «Основы физических явлений» в объеме курса средней школы.

Полученные знания необходимы для изучения предметов по профилям подготовки «Нанотехнологии в электронике» и «Микроэлектроника и твердотельная электроника»: «Физическая химия материалов и структур наноэлектроники», «Физико-химические процессы и аппараты производства ИЭТ», «Физическая химия».

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1. Процесс изучения дисциплины (модуля) направлен на формирование элементов следующих общепрофессиональных компетенций в соответствии с ОП ВО по специальности: 11.03.04 Электроника и наноэлектроника.

ПКС-1 - Способен решать типовые задачи в технологических процессах производства электронной техники.

Формирование указанных компетенций размещено в таблице 1.

Таблица 1 – Формирование компетенций дисциплинами

Наименование дисциплин, формирующих компетенцию совместно	Семестры формирования дисциплины							
	1	2	3	4	5	6	7	8
ПКС-1								
<i>Методы математической физики</i>								
<i>Теория поля</i>								
<i>Квантовая механика и статистическая физика</i>								
<i>Квантовая и оптическая электроника</i>								
<i>Нанотехнологии в электронике</i>								
<i>Наноэлектроника</i>								
<i>Физическая химия</i>								
<i>Метрология, стандартизация и технические измерения</i>								
<i>Физическая химия материалов и структур наноэлектроники</i>								
<i>Физико-химические процессы и аппараты производства ИЭТ</i>								
<i>Компоненты наноэлектронники</i>								
<i>Специальные вопросы физической химии</i>								

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОП

Таблица 2 – Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства			
			Текущего контроля	Промежуточной аттестации		
Тип профессиональной деятельности – научно-исследовательский						
Трудовая функция: А/02.5 (ПС 40.058)						
ПКС-1 Способен решать типовые задачи в технологических процессах производства электронной техники	ИПКС-1.1. Использует знания основ фундаментальных разделов химии для решения задач в области производства электроники	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основные задачи и методы квантовой теории в органической химии; - свойства органических соединений, с точки зрения квантовой теории строения и реакционной способности органических соединений; - основы системного подхода для описания механизмов процессов органического синтеза для получения материалов наноэлектроники на основе квантовой теории строения молекул; - основы определения целей научного исследования методами квантовой химии, основы методологии описания целей и результатов деятельности в научной сфере. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять современные теоретические концепции квантовой теории для прогнозирования и объяснения схем протекания основных типов химических реакций; - применять квантовую теорию строения органических соединений для моделирования общих принципов получения материалов с заданными свойствами; - пользоваться литературой и справочниками по квантовой теории в органической химии. 	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять современные теоретические концепции квантовой теории для прогнозирования и объяснения схем протекания основных типов химических реакций; - применять квантовую теорию строения органических соединений для моделирования общих принципов получения материалов с заданными свойствами; - пользоваться литературой и справочниками по квантовой теории в органической химии. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - способностью описания особенностей строения, свойств и способов получения органических материалов, использующихся в электронике и наноэлектронике методами современной квантовой химии; - способностью определять связь между строением органических соединений и их свойствами на основе квантовой теории строения органических соединений. 	<p>Контрольные работы</p> <p>Экзаменационные задачи</p>		

		моделирования общих принципов получения материалов с заданными свойствами; - пользоваться литературой и справочниками по квантовой теории в органической химии.				
--	--	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--	--	--	--

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ по семестрам

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зач. ед. 144 часа, распределение часов по видам работ и семестрам представлено в таблице 3.

Таблица 3 – Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ по семестрам

Вид учебной работы	Трудоёмкость	
	Всего час.	В т.ч. по семестрам
		2 сем
Формат изучения дисциплины		очная
Общая трудоёмкость дисциплины по учебному плану	144	144
1. Контактная работа:	57	57
1.1. Аудиторная работа, в том числе:		
занятия лекционного типа (Л)	34	34
занятия семинарского типа (ПЗ-семинары, практ. занятия и др)		
лабораторные работы (ЛР)	17	17
Контроль (КСР)		
1.2. Внеаудиторная, в том числе	6	6
курсовая работа (проект) (КР/КП) (консультация, защита)		
текущий контроль, консультации по дисциплине	6	6
контактная работа на промежуточном контроле (КРА)		
2. Самостоятельная работа (СРС)	51	51
реферат/эссе (подготовка)		
расчётно-графическая работа (РГР) (подготовка)		
контрольная работа		
курсовая работа/проект (КР/КП) (подготовка)		
самостоятельное изучение разделов, самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий, подготовка к лабораторным и практическим занятиям, коллоквиум и т.д.)	51	51
Подготовка к экзамену (контроль)	36	36

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Таблица 4 – Содержание дисциплины, структурированное по темам

Планируемые (контролируемые) результаты освоения: код УК; ОПК; ПК и индикаторы достижения компетенций	Наименование разделов, тем	Виды учебной работы (час)				Вид СРС	Наименование используемых активных и интерактивных образовательных технологий	Наименование разработанного Электронного курса (трудоемкость в часах)	
		Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа студентов (час)				
2 семестр									
ПКС-1 ИПКС-1.1	Раздел 1. Основные понятия квантовой механики								
	Тема 1.1. Постулаты квантовой механики.	1,5				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	1. Диагностический безоценочный контроль, взаимоконтроль;	Конспект лекций	
	Тема 1.2. Волновая функция. Операторы. Собственные функции и собственные значения оператора.	0,5				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	2. Разноуровневые качественные задания по основным теориям и закономерностям;		
	Тема 1.3. Операторы физических величин.	1,5				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	3. Блиц-опрос по основным понятиям;		
	Тема 1.4. Уравнение Шредингера. Неравенство Гейзенберга.	0,5				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	4. Работа с систематизирующими, обобщающими таблицами, логическими схемами.		
	Тема 1.5. Представление волновых функций и операторов в матричной форме. Оператор момента количества движения.	1				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]			

	Тема 1.6. Собственные функции и собственные значения оператора момента импульса. Сложение моментов.	1,0				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	<p>При изучении нового материала-слайд показ. Совместно с натурным экспериментом создают единую активную познавательную среду, в которой преподаватель серией умело подобранных вопросов и заданий направляет мысль обучающихся к новым теоретическим выводам. Далее в ходе закрепления уточняет, корректирует понимание учащимися нового знания.</p> <p>В ходе объяснения и закрепления нового материала материалы должны быть разнообразными, чтобы охватить все моменты познания: алгоритм поиска решения поставленной проблемы, оценивание альтернатив, обнаружение следствий и их значимости в теории.</p>
	Лабораторная работа 1 по теме 1.1-1.6		3,0			Подготовка к практическим занятиям [6.1.3], [6.2.5], [6.2.6]	
	Тема 1.7. Собственные функции и собственные значения оператора момента импульса. Сложение моментов.	1,5				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
	Тема 1.8. Построение собственных функций операторов. Спиновые функции. Сложение орбитальных и спиновых моментов электрона.	0,5				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
	Лабораторная работа 2 по теме 1.7-1.8.		2,0			Подготовка к практическим занятиям [6.1.3], [6.2.5], [6.2.6]	
	Самостоятельная работа по освоению 1 раздела: реферат, эссе (тема)				12,0		
	расчёто-графическая работа (РГР)						
	контрольная работа						
	Итого по 1 разделу	8,0	5,0		12,0		
	Раздел 2. Математический аппарат квантовой механики.						
	Тема 2.1 Движение в центральном поле. Атом водорода. Приближенные методы квантовой механики.	2,0				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	

	Нестационарная теория возмущений. Молекулярная симметрия и теория групп.					
	Тема 2.3. Приводимые и неприводимые представления. Теорема Вигнера-Эккарта. Группа перестановок и спиновые функции. Общие свойства волновых функций многоэлектронных систем. Симметрия многоэлектронных систем.	2,0			Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
	Самостоятельная работа по освоению 2 раздела:			9,0	Подготовка к лабораторным работам [6.3.2]	
	реферат, эссе (тема)					
	расчёто-графическая работа (РГР)					
	контрольная работа					
	Итого по 2 разделу	4,0		9,0		
	Раздел 3. Неэмпирические методы расчетов электронных характеристик органических молекул.					
	Тема 3.1. Метод Хартри-Фока. Выражения для полной энергии. Канонические уравнения Хартри-Фока. Теорема Бриллюена. Уравнение Хартри-Фока для пространственных орбиталей.	2,0			Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
	Тема 3.2. Ограниченный метод Хартри-Фока для замкнутых оболочек. Неограниченный метод Хартри-Фока. Ограниченный метод Хартри-Фока для открытых оболочек. Теорема Купменса. Методы решения уравнения	2,0			Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	

Хартри-Фока. Метод Рутана. Базисные функции. Эффективные потенциалы остова.						
Лабораторная работа 3 по теме 3.1 и теме 3.2.		3,0			Подготовка к практическим занятиям [6.1.3], [6.2.3], [6.2.5]	
Тема 3.3. Метод конфигурационного взаимодействия. Многоконфигурационные методы самосогласованного поля. Метод связанных кластеров. Метод многочастичной теории возмущений. Общий подход к неэмпирическим расчетам электронных характеристик органических молекул.	2,0					
Тема 3.4. Общая характеристика метода функционала плотности. Метод Кара-Паринелло.	2,0					
Лабораторная работа 4 по теме 3.3 и теме 3.4.		3,0			Подготовка к практическим занятиям [6.1.3], [6.2.3], [6.2.5]	
Тема 3.5. Химические концепции в теории функционала плотности. Программный комплекс Гауссиан.	2,0					
Самостоятельная работа по освоению 3 раздела: реферат, эссе (тема)				11,0		
расчётно-графическая работа						

контрольная работа						
Итого по 3 разделу	10,0	6.0		11,0		
Раздел 4. Полуэмпирические методы расчетов электронных характеристик органических молекул.						
Тема 4.1. Метод Хюкеля. Расширенный метод Хюкеля-Гофмана. Метод CNDO. Метод INDO. Метод MINDO/3.	2,0				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
Лабораторная работа 5 по теме 4.2 – 4.3.		3,0			Подготовка к практическим занятиям [6.1.3], [6.2.1], [6.2.5]	
Тема 4.2. Полуэмпирические методы расчетов соединений переходных металлов и радикалов.	2,0				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
Тема 4.3. Расчеты параметров межмолекулярного взаимодействия. Водородная связь. .	2,0				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
Лабораторная работа 6 по теме 4.2 – 4.3.		3,0			Подготовка к практическим занятиям [6.1.3], [6.2.1], [6.2.5]	
Самостоятельная работа по освоению 4 раздела: реферат, эссе (тема)				11,0		
расчёто-графическая работа						
(РГР)						
контрольная работа						

Итого по 4 разделу	6,0	6,0		11,0		
Раздел 5. Основы квантовой химии в реакциях органических молекул.						
Тема 5.1. Гамильтониан системы молекул. Поверхность потенциальной энергии и ее особые точки. Пересечение поверхностей потенциальной энергии.	2,0				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
Тема 5.2. Методы нахождения особых точек и конических пересечений. Пути реакций.	2,0				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
Тема 5.3. Расчет реакций с переносом электронов. Расчет реакций с трансформацией молекулярной конфигурации.	2,0				Подготовка к лекциям [6.1.1], [6.1.2], [6.1.4]	
Самостоятельная работа по освоению 5 раздела:				8,0		
реферат, эссе (тема)						
расчёто-графическая работа (РГР)						
контрольная работа						
Итого по 5 разделу	6,0			8,0		
ИТОГО ЗА 2 СЕМЕСТР	34,0	17,0		51,0		
ИТОГО по дисциплине	34,0	17,0		51,0		

5. ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ.

Для осуществления текущего контроля знаний обучающихся сформулированы теоретические вопросы по темам лабораторных работ.

Также сформирован перечень вопросов, выносимых на промежуточную аттестацию в форме экзамена во 2 семестре.

Указанный комплект оценочных средств является неотъемлемой частью фонда оценочных средств и хранится на кафедре «Технология электрохимических производств и химия органических веществ».

Описание показателей и критериев контроля успеваемости, описание шкал оценивания при текущем контроле (контрольные недели) и оценка выполнения лабораторных работ приведено в таблице 5.

Таблица 5 – Описание показателей и критериев контроля успеваемости, описание шкал оценивания при текущем контроле (контрольные недели) и лабораторных работ

Наименование компетенций и дисциплин, формирующих компетенцию совместно	Шкала оценивания	Контрольная неделя	Экзамен
ПКС-1	$40 < R \leq 50$	Отлично	Отлично
Методы математической физики	$30 < R \leq 40$	Хорошо	Хорошо
Теория поля	$20 < R \leq 30$	Удовлетворительно	Удовлетворительно
Квантовая механика и статистическая физика	$0 < R \leq 20$	Неудовлетворительно	Неудовлетворительно
Квантовая и оптическая электроника			
Нанотехнологии в электронике			
Наноэлектроника			
Физическая химия			
Метрология, стандартизация и технические измерения			
Физическая химия материалов и структур наноэлектроники			
Физико-химические процессы и аппараты производств ИЭТ			
Компоненты наноэлектроники			
Специальные вопросы физической химии			

При промежуточном контроле успеваемость студентов оценивается по четырехбалльной системе «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Таблица 6 – Критерии оценивания результата обучения по дисциплине и шкала оценивания

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Критерии оценивания результатов обучения			
		Оценка «неудовлетворительно» / «не зачтено» 0-59% от max рейтинговой оценки контроля	Оценка «удовлетворительно» / «зачтено» 60-74% от max рейтинговой оценки контроля	Оценка «хорошо» / «зачтено» 75-89% от max рейтинговой оценки контроля	Оценка «отлично» / «зачтено» 90-100% от max рейтинговой оценки контроля
ПКС-1 Способен решать типовые задачи в технологических процессах производства электронной техники	ИПКС-1.1. Использует знания основ фундаментальных разделов химии для решения задач в области производства электроники	Не знаком с механизмами химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов.	Слабо знаком с механизмами химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов.	Хорошо знаком с механизмами химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов.	Владеет механизмами химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов.

Таблица 7 – Критерии оценивания

Оценка	Критерии оценивания
Высокий уровень «5» (отлично)	оценку « отлично » заслуживает студент, освоивший знания, умения, компетенции и теоретический материал без пробелов; выполнивший все задания, предусмотренные учебным планом на высоком качественном уровне; практические навыки профессионального применения освоенных знаний сформированы.
Средний уровень «4» (хорошо)	оценку « хорошо » заслуживает студент, практически полностью освоивший знания, умения, компетенции и теоретический материал, учебные задания не оценены максимальным числом баллов, в основном сформировал практические навыки.
Пороговый уровень «3» (удовлетворительно)	оценку « удовлетворительно » заслуживает студент, частично с пробелами освоивший знания, умения, компетенции и теоретический материал, многие учебные задания либо не выполнил, либо они оценены числом баллов близким к минимальному, некоторые практические навыки не сформированы.
Минимальный уровень «2» (неудовлетворительно)	оценку « неудовлетворительно » заслуживает студент, не освоивший знания, умения, компетенции и теоретический материал, учебные задания не выполнил, практические навыки не сформированы.

6.УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Учебная литература, печатные издания библиотечного фонда, электронные издания.

Библиотечный фонд укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 0,25 экземпляра каждого из изданий, указанных ниже на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих соответствующую дисциплину (модуль). Издания, находящиеся в электронном доступе (электронный ресурс), удовлетворяют этому требованию автоматически. Электронный доступ приведен в виде ссылок после обычного описания издания.

№ п/п	Автор(ы)	Заглавие	Издательство , год издания	Назначение, вид издания, гриф	Кол-во экз. в биб-лиотеке
6.1.1.	Р. Г. Назмитдинов, С. А. Новикова	Квантовая механика и квантовая химия	Дубна : Государственный университет «Дубна», 2021. — 123 с.	Учебное пособие для ВУЗов. https://e.lanbook.com/book/196986 (дата обращения: 21.02.2022). — Режим	Электронный ресурс библиотеки НГТУ (https://e.lanbook.ru) Лань : электронно-библиотечная система

				доступа: для авторизованных пользователей.	
6.1.2.	Бурмистрова, Н. А.	Квантовая механика и квантовая химия	Саратов : СГУ, 2020. — 68 с	Учебное пособие https://e.lanbook.com/book/170586 (дата обращения: 21.02.2022). — Режим доступа: для авторизованных пользователей)	[Электронный ресурс библиотеки НГТУ] (https://e.lanbook.ru/) Лань : электронно-библиотечная система.
6.1.3.	В. И.Крашенинин Л. В. Кузьмина, Е. Г. Газенгаур.	Квантовая химия	Кемерово : КемГУ, 2019. — 82 с.	Учебное пособие https://e.lanbook.com/book/135217 (дата обращения: 21.02.2022). — Режим доступа: для авторизованных пользователей	[Электронный ресурс библиотеки НГТУ] (https://e.lanbook.ru/) Лань : электронно-библиотечная система.
6.1.4.	Барановский, В.И.	Квантовая механика и квантовая химия	Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 428 с	Учебное пособие. https://e.lanbook.com/book/113631 (дата обращения: 21.02.2022). — Режим доступа: для авторизованных пользователей.	[Электронный ресурс библиотеки НГТУ] (https://e.lanbook.ru/) Лань : электронно-библиотечная система.

6.2. Справочно-библиографическая литература.

№ п/п	Автор(ы)	Заглавие	Издательство, год издания	Назначение, вид издания, гриф	Кол-во экз. в библиотеке
6.2.1.	Ширяев, А. К.	Квантовая механика и квантовая химия	Самара : АСИ СамГТУ, 2017. — 119 с.	Учебное пособие. https://e.lanbook.com/book/127839 (дата обращения: 21.02.2022). — Режим доступа: для авторизованных пользователей.	[Электронный ресурс библиотеки НГТУ] (https://e.lanbook.ru/) Лань : электронно-

					библиотечная система
6.2.2.	Валиев Р. Р.	Квантовая химия в спектроскопии	Томск : ТГУ, 2018. — 144 с.	Текст : электронный https://e.lanbook.com /book/112895 (дата обращения: 21.02.2022). — Режим доступа: для авторизованных пользователей.	[Электронный ресурс библиотеки НГТУ] (https://e.lanbook.ru/) Лань : электронно-библиотечная система

6.3. Методические указания, рекомендации и другие материалы к занятиям

Рекомендации по проведению конкретных видов учебных занятий по дисциплине «Квантовые основы органической химии» находятся на кафедре «ТЭП и ХОВ».

7.ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебный процесс по дисциплине обеспечен необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства (состав по дисциплине определен в настоящей РПД и подлежит обновлению при необходимости).

7.1. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. Научная электронная библиотека E-LIBRARY.ru. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>
2. Электронный ресурс библиотеки НГТУ (<https://e.lanbook.ru/>)Лань : электронно-библиотечная система. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://elib.tolgas.ru/> - Загл. с экрана.
3. Электронно-библиотечная система Znaniум.com [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://znanium.com/>. – Загл. с экрана.
4. Открытое образование [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <https://openedu.ru/>. - Загл с экрана.
5. Polpred.com. Обзор СМИ. Полнотекстовая, многоотраслевая база данных (БД) [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://polpred.com/>. – Загл. с экрана.
6. Базы данных Всероссийского института научной и технической информации (ВИНИТИ РАН) по естественным, точным и техническим наукам [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.viniti.ru>. – Загл. с экрана.
7. Университетская информационная система Россия [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://uisrussia.msu.ru/>. – Загл. с экрана.

7.2. Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Таблица 8 – Перечень электронных библиотечных систем

№	Наименование ЭБС	Ссылка, по которой осуществляется доступ к ЭБС
1	Консультант студента	http://www.studentlibrary.ru/
2	Лань	https://e.lanbook.com/
3	Юрайт	https://biblio-online.ru/

В таблице 9 указан перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ (удаленный доступ). Данный перечень подлежит обновлению в соответствии с требованиями ФГОС ВО.

Таблица 9 – Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

№	Наименование профессиональной базы данных, информационно-справочной системы	Доступ к ресурсу (удаленный доступ с указанием ссылки/доступ из локальной сети университета)
1	2	3
1	База данных стандартов и регламентов РОССТАНДАРТ	https://www.gost.ru/portal/gost//home/standarts
2	Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем	https://cyberpedia.su/21x47c0.html

8. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ РЕСУРСЫ ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОВЗ

В таблице 10 указан перечень образовательных ресурсов, имеющих формы, адаптированные к ограничениям их здоровья, а также сведения о наличии специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования. При заполнении таблицы может быть использована информация, размещенная в подразделе «Доступная среда» специализированного раздела сайта НГТУ «Сведения об образовательной организации» <https://www.nntu.ru/sveden/accenv/>

Таблица 10 – Образовательные ресурсы для инвалидов и лиц с ОВЗ

№	Перечень образовательных ресурсов, приспособленных для использования инвалидами и лицами с ОВЗ	Сведения о наличии специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования
1	ЭБС «Консультант студента»	озвучка книг и увеличение шрифта
2	ЭБС «Лань»	специальное мобильное приложение - синтезатор речи, который воспроизводит тексты книг и меню навигации
3	ЭБС «Юрайт»	версия для слабовидящих

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ, НЕОБХОДИМОЕ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Для контактной и самостоятельной работы обучающихся выделены помещения, оснащённые компьютерной техникой с подключением к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации:

- зал электронно-информационных ресурсов (ауд. 1160 – компьютерный класс для проведения занятий лабораторного и практического типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, для самостоятельной работы студентов);

Для проведения лекционных демонстраций имеется демонстрационный кабинет 1345, оснащённый необходимым демонстрационным оборудованием.

Лабораторные работы проводятся в 1 корпусе в ауд. 1222 оснащённой необходимым оборудованием.

10. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ОБУЧАЮЩИМСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

10.1. Общие методические рекомендации для обучающихся по освоению дисциплины, образовательные технологии

Дисциплина реализуется посредством проведения контактной работы с обучающимися (включая проведение текущего контроля успеваемости), самостоятельной работы обучающихся и промежуточной аттестации.

Контактная работа: аудиторная, внеаудиторная.

При преподавании дисциплины «Органическая химия», используются современные образовательные технологии, позволяющие повысить активность студентов при освоении материала курса и предоставить им возможность эффективно реализовать часы самостоятельной работы.

Для студентов создан краткий опорный электронный вариант лекционного материала курса. Электронный конспект находится на кафедре «ТЭП и ХОВ» и может быть получен студентом в случае пропусков занятий по уважительным причинам или вынужденного перевода занятий в дистанционную форму.

На лекциях, практических и лабораторных занятиях реализуются интерактивные технологии, приветствуются вопросы и обсуждения, используется личностно-ориентированный подход, технология работы в малых группах, что позволяет студентам проявить себя, получить навыки самостоятельного изучения материала, выровнять уровень знаний в группе.

Все вопросы, возникшие при самостоятельной работе над домашним заданием, подробно разбираются на лабораторных занятиях, практических занятиях и лекциях. Проводятся индивидуальные и групповые консультации с использованием, как встреч с студентами, так и современных информационных технологий: чат, электронная почта, Skype, Zoom.

Инициируется активность студентов, поощряется задание любых вопросов по материалу, практикуется индивидуальный ответ на вопросы студента, рекомендуются методы успешного самостоятельного усвоения материала в зависимости от уровня его базовой подготовки.

Для оценки знаний, умений, навыков и уровня сформированности компетенций применяется балльно-рейтинговая система контроля и оценки успеваемости студентов в процессе текущего контроля.

Промежуточная аттестация проводится в форме экзамена с учетом текущей успеваемости.

10.2. Методические указания для занятий лекционного типа

Лекционный курс предполагает систематизированное изложение основных вопросов тематического плана. В ходе лекционных занятий раскрываются базовые вопросы в рамках каждой темы дисциплины (Таблица 4). Обозначаются ключевые аспекты тем, а также делаются акценты на наиболее сложные и важные положения изучаемого материала. Материалы лекций являются опорной основой для подготовки обучающихся к практическим занятиям / лабораторным работам и выполнения заданий самостоятельной работы, а также к мероприятиям текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.3. Методические указания по освоению дисциплины на лабораторных работах

Подготовку к каждой лабораторной работе студент должен начать с ознакомления с планом занятия, который отражает содержание предложенной темы. Каждая выполненная работа с оформленным отчетом подлежит защите у преподавателя.

При оценивании лабораторных работ учитывается следующее:

- качество выполнения экспериментально-практической части работы и степень соответствия результатов работы заданным требованиям;
- качество оформления отчета по работе;
- качество устных ответов на контрольные вопросы при защите работы.

10.4. Методические указания по самостоятельной работе обучающихся

Самостоятельная работа обеспечивает подготовку обучающегося к аудиторным занятиям и мероприятиям текущего контроля и промежуточной аттестации по изучаемой дисциплине. Результаты этой подготовки проявляются в активности обучающегося на занятиях и в качестве выполненных практических заданий и других форм текущего контроля.

При выполнении заданий для самостоятельной работы рекомендуется проработка материалов лекций по каждой пройденной теме, а также изучение рекомендуемой литературы, представленной в Разделе 6.

В процессе самостоятельной работы при изучении дисциплины студенты могут работать на компьютере в специализированных аудиториях для самостоятельной работы (указано в разделе 9). В аудиториях имеется доступ через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет» к электронной информационно-образовательной среде университета (ЭИОС) и электронной библиотечной системе (ЭБС), где в электронном виде располагаются учебные и учебно-методические материалы, которые

могут быть использованы для самостоятельной работы при изучении дисциплины.

Рекомендации по всем видам работы студента находятся на кафедре «ТЭП и ХОВ».

11. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Для текущего контроля знаний студентов по дисциплине проводится **комплексная оценка знаний**, включающая

- теоретический опрос и защита отчетов по лабораторным работам;
- экзамен.

11.1. Типовые вопросы для лабораторных работ

Контрольные вопросы для лабораторных работ приведены в Рекомендациях по проведению лабораторных работ.

11.2. Типовые вопросы для промежуточной аттестации в форме экзамена

1. Постулаты квантовой механики. Волновая функция. Операторы.
2. Собственные функции и собственные значения оператора. Операторы физических величин.
3. Уравнение Шредингера. Неравенство Гейзенберга.
4. Представление волновых функций и операторов в матричной форме. Оператор момента количества движения.
5. Собственные функции и собственные значения оператора момента импульса. Сложение моментов.
6. Построение собственных функций операторов. Спиновые функции. Сложение орбитальных и спиновых моментов электрона.
7. Движение в центральном поле. Атом водорода.
8. Приближенные методы квантовой механики.
9. Нестационарная теория возмущений.
10. Молекулярная симметрия и теория групп.
11. Приводимые и неприводимые представления. Теорема Вигнера-Эккарта.
12. Группа перестановок и спиновые функции.
13. Общие свойства волновых функций многоэлектронных систем.
14. Симметрия многоэлектронных систем.
15. Метод Хартри-Фока. Выражения для полной энергии. Канонические уравнения Хартри-Фока. Теорема Бриллюена.
16. Уравнение Хартри-Фока для пространственных орбиталей. Ограниченный метод Хартри-Фока для замкнутых оболочек.
17. Неограниченный метод Хартри-Фока.
18. Ограниченный метод Хартри-Фока для открытых оболочек. Теорема Купменса.
19. Методы решения уравнения Хартри-Фока.
20. Метод Рутана. Базисные функции. Эффективные потенциалы остова.

21. Матрицы плотности. Анализ заселенности.
22. Метод конфигурационного взаимодействия.
23. Многоконфигурационные методы самосогласованного поля. Метод связанных кластеров.
24. Метод многочастичной теории возмущений.
25. Общий подход к неэмпирическим расчетам электронных характеристик органических молекул.
26. Общая характеристика метода функционала плотности. Метод Кара-Паринелло.
27. Химические концепции в теории функционала плотности.
28. Метод Хюккеля. Расширенный метод Хюккеля-Гофмана. Метод CND0. Метод INDO. Метод MINDO/3.
29. Гамильтониан системы молекул. Поверхность потенциальной энергии и ее особые точки. Пересечение поверхностей потенциальной энергии.
30. Методы нахождения особых точек и конических пересечений. Пути реакций.
31. Расчет реакций с переносом электронов. Расчет реакций с трансформацией молекулярной конфигурации.

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института ИФХТИМ
Мацулевич Ж.В.
“ ____ ” 20__ г.

Лист актуализации рабочей программы дисциплины
Б1.В.ДВ.3.2 Квантовые основы органической химии
индекс по учебному плану, наименование

для подготовки бакалавров

Направление: 11.03.04 Электроника и наноэлектроника

Направленность: Нанотехнологии в электронике

Форма обучения очная

Год начала подготовки: 2021

Курс 1

Семестр 2

а) В рабочую программу не вносятся изменения. Программа актуализирована для 20__ г. начала подготовки.

б) В рабочую программу вносятся следующие изменения (указать на какой год начала подготовки):

- 1);
- 2);
- 3)

Разработчик (и): Гринвальд И.И., д.х.н.,
(ФИО, ученая степень, ученое звание)

«__» 2021_г.

Рабочая программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры ТЭП и ХОВ
_____ протокол № _____ от «__»
_____ 2021_г.

Заведующий кафедрой Ивашкин Г.Е.

Лист актуализации принят на хранение:

И.О. Заведующего выпускающей кафедрой НТ и БТ Калинина А.А. «__» _____
2021_г.

Методический отдел УМУ: _____ «__» _____