

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОПОП

Д.В. Старов

«4» апреля 2024 г.

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой технологий
материалов и промышленной инженерии
Е.Ю. Степанович

«4» апреля 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Основы квантово-механических методов анализа структуры»

Составитель(-и)

Степанович Е.Ю. доцент кафедры ТМПИ, к.ф.-
м.н., доцент

Согласовано с работодателями

Язев Б.Б., Генеральный директор ООО СК
«Квадро Айти»;

Кутузов Д.В., доцент кафедры «Связь» АГТУ;

Направление подготовки /
специальность

11.03.04 Электроника и нанoeлектроника

Направленность (профиль) ОПОП

**Инжиниринг аналоговых и цифровых сложно-
функциональных систем
бакалавриат**

Квалификация (степень)

Форма обучения

очная

Год приема

2024

Курс

2

Семестр(ы)

3

Астрахань-2024 г.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1.1. Целями освоения дисциплины (модуля) изучение студентами основ квантовой механики в приложении к решению химических задач, а также теоретических и расчетных методов квантовой химии. Основное внимание уделяется не математическому аппарату, а расшифровке физического смысла понятий квантовой механики и квантовой химии и практическому овладению расчетными методами квантовой химии.

1.2. Задачи освоения дисциплины (модуля): освоение знаний о фундаментальных физических законах и принципах, лежащих в основе современной квантовой химии; наиболее важных открытиях в области квантовой химии, оказавших определяющее влияние на развитие техники и технологии; овладение умениями выдвигать гипотезы и строить модели, применять полученные знания для объяснения разнообразных химических и физических явлений и свойств веществ; развитие познавательных интересов, интеллектуальных и творческих способностей в процессе приобретения знаний и умений.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина (модуль) относится к Вариативной части (элективные дисциплины) и осваивается в 3-ом семестре.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины (модуля) необходимы следующие знания, умения, навыки, формируемые предшествующими учебными дисциплинами (модулями):

- Физика конденсированного состояния
- Информатика

Знания:

- основные варианты использования компьютерных технологий в научных исследованиях;
- основные направления использования компьютерных технологий в образовании;
- основные методы работы с сетью Интернет;

Умения:

- использовать компьютер в научных методах исследования
- пользоваться международной сетью Интернет;
- использовать современные компьютерные технологии

Навыки:

- иметь навыки построения и расчета физических моделей, навыки анализа экспериментальных данных.

2.3. Последующие учебные дисциплины (модули) и (или) практики, для которых необходимы знания, умения, навыки, формируемые данной учебной дисциплиной (модулем):

Научно-исследовательская практика.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВПО и ОП ВО по данному направлению подготовки:

в) профессиональных (ПК):

ПК-8 Способен осуществлять регламентную проверку технического состояния оборудования, его профилактический осмотр текущий ремонт

Таблица 1. Декомпозиция результатов обучения

Код компетенции	Код и наименование индикатора достижения	Планируемые результаты освоения дисциплины		
		Знать(1)	Уметь(2)	Владеть(3)
ПК-8	ПК-8 Способен осуществлять регламентную проверку технического состояния оборудования, его профилактический осмотр и текущий ремонт	ПК-8.1 Знает правила аттестации чистых производственных помещений	ПК-8.2 Умеет проводить аттестацию чистых производственных помещений.	ПК-8.3 Владеет навыками настройки объектов инфраструктуры чистых производственных помещений

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость дисциплины в соответствии с учебным планом составляет 5 зачетные единицы (180 часа).

Трудоемкость отдельных видов учебной работы студентов очной, очно-заочной и заочной форм обучения приведена в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Трудоемкость отдельных видов учебной работы по формам обучения

Вид учебной и внеучебной работы	для заочной формы обучения
Объем дисциплины в зачетных единицах	5
Объем дисциплины в академических часах	180
Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего), в том числе (час.):	54
- занятия лекционного типа, в том числе: - практическая подготовка (если предусмотрена)	18
	-

Вид учебной и внеучебной работы	для заочной формы обучения
- занятия семинарского типа (семинары, практические, лабораторные), в том числе: - практическая подготовка (если предусмотрена)	36
	-
- консультация (предэкзаменационная)	
- промежуточная аттестация по дисциплине	
Самостоятельная работа обучающихся (час.)	126
Форма промежуточной аттестации обучающегося (зачет/экзамен), семестр (ы)	Диф.зачет – 3 семестр.

Таблица 2.2. Структура и содержание дисциплины (модуля) «Физика»

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Контактная работа, час.						КР / КП	СР, час.	Итого часов	Форма текущего контроля успеваемо- сти, форма промежуточ- ной аттестации
	Л		ПЗ		ЛР					
	Л	в т.ч. ПП	ПЗ	в т.ч. ПП	ЛР	в т.ч. ПП				
Семестр 3.										
Тема 1. Виды движения в молекулах.	3		6					21	30	Опрос
Тема 2. Виды спектров и их информативность.	3		6					21	30	Опрос
Тема 3. Основы теории спектров комбинационного и резонансного комбинационного рассеяния света.	3		6					21	30	Тест
Тема 4. Программная реализация методов молекулярной механики.	3		6					21	30	Опрос
Тема 5. Квантово-механическое рассмотрение молекулярных систем.	3		6					21	30	Опрос
Тема 6. Основные понятия	3		6					21	30	Тест

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Контактная работа, час.						СР, час.	Итого часов	Форма текущего контроля успеваемост и, форма промежуточ ной аттестации	
	Л		ПЗ		ЛР					КР / КП
	Л	в т.ч. ПП	ПЗ	в т.ч. ПП	ЛР	в т.ч. ПП				
квантовой механики.										
Консультации										
Контроль промежуточной аттестации									Диф.зачет	
ИТОГО за семестр:	6				10			164	180	
ИТОГО за весь период:	6				10			164	180	

Таблица 3 Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины (модуля) и формируемых компетенций

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Кол-во часов	Код компетенции	Общее количество компетенций
		ПК-8	
Тема 1. Виды движения в молекулах.	30	+	1
Тема 2. Виды спектров и их информативность.	30	+	1
Тема 3. Основы теории спектров комбинационного и резонансного комбинационного рассеяния света.	30	+	1
Тема 4. Программная реализация методов молекулярной механики.	30	+	1
Тема 5. Квантово-механическое рассмотрение молекулярных систем.	30	+	1
Тема 6. Основные понятия квантовой механики.	30	+	1
Итого:	180		

Краткое содержание каждой темы дисциплины (модуля)

Тема 1. Программный пакет для построения молекул «Chemcraft».

- Отобразить 3-мерных изображений молекул по декартовым координатам атомов, с возможностью просмотра или модификации любого геометрического параметра в молекуле (расстояния, угла);

- Визуализировать расчетные файлы GAMESS и Gaussian, включая просмотр отдельных геометрий из файла (оптимизированная структура, геометрия отдельного шага оптимизации и др.), анимацию мод колебаний, графическое представление градиента энергии, визуализацию молекулярных орбиталей в виде изоповерхностей, отображение графика сходимости ССП и др.;

- Различные средства для конструирования молекул и модификации молекулярной геометрии: использование стандартного набора молекулярных фрагментов, "перетаскивание" атомов или фрагментов с помощью мыши, придание молекуле требуемой симметрии, и другие возможности;

- Получение качественных 32-битных изображений молекул в различных графических стилях, содержащих требуемые обозначения (надписи, линии и др.), которые легко экспортируются в Word или другой текстовый редактор;

- Вспомогательные утилиты для подготовки входных файлов: визуальное конструирование Z-матрицы, автоматическая генерация блоков для входных файлов GAMESS с нестандартными базисными наборами.

Тема 2. Программный пакет для построения молекул «GaussView».

- Просмотр/указание типов и зарядов ММ атомов
- Добавление/переопределение избыточных внутренних координат
- Указание замороженные атомы / координаты во время оптимизации
- Установление эквивалентности атомов для оптимизации TS QST2 / QST3
- Управление MOs: выбор, перестановка / повторное занятие орбиталей для CASSCF и т. Д.
- Определение фрагментов для вычисления предположения фрагмента / противовеса
- Создание входных файлов с помощью интерфейса, управляемого меню
- Создание поверхностей и контуров для молекулярных орбиталей, электронной плотности, электростатического потенциала, спиновой плотности, плотности экранирования ЯМР

Тема 3. Программный пакет «Gaussian09W».

- Расчет оптимальных геометрических параметров.
- Расчет характеристических частот в ИК и КР спектрах.
- Расчет энергий равновесных конфигураций многоатомных молекул.
- Анализ полученных данных.

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

5.1. Указания для преподавателей по организации и проведению учебных занятий по дисциплине (модулю)

Рассмотреть учебную литературу:

1. Исаченко В. П., Осипова В. А. Теплопередача. /Учебник для студентов энергетических вузов и факультетов. – М. –Л.: Энергия, 1965. – 419с.
2. Архаров А. М., Исаев С. Н. и др. Теплотехника. – М.: Машиностроение, 1986.
3. Краснощеков Е. А., Сукомел А. С. Задачник по теплопередаче. – М.: Энергия, 1975. – 280с
4. Болгарский А. В., Мухачев Г. А., Щукин В. Н. Термодинамика и теплопередача. - М., Высшая школа, 1975. – 495 с.
5. Нащокин В. В. Техническая термодинамика и теплопередача. - М.: Высшая школа, 198с. .

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины (модулю)

При реализации дисциплины используются следующие виды учебных занятий: лекции, консультации, практические занятия, контрольные работы, самостоятельные работы. В рамках лекционных занятий предусмотрены активные формы учебного процесса: разбор конкретных ситуаций, обсуждение наблюдаемых оптических явлений и эффектов, компьютерные демонстрации с использованием современных цифровых систем изобразительной техники. В рамках практических занятий предусмотрены: детальный разбор физических основ

основных разделов лекционного курса с решением физических задач по основным разделам содержания дисциплины.

- изучение теоретического материала по конспектам лекций и рекомендованным учебным пособиям, монографической учебной литературе;
 - самостоятельное изучение некоторых теоретических вопросов, выделенных в программе дисциплины, не рассмотренных на лекциях;
 - выполнение комплекса заданий теоретического характера, расчетных и графических по всем разделам дисциплины;
- предусмотрена еженедельная самостоятельная работа обучающихся по изучению теоретического лекционного материала; контроль выполнения этой работы предусмотрен на Практических занятиях по данной дисциплине;
- самостоятельное изучение некоторых теоретических вопросов, выделенных в программе дисциплины и не рассмотренных на лекциях предусматривается по мере изучения соответствующих разделов, в которых выделены эти вопросы для самостоятельного изучения; контроль выполнения этой самостоятельной работы предусмотрен в рамках промежуточного контроля – экзамена по данной дисциплине;
 - выполнение и письменное оформление комплекса заданий теоретического характера, расчетных и графических по основным разделам дисциплины предусмотрено еженедельно по мере формулировки этих заданий на лекциях; предусматривается письменное выполнение этой самостоятельной работы с текстовым, включая формулы, и графическим оформлением; контроль выполнения этой самостоятельной работы предусмотрен при завершении изучения дисциплины.

Ознакомится с литературой:

1. Ищенко, А.А. Дифракция электронов: структура и динамика свободных молекул и конденсированного состояния вещества / А.А. Ищенко, Г.В., Гиричев, Ю.И Тарасов – Из-во Физмалит, 2013. <https://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4>
2. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. - М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. - 224 с.: ил. - (Серия "Библиотека студентов"). <https://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4>
3. Аббасов, М. Применение инфракрасной спектроскопии к органическим и неорганическим соединениям / М. Аббасов, - Физика. Механика. Астрономия.- Из-во Русайн, 2022.- 465 стр. <https://book.ru/book/942879>
4. Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Учебно-методическое пособие. - Астрахань, Из-во ОГОУ ДПО «АИПКП», 2007.-68с
5. Серба П.В., Мирошниченко С.П., Блинов Ю.Ф. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ПРОГРАММЕ GAUSSIAN/ УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ, 2012

Таблица 4. Содержание самостоятельной работы обучающихся

<i>Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение</i>	<i>Кол-во часов</i>	<i>Форма работы</i>
Тема 1. Виды движения в молекулах.	21	Работа с источниками информации, изучение тем, выносимых на самостоятельное обсуждение
Тема 2. Виды спектров и их информативность.	21	
Тема 3. Основы теории спектров комбинационного и резонансного комбинационного рассеяния света.	21	
Тема 4. Программная реализация методов молекулярной механики.	21	
Тема 5. Квантово- механическое рассмотрение молекулярных систем.	21	

Тема 6. Основные понятия квантовой механики.	21	
--	----	--

5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины (модуля), выполняемые обучающимися самостоятельно

Программой не предусмотрено выполнение курсовой работы по дисциплине. Но по усмотрению преподавателя или по просьбе студента, студент для повышения своей оценки имеет право взять дополнительную письменную работу, выполняемую вне аудиторно. Работа может носить характер теста, доклада, реферата и т.д.

Критерии выставления оценок за названные работы сформулированы в ФОСах. Здесь приводятся требования к оформлению работы.

Общие требования оформления курсовой работы/доклада/реферата/контрольной работы

Доклад/реферат выполняется на листах писчей бумаги формата А-4 в Microsoft Word; объем: 5-10 страниц текста для доклада, 10-15 страниц текста для реферата (приложения к работе не входят в ее объем). Размер шрифта – 14; интервал – 1,5; с нумерацией страниц сверху страницы посередине, абзацный отступ на расстоянии 2,25 см от левой границы поля. В тексте обязательны ссылки на первоисточники. Количество источников: не менее 5-8 различных источников для доклада, не менее 8-10 для реферата.

Все формулы, единицы измерений, расчеты приводятся и ведутся в системе СИ. При оформлении работы соблюдаются поля:

- левое – 25 мм;
- правое – 10 мм;
- нижнее – 20 мм;
- верхнее – 20 мм

Оформление таблиц:

- Таблицы применяют для лучшей наглядности и удобства сравнения показателей. Название таблицы, при его наличии, должно отражать ее содержание, быть точным, кратким. Название таблицы следует помещать над таблицей слева, без абзацного отступа в одну строку с ее номером через тире.
- При переносе части таблицы название помещают только над первой частью таблицы, нижнюю горизонтальную черту, ограничивающую таблицу, не проводят.
- Таблицу следует располагать в отчете непосредственно после текста, в котором она упоминается впервые, или на следующей странице.
- На все таблицы должны быть ссылки в реферате. При ссылке следует писать слово «таблица» с указанием ее номера.

Оформление иллюстраций:

- Иллюстрации (чертежи, графики, схемы, компьютерные распечатки, диаграммы, фотоснимки) следует располагать непосредственно после текста, в котором они упоминаются впервые, или на следующей странице.
- Иллюстрации могут быть в компьютерном исполнении, в том числе и цветные.
- На все иллюстрации должны быть даны ссылки в реферате.
- Иллюстрации, за исключением иллюстрации приложений, следует нумеровать арабскими цифрами сквозной нумерацией.
- Если рисунок один, то он обозначается «Рисунок 1». Слово «рисунок» и его наименование располагают посередине строки.

- Допускается нумеровать иллюстрации в пределах раздела. В этом случае номер иллюстрации состоит из номера раздела и порядкового номера иллюстрации, разделенных точкой. Например, Рисунок 1.1.
- Иллюстрации, при необходимости, могут иметь наименование и пояснительные данные (подрисуночный текст). Слово «Рисунок» и наименование помещают после пояснительных данных и располагают следующим образом: Рисунок 1 — Схема карты сайта.
- Иллюстрации каждого приложения обозначают отдельной нумерацией арабскими цифрами с добавлением перед цифрой обозначения приложения. Например, Рисунок А.3.
- При ссылках на иллюстрации следует писать «... в соответствии с рисунком 2» при сквозной нумерации и «... в соответствии с рисунком 1.2» при нумерации в пределах раздела.

Приложения

- Приложение оформляют как продолжение данного документа на последующих его листах или выпускают в виде самостоятельного документа.
- В тексте документа на все приложения должны быть даны ссылки. Приложения располагают в порядке ссылок на них в тексте документа, за исключением справочного приложения «Библиография», которое располагают последним.
- Каждое приложение следует начинать с новой страницы с указанием наверху посередине страницы слова «Приложение», его обозначения и степени.
- Приложение должно иметь заголовок, который записывают симметрично относительно текста с прописной буквы отдельной строкой.
- Приложения обозначают заглавными буквами русского алфавита, начиная с А, за исключением букв Ё, З, Й, О, Ч, Ь, Ы, Ъ. После слова «Приложение» следует буква, обозначающая его последовательность.
- Допускается обозначение приложений буквами латинского алфавита, за исключением букв I и O.
- В случае полного использования букв русского и латинского алфавитов допускается обозначать приложения арабскими цифрами.
- Если в документе одно приложение, оно обозначается «Приложение А».
- Текст каждого приложения, при необходимости, может быть разделен на разделы, подразделы, пункты, подпункты, которые нумеруют в пределах каждого приложения. Перед номером ставится обозначение этого приложения.
- Приложения должны иметь общую с остальной частью документа сквозную нумерацию страниц.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

6.1. Образовательные технологии

Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Тема 1. Виды движения в молекулах.	<i>Обзорная лекция</i>	<i>Фронтальный опрос, выполнение</i>	<i>Не предусмотрено</i>

		<i>практических заданий, тематические дискуссии</i>	
Тема 2. Виды спектров и их информативность.	<i>Лекция-диалог</i>	<i>Фронтальный опрос, выполнение практических заданий, тематические дискуссии</i>	<i>Не предусмотрено</i>
Тема 3. Основы теории спектров комбинационного и резонансного комбинационного рассеяния света.	<i>Лекция с элементами обратной связи</i>	<i>Фронтальный опрос, выполнение практических заданий, тематические дискуссии</i>	<i>Не предусмотрено</i>
Тема 4. Программная реализация методов молекулярной механики.	<i>Лекция- диалог</i>	<i>Фронтальный опрос, выполнение практических заданий, тематические дискуссии</i>	<i>Не предусмотрено</i>
Тема 5. Квантово-механическое рассмотрение молекулярных систем.	<i>Лекция- диалог</i>	<i>Фронтальный опрос, выполнение практических заданий, тематические дискуссии</i>	<i>Не предусмотрено</i>
Тема 6. Основные понятия квантовой механики.	<i>Лекция- диалог</i>	<i>Фронтальный опрос, выполнение практических заданий, тематические дискуссии</i>	<i>Не предусмотрено</i>

6.2. Информационные технологии

– использование возможностей интернета в учебном процессе (использование сайта преподавателя (рассылка заданий, предоставление выполненных работ, ответы на вопросы, ознакомление обучающихся с оценками и т. д.));

– использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронных библиотек, журналов и т. д.) как источников информации;

– использование возможностей электронной почты преподавателя;

– использование средств представления учебной информации (электронных учебных пособий и практикумов, применение новых технологий для проведения очных (традиционных) лекций и семинаров с использованием презентаций и т. д.);

– использование интегрированных образовательных сред, где главной составляющей являются не только применяемые технологии, но и содержательная часть, т. е. информационные ресурсы (доступ к мировым информационным ресурсам, на базе которых строится учебный процесс);

– использование виртуальной обучающей среды (LMS Moodle «Цифровое обучение») или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

6.3. Перечень программного обеспечения и информационных справочных системы

6.3.1. Программное обеспечение

Наименование программного обеспечения	Назначение
Adobe Reader	Программа для просмотра электронных документов
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle	Виртуальная обучающая среда

Наименование программного обеспечения	Назначение
Mozilla FireFox	Браузер
Microsoft Office 2013, Microsoft Office Project 2013, Microsoft Office Visio 2013	Пакет офисных программ
7-zip	Архиватор
Microsoft Windows 7 Professional	Операционная система
Kaspersky Endpoint Security	Средство антивирусной защиты
Google Chrome	Браузер
Notepad++	Текстовый редактор
OpenOffice	Пакет офисных программ
Opera	Браузер
Paint .NET	Растровый графический редактор
Scilab	Пакет прикладных математических программ
Microsoft Security Assessment Tool. Режим доступа: http://www.microsoft.com/ru-ru/download/details.aspx?id=12273 (Free) Windows Security Risk Management Guide Tools and Templates. Режим доступа: http://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=6232 (Free)	Программы для информационной безопасности
MathCad 14	Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением
1С: Предприятие 8	Система автоматизации деятельности на предприятии
KOMPAS-3D V13	Создание трёхмерных ассоциативных моделей отдельных элементов и сборных конструкций из них
Microsoft Visual Studio	Среда разработки
Cisco Packet Tracer	Инструмент моделирования компьютерных сетей
CodeBlocks	Кроссплатформенная среда разработки
Eclipse	Среда разработки
Lazarus	Среда разработки
PascalABC.NET	Среда разработки
VMware (Player)	Программный продукт виртуализации операционных систем
Far Manager	Файловый менеджер
Sofa Stats	Программное обеспечение для статистики, анализа и отчётности
Maple 18	Система компьютерной алгебры
WinDjView	Программа для просмотра файлов в формате DJV и DjVu
MATLAB R2014a	Пакет прикладных программ для решения задач технических вычислений

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Наименование современных профессиональных баз данных, информационных справочных систем	
<u>Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС»</u> http://dlib.eastview.com Имя пользователя: AstrGU Пароль: AstrGU	
Электронные версии периодических изданий, размещённые на сайте информационных ресурсов www.polpred.com	
Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» https://library.asu.edu.ru/catalog/	
Электронный каталог «Научные журналы АГУ» https://journal.asu.edu.ru/	
Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек. http://mars.arbicon.ru	
Справочная правовая система КонсультантПлюс. Содержится огромный массив справочной правовой информации, российское и региональное законодательство, судебную практику, финансовые и кадровые консультации, консультации для бюджетных организаций, комментарии законодательства, формы документов, проекты нормативных правовых актов, международные правовые акты, правовые акты, технические нормы и правила. http://www.consultant.ru	

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

Таблица 6. Соответствие разделов, тем дисциплины (модуля), результатов обучения по дисциплине (модулю) и оценочных средств

№ п/п	Контролируемый раздел, тема дисциплины (модуля)	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
1	Тема 1. Виды движения в молекулах.	ПК-8	Опрос

2	Тема 2. Виды спектров и их информативность.	ПК-8	Опрос
3	Тема 3. Основы теории спектров комбинационного и резонансного	ПК-8	Тест
4	Тема 4. Программная реализация методов молекулярной механики.	ПК-8	Опрос
5	Тема 5. Квантово- механическое рассмотрение молекулярных систем.	ПК-8	Опрос
6	Тема 6. Основные понятия квантовой механики.	ПК-8	Тест

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

Таблица 7. – Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы, приводить примеры
4 «хорошо»	демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры

Таблица 8 – Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует отдельные, несистематизированные навыки, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание по подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задания

Шкала оценивания	Критерии оценивания
рительно»	

7.3. Контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения по дисциплине (модулю)

Тема 1. Программный пакет для построения молекул «Chemcraft».

1. Лабораторная работа

- 1) Решить поставленную задачу в «Chemcraft»
- 2) Отобразить 3-мерных изображений молекул по декартовым координатам атомов, с возможностью просмотра или модификации любого геометрического параметра в молекуле (расстояния, угла);
- 3) Визуализировать расчетные файлы GAMESS и Gaussian, включая просмотр отдельных геометрий из файла (оптимизированная структура, геометрия отдельного шага оптимизации и др.), анимацию мод колебаний, графическое представление градиента энергии, визуализацию молекулярных орбиталей в виде изоповерхностей, отображение графика сходимости ССП и др.;
- 4) Получение качественных 32-битных изображений молекул в различных графических стилях, содержащих требуемые обозначения (надписи, линии и др.), которые легко экспортируются в Word или другой текстовый редактор;

Тема 2. Программный пакет для построения молекул «GaussView».

1. Лабораторная работа

- 1) Просмотр/указание типов и зарядов ММ атомов
- 2) Добавление/переопределение избыточных внутренних координат
- 3) Указание замороженные атомы / координаты во время оптимизации
- 4) Установление эквивалентности атомов для оптимизации TS QST2 / QST3
- 5) Управление MOs: выбор, перестановка / повторное занятие орбиталей для CASSCF и т. Д.
- 6) Определение фрагментов для вычисления предположения фрагмента / противовеса
- 7) Создание входных файлов с помощью интерфейса, управляемого меню
- 8) Создание поверхностей и контуров для молекулярных орбиталей, электронной плотности, электростатического потенциала, спиновой плотности, плотности экранирования ЯМР

Тема 3. Программный пакет «Gaussian09W».

1. Лабораторная работа

- 1) Расчет оптимальных геометрических параметров.
- 2) Расчет характеристических частот в ИК и КР спектрах.
- 3) Расчет энергий равновесных конфигураций многоатомных молекул.
- 4) Анализ полученных данных.

Перечень вопросов и заданий, выносимых на зачёт

Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ПК-8. Способен осуществлять регламентную проверку технического состояния оборудования, его профилактический осмотр и текущий ремонт				
1	Задание закрытого типа	Магнитная проницаемость μ зависит от...	1. От вещества и его состояния	2

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		1. От вещества и его состояния 2. От местности 3. От величины проводника 4. От сопротивления		
2		Что утверждает принцип неопределенности Гейзенберга? a) Можно точно измерить положение и импульс частицы одновременно b) Чем точнее измеряется положение, тем менее точно измеряется импульс c) Все физические величины определены точно d) Принцип неопределенности относится только к атомарным системам	b	2
3		Что такое эмиссионный анализ? - А. Метод изучения физических свойств материалов - В. Способ анализа спектра излучения - С. Анализ механических свойств веществ	В	2
4		Какова интерпретация	b	2

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		волновой функции? а) Она всегда определяет положение частицы точно б) Квадрат модуля волновой функции определяет вероятность нахождения частицы с) Она не имеет отношения к физике д) Каждая волновая функция уникальна без исключений		
5		Что такое квантовые числа? а) Числа, определяющие размеры атомов б) Набор чисел, описывающий состояние электронов в атоме с) Числа, используемые для измерения силы гравитации д) Числа, которые всегда равны нулю	б	2
1.	Задание открытого типа	Что такое квантовая механика?	Квантовая механика — это раздел физики, изучающий поведение микроскопических объектов, таких как атомы и элементарные частицы.	15

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
2.		Какое основное отличие квантовой механики от классической механики?	В квантовой механике объекты могут существовать в нескольких состояниях одновременно, что называется суперпозицией, в отличие от классической механики, где объекты имеют строго определенное состояние.	15
3.		Какова роль операторов в квантовой механике?	Операторы в квантовой механике представляют физические наблюдаемые величины, такие как энергия или импульс, и действуют на волновые функции, позволяя находить соответствующие значения.	15
4.		Какова интерпретация волновой функции?	Вероятностная интерпретация волновой функции предполагает, что квадрат модуля волновой функции определяет вероятность нахождения частицы в данной точке пространства.	15
5.		Как происходит коллапс волновой функции?	Коллапс волновой функции происходит в результате измерения, когда система переходит из суперпозиции состояний в одно определенное состояние.	15

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

Таблица 10 – Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине (модулю)

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий / баллы	Максимальное количество баллов	Срок представления
Основной блок				
1.	<i>Ответ на занятии</i>		2	
2.	<i>Выполнение практического задания</i>		2	
Всего			40	-
Блок бонусов				
3.	<i>Посещение занятий</i>		2	
4.	<i>Своевременное выполнение всех заданий</i>		2	
Всего			10	-
Дополнительный блок**				
5.	<i>Зачет</i>			
Всего			50	-
ИТОГО			100	

Таблица 11 – Система штрафов (для одного занятия)

Показатель	Балл
<i>Опоздание на занятие</i>	2
<i>Нарушение учебной дисциплины</i>	2
<i>Неготовность к занятию</i>	2
<i>Пропуск занятия без уважительной причины</i>	2

Таблица 12 – Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по дисциплине (модулю)

по дисциплине (модулю)		
Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале	
90–100	5 (отлично)	Зачтено
85–89	4 (хорошо)	
75–84		
70–74		
65–69		
60–64	3 (удовлетворительно)	
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)	Не зачтено

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

8.1. Основная литература:

4. Ищенко, А.А. Дифракция электронов: структура и динамика свободных молекул и конденсированного состояния вещества / А.А. Ищенко, Г.В., Гиричев, Ю.И Тарасов – Из-во Физмалит, 2013. <https://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4>
5. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. - М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. - 224 с.: ил. - (Серия "Библиотека студентов"). <https://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4>
6. Аббасов, М. Применение инфракрасной спектроскопии к органическим и неорганическим соединениям / М. Аббасов, - Физика. Механика. Астрономия.- Из-во Русайн, 2022.- 465 стр. <https://book.ru/book/942879>

8.2 Дополнительная литература

1. Душин, В. К. Теоретические основы информационных процессов и систем: учебник для вузов / В. К. Душин. - М.: Дашков и К, 2003. 2006. – 348 с.
2. Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Учебно-методическое пособие. - Астрахань, Из-во ОГОУ ДПО «АИПКП», 2007.-68с
3. Шафрин, Ю. А. Информационные технологии: Учебник. / Ю.А. Шафрин. -М.: Лаб. Базовых Знаний: Бином, 1998. - 700 с.
4. Гаскаров, Д. В. Интеллектуальные информационные системы: учебник / Д.В. Гаскаров. - М.: Высшая школа, 2003. - 431 с.
5. Каймин, В.А. Основы компьютерной технологии. М.: «Финансы и статистика», 1992. -245 с.
6. Серба П.В., Мирошниченко С.П., Блинов Ю.Ф. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ПРОГРАММЕ GAUSSIAN/ УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ, 2012

8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины (модуля)

Наименование ЭБС
Электронно-библиотечная система BOOK.ru

Наименование ЭБС
https://book.ru Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретённым на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог содержит более 15 000 наименований изданий. www.studentlibrary.ru <i>Регистрация с компьютеров АГУ</i>
Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» Для кафедры восточных языков факультета иностранных языков. Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретённым на основании прямых договоров с правообладателями по направлению «Восточные языки» www.studentlibrary.ru <i>Регистрация с компьютеров АГУ</i>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Специализированный компьютерный класс с доступом в локальную сеть и Internet.
2. Комплект мультимедийного оборудования

Рабочая программа дисциплины (модуля) при необходимости может быть адаптирована для обучения (в том числе с применением дистанционных образовательных технологий) лиц с ограниченными возможностями здоровья, инвалидов. Для этого требуется заявление обучающихся, являющихся лицами с ограниченными возможностями здоровья, инвалидами, или их законных представителей и рекомендации психолого-медико-педагогической комиссии. Для инвалидов содержание рабочей программы дисциплины (модуля) может определяться также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).

10. ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) ПРИ ОБУЧЕНИИ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Рабочая программа дисциплины (модуля) при необходимости может быть адаптирована для обучения (в том числе с применением дистанционных образовательных технологий) лиц с ограниченными возможностями здоровья, инвалидов. Для этого требуется заявление обучающихся, являющихся лицами с ограниченными возможностями здоровья, инвалидами, или их законных представителей и рекомендации психолого-медико-педагогической комиссии. При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья учитываются их индивидуальные психофизические особенности. Обучение инвалидов осуществляется также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).

Для лиц с нарушением слуха возможно предоставление учебной информации в визуальной форме (краткий конспект лекций; тексты заданий, напечатанные увеличенным шрифтом), на аудиторных занятиях допускается присутствие ассистента, а также сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков. Текущий контроль успеваемости осуществляется в письменной форме: обучающийся письменно отвечает на вопросы, письменно выполняет практические задания. Доклад (реферат) также может быть представлен в письменной форме, при этом требования к содержанию остаются теми же, а требования к качеству изложения материала (понятность, качество речи, взаимодействие с аудиторией и т.

д.) заменяются на соответствующие требования, предъявляемые к письменным работам (качество оформления текста и списка литературы, грамотность, наличие иллюстрационных материалов и т. д.). Промежуточная аттестация для лиц с нарушениями слуха проводится в письменной форме, при этом используются общие критерии оценивания. При необходимости время подготовки к ответу может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации, а также использование на аудиторных занятиях звукозаписывающих устройств (диктофонов и т. д.). Допускается присутствие на занятиях ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь. Текущий контроль успеваемости осуществляется в устной форме. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование по вопросам.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, на аудиторных занятиях, а также при проведении процедур текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации могут быть предоставлены необходимые технические средства (персональный компьютер, ноутбук или другой гаджет); допускается присутствие ассистента (ассистентов), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь (занять рабочее место, передвигаться по аудитории, прочитать задание, оформить ответ, общаться с преподавателем).