

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Донецкий государственный университет»

Химический факультет
Кафедра физической химии



УТВЕРЖДАЮ
проректор

«29» марта 2024 г.
МП

П.А. Машаров

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

Укрупненная группа направлений подготовки	04.00.00 Химия
Программа высшего образования	Программа специалитета
Специальность	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Квалификация	Химик. Преподаватель химии
Форма обучения	Очная

Рабочая программа адаптирована для лиц
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Донецк 2024

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия» для обучающихся по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – специалитет по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 652 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2024 года.

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,
канд. хим. наук, доцент

Н.А. Туровский

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры физической химии
Протокол от 26.03.2024 г. № 14

Заведующий кафедрой

В.М. Михальчук

СОГЛАСОВАНО:

Декан химического факультета
28.03.2024 г.

С.Г. Бахтин

Учебно-методическая комиссия химического факультета
Протокол от 27.03.2024 г. № 2
Председатель

Р.И. Лыга

Руководитель основной профессиональной
образовательной программы,
канд. хим. наук, доц.
28.03.2024 г.

О.В. Баранова

1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

1.1. Требования к предварительной подготовке обучающихся, предшествующие и сопутствующие дисциплины, на которых основывается изучение данной:

дисциплины программы специалитета: «физическая химия», «органическая химия», «физика», «математика». Знания и умения, полученные в ходе изучения дисциплины «Квантовая химия», являются основой для изучения, сопутствующих и последующих дисциплин - «Строение вещества», «Высокомолекулярные соединения», «Химия коллоидных и наносистем», «Супрамолекулярная химия», «Компьютерная структурная химия»,

1.2. Дисциплины, курсовые работы и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

ознакомительная практика, педагогическая практика, научно-исследовательская работа, преддипломная практика.

2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (Программа специалитета)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.Б Квантовая химия
Часть образовательной программы	Базовая часть.
Количество зачетных единиц / всего часов	5/18033

2.2. Распределение часов по периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы+контроль	всего	
Очная	3	6	51	34	-	95	180	Экзамен

3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Формирование у магистров методологической и научной культуры, систематических знаний современного состояния, возможностей и ограничений современной квантовой химии; дать в руки химикам - экспериментаторам инструмент исследования, который разрешил бы проводить квантово-химические исследования с использованием всех возможностей современных компьютерных технологий и научить их мыслить структурными категориями в химии.

**4. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ
ОСВОЕНИЯ КОМПОНЕНТА ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ, ИХ
ИНДИКАТОРЫ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ**

Компетенции	Индикаторы	Результаты обучения
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ОПК-3.1. Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.	Знает теоретические и полуэмпирические модели, необходимые для решения задач Умеет использовать стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности химической направленности

5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1. Концепции и постулаты квантовой химии	
Концептуальные основы квантовой теории строения атомов и молекул	Экспериментальные доказательства сложной структуры атома. Объекты макро- и микромира. Гипотеза Планка о квантах энергии. Гипотеза Эйнштейна о квантовании энергии отрыва электронов от атомов или молекул. Энергия и импульс фотонов. Законы сохранения энергии и импульса фотонов. Атомная планетарная модель Резерфорда. Ее недостатки. Постулат Бора о стационарных состояниях атомов, необходимое и достаточное условие стационарности электронной орбиты. Радиус и энергия боровской электронной орбиты. Постулат Бора о электронных переходах в атомах.
Математический аппарат и постулаты квантовой механики объектов молекулярного и супрамолекулярного мира	Концептуальные основы квантовой механики химических частиц. Понятие математического оператора. Оператор импульса и его действие. Оператор координаты и его действие. Оператор времени и его действие. Порядок действия пары операторов на функцию. Свойства квантовомеханических операторов. Линейные операторы. Коммутирующие операторы. Эрмитовы операторы. Операторное уравнение на собственные значения. Постулат о способе описания состояния объектов микромира. Постулат о способе определения функции состояния объектов микромира: временное уравнение Шредингера. Стационарное

	<p>состояние химических частиц вещества. Уравнение Шредингера для стационарного состояния химических частиц вещества. Постулат о способе получения уравнений квантовой механики. Постулат о среднем значении оператора Гамильтона стационарного уравнения Шредингера.</p> <p>Постулат об антисимметричных свойствах функции состояния ансамбля объектов микромира. Постулат о суперпозиции состояний объектов микромира. Получить одномерный оператор кинетической энергии микрочастицы.</p> <p>Получить трехмерный оператор кинетической энергии объектов микромира. Получить оператор потенциальной энергии взаимодействия объектов микромира. Получить оператор полной энергии объектов микромира.</p>
Методология получения и решения стационарного уравнения Шредингера для частицы в одномерной потенциальной яме	<p>Методология получения стационарного уравнения Шредингера для частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме.</p> <p>Методология решения стационарного уравнения Шредингера для частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме. Методология анализа изменения энергии частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме. Методология анализа изменения функции состояния частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме при $n = 1, 2, \dots, k$. Узловые точки. Методология анализа изменения вероятности местонахождения частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме при $n = 1, 2, k$.</p>
Методология получения и решения уравнения Шредингера для атома водорода	<p>Методология получения стационарного уравнения Шредингера для атома водорода в декартовой системе координат. Анализ условий решения уравнения Шредингера для атома водорода в декартовой системе координат. Методология получения стационарного уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат. Анализ условий решения уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат. Методология разделения уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат на три дифференциальных уравнения второго порядка с одной переменной. R- уравнение для атома водорода. Θ- уравнение для атома водорода. Φ- уравнение для атома водорода. Условия, при которых R-, Θ- и Φ- урв-</p>

	<p>нения для атома водорода имеет решение. Атомная орбиталь.</p> <p>Квантовые числа и их взаимосвязь.</p>
Раздел 2. Методологические основы квантово-химической модели атомов и молекул	
Квантово-химические модели строения атомов и молекул	<p>Квантово-химическая модель строения многоэлектронного атома. <i>Практическое задание для самостоятельной работы.</i> Получить операторы гамильтониана квантово-химической модели строения многоэлектронного атома: оператор кинетической энергии ядра атома; оператор кинетической энергии электронов многоэлектронного атома; оператор потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядром многоэлектронного атома; оператор потенциальной энергии взаимодействия электронов между собой в многоэлектронном атоме.</p> <p>Квантово-химическая модель строения молекул – стационарное уравнение Шредингера. <i>Практическое задание для самостоятельной работы.</i> Получить операторы гамильтониана квантово-химической модели строения молекул: оператор кинетической энергии атомных ядер молекулы; оператор кинетической энергии электронов молекулы; оператор потенциальной энергии взаимодействия атомных ядер молекулы между собой; оператор потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядрами атомов молекулы; оператор потенциальной энергии взаимодействия электронов молекулы между собой. Квантово-химическая модель строения атомов и молекул в приближении Борна – Оппенгеймера. Квантово-химическая модель строения атомов в приближении независимых электронов. Квантово-химическая модель строения атомов в приближении самосогласованного поля. Многоэлектронная волновая функция Слейтера. Квантово-химическая модель строения атомов и молекул в приближении самосогласованного поля – метод Хартри-Фока.</p>
Концептуальные основы метода молекулярных орбиталей	<p>Концепция и основные положения метода молекулярных орбиталей. Приложение МО ЛКАО. Методология определения энергии и структуры молекулярных орбиталей - уравнения Рутана. Алгоритм определения энергии МО. Алгоритм определения коэффициентов при базисных функциях МО Система МО химической частицы. Заполненные и вакантные МО. Энергии МО. Граничные МО. ВЗМО и НВМО. Структура блока МО химической ча-</p>

	стицы. Орбитальный потенциал ионизации химических частиц. Орбитальное сродство к электрону химических частиц. Функция распределения электронной плотности в химических частицах. Электронный заряд на атомах химических частиц. Электронная плотность на атомах химических частиц. Электронная заселенность АО центрированных на атомах химических частиц.
. Концептуальные основы теории химической связи в приближении МО ЛКАО	Орбитально-электростатическая концепция в теории химической связи. Принцип соответствия атомных орбиталей в теории химической связи. Энергия двухатомных взаимодействий в приближении орбитально-электростатической концепции. Современное состояние квантово-химических методов.
Современное состояние квантово-химических методов	Концептуальные основы методов квантовой химии. Неэмпирические и полумэмпирические методы квантовой химии. новый недостаток метода Хартри-Фока. Энергия электронной корреляции. $\alpha\beta$ -электронная корреляция. улоновская корреляция электронов. Электронная корреляция Ферми. Электронная «кулоновская дырка». Электронная «дырка Ферми». Методы учета энергии электронной корреляции.
Актуальные направления современной квантовой химии	Квантовая биохимия. Квантовая медицинская химия. Квантовая экологическая химия. Квантовая химия твердого тела. Квантовая химия супрамолекулярных супрамолекулярных систем. Квантовая нанохимия. Сканирующая зондовая микроскопия как инструмент квантовой химии. Зондовая туннельная микроскопия. Магнитно-силовая микроскопия. Электросиловая микроскопия. Ближнепольная оптическая спектроскопия.

6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Форма обучения – очная, курс – 5, семестр – 9

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Концепции и постулаты квантовой химии	24	16	-	40	80
Концептуальные основы квантовой теории строения атомов и молекул	6	4	-	10	20
Математический аппарат и постулаты квантовой механики объектов молекулярного и супрамолекулярного мира	6	4	-	10	20

Методология получения и решения стационарного уравнения Шредингера для частицы в одномерной потенциальной яме	6	4	-	10	20
Методология получения и решения уравнения Шредингера для атома водорода	6	4	-	10	20
Раздел 2. Методологические основы квантово-химической модели атомов и молекул	27	18	-	55	199
Квантово-химические модели строения атомов и молекул	6	4	-	10	20
Концептуальные основы метода молекулярных орбиталей	6	4	-	10	20
. Концептуальные основы теории химической связи в приближении МО ЛКАО	6	4	-	10	20
Современное состояние квантово-химических методов	6	4	-	10	20
Актуальные направления современной квантовой химии	3	2	-	15	20
ИТОГО ПО КОМПОНЕНТУ ОПОП	51	34	-	95	180

7. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (СРЕДСТВА) ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7.1. Контрольные вопросы

Раздел 1

- 1 Какие экспериментальные доказательства сложной структуры атома?
- 2 Привести примеры объектов макро- и микромира.
- 3 Открытие кванта энергии. Постоянная Планка.
- 4 Какой ключевой результат в объяснении фотоэффекта?
- 5 Показать связь энергии и импульс фотонов.
- 6 Раскрыть содержание законов сохранения энергии и импульса фотона..
- 7 Атомная планетарная модель Резерфорда.
- 8 Постулаты Бора о стационарных состояниях атомов, необходимое и достаточное условие стационарности электронной орбиты.
- 9 Как связаны радиус и энергия боровской электронной орбиты.
- 10 Постулат Бора о электронных переходах в атомах.
- 11 В чем сущность открытия электронной волны де Бройля?.
- 12 Как получить уравнение электронной волны де Бройля.
- 13 Длина электронной волны де Бройля.
- 14 Длина волны объектов микромира в движении.
- 15 Волновой постулат де Бройля о стационарности электронных орбит.
- 16 Принцип неопределенности Гейзенберга.
- 17 В чем сущность статистического толкования волн де Бройля.
- 18 Концептуальные основы квантовой механики химических частиц.
- 19 Понятие математического оператора.
- 20 Оператор импульса и его действие.
- 21 Оператор координаты и его действие.
- 22 Оператор времени и его действие.
- 23 Порядок действия пары операторов на функцию.
- 24 Свойства квантовомеханических операторов;

- 25 Линейные операторы.
- 26 Коммутирующие операторы.
- 27 Эрмитовы операторы.
- 28 Операторное уравнение на собственные значения.
- 29 Постулат о способе описания состояния объектов микромира.
- 30 Постулат о способе определения функции состояния объектов микромира: временное уравнение Шредингера.
- 31 Стационарное состояние химических частиц вещества.
- 32 Уравнение Шредингера для стационарного состояния химических частиц вещества.
- 33 Постулат о способе получения уравнений квантовой механики.
- 34 Постулат о среднем значении оператора Гамильтона стационарного уравнения Шредингера.
- 35 Постулат об антисимметричных свойствах функции состояния ансамбля объектов микромира.
- 36 Постулат о суперпозиции состояний объектов микромира.
- 37 Получить одномерный оператор кинетической энергии микрочастицы.
- 38 Получить трехмерный оператор кинетической энергии объектов микромира.
- 39 Получить оператор потенциальной энергии взаимодействия объектов микромира.
- 40 Получить оператор полной энергии объектов микромира.

- 41 Уравнение Шредингера для частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме.
- 42 Решение уравнения Шредингера для частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме:
- 43 энергия частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме;
- 44 функция состояния частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме.
- 45 Квантование энергии частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме.
- 46 Изменение функции состояния и вероятности местонахождения частицы свободно движущейся в одномерной потенциальной яме при $n = 1, 2, \dots, k$. Узловые точки.
- 47 Методология получения стационарного уравнения Шредингера для атома водорода в декартовой системе координат.
- 48 Анализ условий решения уравнения Шредингера для атома водорода в декартовой системе координат.
- 49 Методология получения стационарного уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат.
- 50 Анализ условий решения уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат.
- 51 Методология разделения уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат на три дифференциальных уравнения второго порядка с одной переменной.
- 52 R- уравнение для атома водорода.
- 53 Θ - уравнение для атома водорода.
- 54 Φ - уравнение для атома водорода.
- 55 Условия, при которых R-, Θ - и Φ - уравнения для атома водорода имеет решение.
- 56 Атомная орбиталь.
- 57 Квантовые числа и их взаимосвязь
- Раздел 1
- 58 Квантово-химическая модель строения многоэлектронного атома.
- 59 Квантово-химическая модель строения молекул – стационарное уравнение Шредингера.

- 60 Квантово-химическая модель строения атомов и молекул в приближении Борна – Оппенгеймера.
- 61 Квантово-химическая модель строения атомов в приближении независимых электронов.
- 62 Квантово-химическая модель строения атомов в приближении самосогласованного поля. .
- 63 Многоэлектронная волновая функция Слейтера.
- 64 Квантово-химическая модель строения атомов и молекул в приближении самосогласованного поля – метод Хартри-Фока.
- 65 Неограниченный метод Хартри-Фока.
- 66 Ограниченный метод Хартри-Фока.

- 67 Концепция метода молекулярных орбиталей.
- 68 Атомная орбиталь..
- 69 Квантовые числа.
- 70 Молекулярная орбиталь.
- 71 Вариационная теорема.
- 72 Точные и пробные МО.
- 73 Приближение МО-ЛКАО.
- 74 Условие гибкости МО.
- 75 Условие для точной МО.
- 76 Число МО химической частицы.
- 77 Уравнения МО ЛКАО ССП Рутана.
- 78 Методология определения энергии МО.
- 79 Методология определения коэффициентов при базисных АО в МО.
- 80 Система МО химической частицы.
- 81 Заполненные и вакантные МО.
- 82 Энергии МО.
- 83 Граничные МО. ВЗМО и НВМО.
- 84 Структура блока МО химической частицы
- 85 Орбитальный потенциал ионизации химических частиц.
- 86 Орбитальное сродство к электрону химических частиц.
- 87 Функция распределения электронной плотности в химических частицах.
- 88 Электронный заряд на атомах химических частиц
- 89 Электронная плотность на атомах химических частиц.
- 90 Электронная заселенность АО центрированных на атомах химических частиц.
- 91 Алгоритм получения выражения для энергии МО H_2^{+} .
- 92 Алгоритм определения энергии МО H_2^{+} .
- 93 Алгоритм определения коэффициентов.
- 94 Требования к квантовохимическим методам.
- 95 Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии.
- 96 Современное состояние неэмпирических и полуэмпирических квантово-химических моделей.
- 97 Энергия электронной корреляции.
- 98 $\alpha\beta$ -электронная корреляция.
- 99 Кулоновская корреляция электронов.
- 100 Электронная корреляция Ферми.
- 101 Электронная «кулоновская дырка».
- 102 Электронная «дырка Ферми».
- 103 Способы учета электронной корреляции
- 104 Компьютерные информационные технологии квантовой химии.
- 105 HyperChem методология квантово-химического моделирования.

- 106 Запуск и завершение работы HyperChem комплекса программ структурной химии.
- 107 Структура рабочего окна и меню HyperChem.
- 108 Методология создания 3D-стереохимической модели химических соединений.
- 109 Визуализация молекулярной модели.
- 110 Изменение цвета рабочего окна и молекулярных объектов.
- 111 Графическое представление молекулярной модели.
- 112 Выделение структурных элементов в молекулярной модели.
- 113 Определение величин параметров молекулярной структуры.
- 114 Методология HyperChem квантово-химического расчета. HyperChem интерфейс молекулярной графики.

7.3. Вопросы письменной контрольной работы

- 1 Концептуальные основы, состояние и проблемы современной квантовой химии.
- 2 Задачи квантовой биохимии.
- 3 Задачи квантовой нанохимии
- 4 задачи квантовой медицинской химии..
- 5 Задачи квантовой экологической химии.,
- 6 Задачи квантовой супрамолекулярной химии.
- 7 Магнитно-силовая микроскопия.
- 8 Электросиловая микроскопия.
- 9 Методология компьютерных технологий неэмпирической квантовой химии.
- 10 Орбитали Хартри — Фока.
- 11 Орбитали Слейтера - Зенера.
- 12 Базисные функции для неэмпирических расчетов.
- 13 Орбитали гаусового типа.
- 14 Одноэкспоненциальная орбиталь слэтеровского типа.
- 15 Минимальные базисные наборы.
- 16 Двухэкспоненциальные базисные наборы.
- 17 Расширенные базисные наборы.
- 18 Поляризационные и диффузные функции.
- 19 Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов.
- 20 Общий подход к учету энергии электронной корреляции.
- 21 Комбинированные квантово-классические приближения (QM/MM).
- 22 Орбитально-электростатическая концепция теории химической связи..
- 23 Основные представления орбитальной картины химической связи.
- 24 Принцип орбитального соответствия. АО (методика Малликена).
- 25 *араметры критических точек электронной плотности, характеризующие химическую связь.
- 26 Концепция сил в теории химической связи: теорема Гельмана-Фейнмана, природа химической связи в приближении электростатической теоремы Гельмана – Фейнмана.
- 27 Теорема вириала, природа химической связи в приближении теоремы вириала.
- 28 Элементарный акт химической реакции.
- 29 Теория переходного состояния химической реакции. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции.
- 30 Стационарные точки ППЭ элементарной реакции. Путь химической реакции.
- 31 Оценка геометрии переходного состояния химической реакции.
- 32 Индексы реакционной способности.. Квантовая термодинамика.
- 33 Метод изодесмических реакций.

- 34 Определение термодинамических характеристик химических частиц и энергии их диссоциации на ионы и радикалы в приближении изодесмических реакций. Неизодесмические реакции.
- 35 Время в физической химии: кинетика и динамика.
- 36 РСМ континуальные модели и супермолекулярное приближение квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов.
- 37 Континуальная модель поляризационного действия. . Моделирование сольватных оболочек растворителя COSMO.
- 38 Энергия и градиенты энергии диэлектрического экранирования растворителем молекул вещества. Полная энергия сольватированных молекулярных систем.
- 39 Эффекты поляризационного действия растворителя на параметры электронной структуры химических частиц.

7.4. Образец содержания экзаменационного билета (при наличии экзамена по дисциплине)

Билет 1

1. Квантовая нанохимия.
2. Квантовая медицинская химия.
3. Квантовая экологическая химия,

8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже. Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных и практических занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, решение задач и т.п.).

8.1. Семестр 9, очная форма обучения

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1-2	Организационно-учебная работа в аудитории	20
	Самостоятельная работа	20
	Контрольная работа	10
ИТОГО		50
Экзамен		50
Общий итог за семестр		100

Соответствие баллов оценке

Количество баллов из 100	ECTS	Оценка по пятибалльной шкале	
		Экзамен, дифференцированный зачет	Зачет
90-100	A	отлично	зачтено
80-89	B	хорошо	зачтено

75-79	C	удовлетворительно	зачтено
70-74	D		зачтено
60-69	E		зачтено
35-59	FX	неудовлетворительно	не зачтено
0-34	F		не зачтено

9. ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

В ходе реализации дисциплины используются следующие дополнительные методы обучения, текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в зависимости от их индивидуальных особенностей:

- 1) для слепых и слабовидящих:
 - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
 - для выполнения задания при необходимости предоставляется увеличивающее устройство; возможно также использование собственных увеличивающих устройств;
 - письменные задания оформляются увеличенным шрифтом.
- 2) для глухих и слабослышащих:
 - лекции оформляются в виде электронного документа;
 - письменные задания выполняются на компьютере в письменной форме;
 - экзамен проводится в письменной форме на компьютере; возможно проведение в форме тестирования.
- 3) для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
 - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
 - письменные задания выполняются на компьютере;
 - экзамен и зачёт проводятся в устной форме или выполняются в письменной форме на компьютере.

При необходимости предусматривается увеличение времени для подготовки ответа.

Процедура проведения промежуточной аттестации для обучающихся устанавливается с учётом их индивидуальных психофизических особенностей. Промежуточная аттестация может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.

Обеспечивается доступ к информационным и библиографическим ресурсам в сети Интернет для каждого обучающегося в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

- 1) для слепых и слабовидящих:
 - в печатной форме увеличенным шрифтом;
 - в форме электронного документа;
- 2) для глухих и слабослышащих:
 - в печатной форме;
 - в форме электронного документа.
- 3) для обучающихся с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
 - в печатной форме;
 - в форме электронного документа.

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Учебные занятия проводятся в IX учебном корпусе ДонГУ (г. Донецк, ул. Щорса, 17а). Для проведения лекционных и практических занятий требуется аудитория, оборудованная меловой или маркерной доской, мультимедийный проектор и экран, ноутбук, комплект учебной мебели для студентов, рабочее место преподавателя, выход в Интернет – проводной или с использованием Wi-Fi.

Для самостоятельной работы используются текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета и других электронных библиотечных баз данных, учебно-методическое обеспечение, представленное в учебно-методическом кабинете Главного корпуса (ауд.405).

При изучении дисциплины применяются электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

С использованием ресурсов дистанционного образования осуществляется текущий контроль знаний обучающихся на основе тестирования и проверки результатов самостоятельной работы.

11. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

11.1. Основная литература

- 1 Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по хим.-технол. направлениям и специальностям / В.Г. Цирельсон. – Москва: БИНОМ. Лаб. знаний, 2010. – 495 с. Текст: непосредственный.
- 2 Туровский Н.А. Практикум по квантовой химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2019. – 145 с. Текст: непосредственный.
- 3 Туровский Н.А. Практикум по квантовой химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с. Текст: электронный..
- 4 Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с. Текст: непосредственный.
- 5 Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с. Текст: электронныйц.

11.2. Дополнительная литература

- 6 Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 "Химия" / А.И. Ермаков. – Москва: Юрайт, 2010. – 555 с. Текст: непосредственный.
- 7 Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул / И. Майер ; пер. с англ. М.Б. Дарховского и А.М. Токмачева ; под ред. А.Л. Чугреева. – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 384 с. Текст: непосредственный.
- 8 Стрижак, П.Е. Квантовая химия: учебник для студ. выс. учебн. завед. / П.Е. Стрижак; Национальный ун-т "Киево-Могилянская акад.". – Киев: Изд. дом "Киево-Могилянская акад.", 2009. – 458 с. Текст: непосредственный.

- 9 Гришаева Т. Н. Квантовая химия супрамолекулярных систем на основе кукурбит[н]урилов [Текст] / Т. Н. Гришаева, А.Н. Масой, А.М. Кузнецов. – Москва: [Ленанд](#), 2016. – 208 с. Текст: непосредственный.
- 10 Пастернак, Е. Н. Основы квантовой химии: учебное пособие. / Е.Н. Пастернак, Н.А. Туровский ; Донецкий нац. ун-т, хим. ф-т, каф. физ. химии. – Донецк: ДонНУ, 2012. – 81 с. Текст: непосредственный.

1

12. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. Информиио : электрон. справочник / ООО «РИНФИЦ». – Москва : Издат. дом «Информиио», [2018?–]. – URL: <https://www.informio.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный.
2. IPR SMART : весь контент ЭБС Ipr books : цифровой образоват. ресурс / ООО «Ай Пи Эр Медиа». – [Саратов : Ай Пи Эр Медиа, 2022]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа: для авториз. пользователей. – Текст. Аудио. Изображения : электронные.
3. Лань : электрон.-библ. система. – Санкт-Петербург : Лань, сор. 2011–2021. – URL: <https://e.lanbook.com/> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный. – Режим доступа: для авторизир. пользователей.
4. СЭБ : Консорциум сетевых электрон. б-к / Электрон.-библ. система «Лань» при поддержке Агентства стратег. инициатив. – Санкт-Петербург : Лань, сор. 2011–2021. – URL: <https://seb.e.lanbook.com/> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа : для пользователей организаций – участников, подписчиков ЭБС «Лань».
5. Book on lime : дистанц. образование / изд-во КДУ МГУ им. М. В. Ломоносова. – Москва : КДУ, сор. 2017. – URL: <https://bookonlime.ru> (дата обращения: 19.05.2023) – Текст . Изображение. Устная речь : электронные.
6. Научная электронная библиотека elibrary.ru : информ.-аналит. портал / ООО Научная электронная библиотека. – Москва : ООО Науч. электрон. б-ка, сор. 2000–2022. – URL: <https://elibrary.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.
7. Cyberleninka : науч. электрон. б-ка «КиберЛенинка» / [Е. Кисляк, Д. Семячкин, М. Сергеев ; ООО «Итеос»]. – Москва : КиберЛенинка, 2012. – URL: <http://cyberleninka.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный.
8. Электронный каталог Научной библиотеки Донецкого государственного университета. – Донецк : НБ ДонГУ, 1999– . – URL: <http://catalog.donnu.education> (дата обращения: 01.01.2023). – Текст : электронный.

13. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонГУ № 46484614)
2. Microsoft Office (корпоративная лицензия ДонГУ № 46472919)
3. Microsoft Visual Studio (лицензия программы Dream Spark для высших учебных заведений)
4. Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF (лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения).