

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце: Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

Дата подписания: 09.08.2023 12:24:43

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

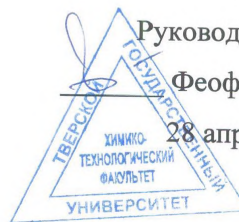
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Дополнительные главы квантовой химии

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 4 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., Русакова Н.П. _____

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины:

Квантовая механика – механика движения микрочастиц (электронов, протонов и т.д.). Квантовая химия – основа теоретических представлений современной химической науки, фундаментом которой являются представления квантовой механики.

Цель дисциплины – знакомство студентов с избранными разделами квантовой химии, входящими в состав основного теоретического фундамента современной химии.

Задачи дисциплины:

- показать глубину взаимосвязи квантовой механики и квантовой химии
- выработать умение применения знаний о неэмпирических и полуэмпирических методах при работе с программным обеспечением дисциплины и т.д.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Учебная дисциплина «Дополнительные главы квантовой химии» входит в Элективные дисциплины 2 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Данная дисциплина является продолжением (дополнением) общего курса «Квантовая механика и квантовая химия», читаемого студентам 3-го курса (6 семестр). *Предмет дисциплины* составляет такие разделы квантовой химии (теория групп и представлений групп, симметрия и их приложения), которым уделяется малое внимания (или не уделяется вовсе) в общем курсе.

3. Объем дисциплины: 5 зачетных единиц, 180 академических часов, в том числе:

контактная аудиторная работа: лекции - 34 часа, лабораторные работы - 34 часа;

контактная внеаудиторная работа: контроль самостоятельной работы – 40 часов;

самостоятельная работа: 45 часов, контроль - 27 часов.

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

специалистом более высокой квалификации	ПК-1.3 Готовит объекты исследования
ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:
экзамен в 7-м семестре.

6. Язык преподавания русский.

II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа (час.)	Контроль
		Лекции	Лабораторные занятия	Контроль самостоятельной работы		
1 Молекулярная система в квантовой химии	24	4	4	6	8	2
2 Элементы теории групп в квантовой механике	30	4	6	6	8	6
3 Квантовая теория атомов в молекулах	52	10	10	12	11	9
4 Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)	39	8	8	8	10	5
5 Колебания и вращение молекул	35	8	6	8	8	5
Итого	180	34	34	40	45	27

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
1. Молекулярная система в квантовой химии	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа

2. Элементы теории групп в квантовой механике	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа
3. Квантовая теория атомов в молекулах	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа • модульная работа
4. Электронное строение молекул (теория МО ЛКАО)	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа
5. Колебания и вращение молекул	<ul style="list-style-type: none"> • Лекции • Лабораторные занятия • Контроль самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания) • цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,) • групповая работа • модульная работа

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

№	Результат (индикатор)	Вид работы / способ	Критерии оценивания
1	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	<p>вид: выполнение 12 лабораторных работ по темам-1-5</p> <p>способ: на компьютере</p> <p>результаты: углубленная проработка темы</p> <p>Выполнение лабораторных работ является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки</p>	<p>24 балла</p> <p>Выполнение 1 лабораторной работы – 2 балла</p>
2		<p>вид: выполнение самостоятельной работы</p> <p>способ: на компьютере</p> <p>результаты: 1. обзор темы своей научной работы, методики и объектов исследования,</p>	<p>5 баллов – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию по всем заданиям;</p> <p>4 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям,</p>

	представленный в виде презентации 2. список патентов по заданной теме, осуществленный по базам данных, оформленный в соответствии с требованиями. Выполнение самостоятельной работы по индивидуальной теме является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки	содержит информацию более 3/4 от всех заданий; 3 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 3/4 от всех заданий; 2 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 2/4 от всех заданий; 1 балл – отчет по самостоятельной работе за семестр не полон (представлено менее 2/4 от всех заданий), не оформлен в соответствии с требованиями; 0 баллов – задания не выполнены, отчет не представлен.
3	вид: контрольная работа № 1 контрольная работа № 2 способ: традиционный результаты: оформленные по заданию бумажные бланки с решениями	10 баллов 10 баллов
4	Посещаемость	0,5 – 1 занятие (2 часа)
	Итого:	60 баллов
МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ		
<p><i>Своевременное выполнение лабораторных, контрольных и самостоятельной работ, посещение занятий и работа на них обучающегося (по итогам текущего контроля успеваемости) позволяют набрать студенту бакалавриата необходимое количество баллов для положительной оценки. В противном случае на экзамен выносятся невыполненные элементы текущего контроля успеваемости.</i></p>		

Шкала оценивания выполнения индикаторов:

Индикатор считается выполненным, если либо ко времени промежуточной аттестации обучающийся набрал как минимум пороговое количество баллов в результате текущего контроля за те виды активности (самостоятельная, модульные и лабораторные работы), которые отвечают за данный индикатор.

Шкала и критерии выставления оценок за дисциплину:

Шкала и критерии выставления оценок по дисциплине описаны в локальной нормативной документации Тверского государственного университета (Положение о рейтинговой системе обучения студентов ТвГУ). Положительная оценка может быть выставлена только в том случае, если выполнены все индикаторы.

V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. Ефремов, Ю.С. Квантовая механика / Ю.С. Ефремов. – Москва; Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с.: ил. – Режим доступа: по подписке. –
URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>
2. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст]. – М., 2014. - 495 с. - (Учебник для высшей школы). – Электронный ресурс. – Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=66357
3. Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. Пособие для студ. высш. учеб.заведений / В. И. Барановский. - М.: Издательский центр «Академия», 2008. - 384 с Режим доступа:
<http://www.kinetics.nsc.ru/chichinin/books/spectroscopy/baranovskii08.pdf>

б) Дополнительная литература:

1. Байков Ю. А. Квантовая механика. Учебное пособие. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. - 294 с. – Электронный ресурс. – Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214306>
2. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул.: учебное пособие / Майер И., пер. с англ. 3-е издание — Москва: Лаборатория знаний, 2017. — 385 с. — ISBN 978-5-00101-501-7.
URL: <https://book.ru/book/923084>
3. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов.: учебное пособие / Цирельсон В.Г. 4-е издание — М: Лаборатория знаний, 2017. — 521 с. — ISBN 978-5-00101-502-4.
URL: <https://book.ru/book/923090>
4. Иродов, И.Е. Квантовая физика. Основные законы: учебное пособие / Иродов И.Е. 7-е издание — Москва: Лаборатория знаний, 2017. — 259 с. — ISBN 978-5-00101-492-8.
URL: <https://book.ru/book/923061>
5. Иродов, И.Е. Задачи по квантовой физике.: учебное пособие / Иродов И.Е. 5-е издание — М: Лаборатория знаний, 2015. — 220 с. — ISBN 978-5-9963-2958-8.
URL: <https://book.ru/book/923957>
6. Соболев, С.В. Основы нерелятивистской квантовой механики / С.В. Соболев. – М: Физматлит, 2017. – 143 с.: граф. – Режим доступа: по подписке. –
URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=485503>
7. Ведринский Р.В. Квантовая механика. Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет, 2009. -384с.
Режим доступа: <http://www.phys.sfedu.ru/web/teor/Quantum1.pdf>
8. де Бройль Избранные научные труды. Т. 1. Становление квантовой физики. Работы 1921 – 1934 годов / Луи Бройль де. — М.: Логос, 2010. — 556 с. — ISBN 978-5-98704-505-3. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS:
URL: <http://www.iprbookshop.ru/9061.html>
9. Толмачёв, В. В. Квазиклассическая и квантовая теория атома водорода / В. В. Толмачёв, Ф. В. Скрипник. — Москва, Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, Ижевский институт компьютерных исследований, 2008. — 132 с. — ISBN 978-5-93972-642-9. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS:
[сайт].URL: <http://www.iprbookshop.ru/16538.html>
10. Балашов, В. В. Курс квантовой механики / В. В. Балашов, В. К. Долинов. — Москва, Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2001. — 336 с. — ISBN 5-93972-077-3.
URL: <http://www.iprbookshop.ru/16546.html>

11. Цышевский, Р.В. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций: учебно-методическое пособие / Р.В. Цышевский, Г.Г. Гарифзянова, Г.М. Храпковский. — Казань: КНИТУ, 2012. — 88 с. — ISBN 978-5-7882-1301-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : <http://www.iprbookshop.ru/62178.html>

12. Норанович, Д. А. Основы квантово-механических представлений о строении атома : учебное пособие / Д. А. Норанович. — Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. — 100 с. — ISBN 978-5-9275-0852-5. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. URL: <http://www.iprbookshop.ru/47053.html>

2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Office профессиональный плюс 2013
- Microsoft Windows 10 Enterprise
- HyperChem

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome
- ISIS Draw 2.4 Standalone
- MarvinSketch 5.2.4
- AIMQB (пакет программ AIMALL)

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com;
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- Электронная образовательная среда ТвГУ <http://lms.tversu.ru>
- Научная библиотека ТвГУ <http://library.tversu.ru>
- Сайт о химии <http://www.xumuk.ru/>
- Сайт разработки программного обеспечения AIMALL <http://aim.tkgristmill.com>
- Сайт химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>
- База данных электронного строения <http://aquila.tversu.ru>
- Открытая база данных химических соединений и их термодинамических свойств <https://webbook.nist.gov/>
- База данных спектральных характеристик органических соединений https://sdb.db.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct_frame_top.cgi

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

1. Учебная программа

I. МОЛЕКУЛЯРНАЯ СИСТЕМА В КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Координаты, используемые для описания молекулы (лабораторная система и системы центра масс, невращающаяся и вращающаяся). Уравнение Шредингера для молекулярной системы в лабораторной системе координат (углубленное изучение). Разделение его на составные части: поступательное, электронное, колебательное и вращательное.

Энергетические состояния (уровни) молекул: Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Критерий существования молекулы как единой связанной устойчивой системы. Одноэлектронное приближение (орбитальная картина строения). Самосогласованное поле (ССП). Метод Хартри-Фока (ХФ): ограниченный и неограниченный. Учет электронной корреляции. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри - Фока - Рутаана. Орбитали слейтеровского типа (ОСТ). Гауссовы функции (ГФ). Базисные наборы.

Неэмпирические расчеты (*ab initio*). Методы теории функционала плотности (*англ.* DFT): BLYP, B3LYP и др. Полуэмпирические методы. Методы MOX, PMX, PPP. Приближение НДП (нулевого дифференциального перекрытия): ППДП (CNDO), ЧПДП (INDO), МЧПДП (MINDO) и т.д. Программное обеспечение.

II. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ГРУПП В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Абстрактная теория групп. Понятие группы. Подгруппа. Классы сопряженных элементов и смежные классы. Изоморфизм и гомоморфизм групп. Прямое произведение групп. Представления групп и характеры. Неприводимые представления (НП). Разложение приводимых представлений на неприводимые. Точечные группы симметрии (углубленное изучение), их структура, прямые произведения, схемы соподчинения, классы. Представления точечных групп (типы симметрии) и таблицы характеров. Некоторые приложения симметрии (эквивалентность атомов и их взаимодействий в молекуле, число симметрии, дипольный момент, квадруполь и высшие мультиполи, эллипсоид поляризуемости).

Инвариантность гамильтониана по отношению к преобразованиям симметрии данной молекулярной системы. Собственные функции как базис представления группы.

Классификация электронных (и одноэлектронных) состояний молекул по симметрии. Типы симметрии АО. Групповые орбитали (ГО). Построение МО из АО центрального атома и ГО заместителей-лигандов в молекулах вида $AХ_n$ (углубленное изучение). Распределение электронов по связывающим, разрыхляющим и несвязывающим МО. Электронная конфигурация молекул на языке МО ЛКАО. Гибридизация АО (теоретико-групповое рассмотрение).

Корреляции НП точечных групп. Расщепление вырожденных уровней энергии при понижении симметрии (деформация, влияние электрического поля). Теория кристаллического поля и теория поля лигандов. Правила отбора для матричных элементов.

III КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ АТОМОВ В МОЛЕКУЛАХ (QTAIM).

Основные положения QTAIM. Условие нулевого потока градиента электронной плотности в описании связанного и свободного атома, критических точек. Лапласиан электронной плотности. Связь Лагранжиана и кинетической энергии с электронной плотностью системы. Использование характеристик распределения электронной плотности для описания электронных свойств атомов, молекул. Эффективный заряд, полная электронная энергия и объем атомов в рамках топологии электронной плотности.

Матрица Гессе и её собственные значения. Использование значений кривизны для описания особенностей распределения электронной плотности на химических связях и их свойств: кратность, жесткость, кривизна, симметричность. Использование системы атомных единиц в QTAIM и её связь с международной системой СИ.

IV. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ (теория МОЛКАО)

Электронное строение неорганических, органических и элементо-органических соединений (с позиций метода МО ЛКАО). Молекулы вида AX_n ($n = 2, 3, 4, \dots$), среди них

- линейные молекулы $BeCl_2, CO_2, XeF_2, \dots$;
- угловые молекулы $H_2O, BH_2, CH_2^+, NH_2^+, NO_2, \dots$;
- плоские молекулы $BCl_3, CH_3, CH_3^+, NO_3^-, \dots$;
- пирамидальные молекулы $NH_3, PH_3, H_2O^+, CH_3^-, \dots$;
- тетраэдрические молекулы $CH_4, BH_4^-, NH_4^+, CF_4, \dots$;
- октаэдрические молекулы $SF_6, SeF_6, PF_6^-, \dots$;
- октаэдрические комплексы вида MX_6 (без учета и с учетом π -связывания);
- более сложные молекулы: $(C_5H_5)_2Fe$ (ферроцен), $(C_6H_6)_2Cr$ (дибензолхром), $[C_2H_4PtCl_3]^- K^+$ (соль Цейзе) и др.

Сопряженные системы (в методе МОХ). Линейные полиены и моноциклические полиены (анулены). $C_5H_5^-$ (циклопентадиенил-анион), $C_7H_7^+$ (тропилий-катион), дианион $C_8H_8^{2-}$ и др. Ароматичность и антиароматичность. Альтернантные углеводороды. Хюккелевские и мебиусовские системы. Полиэдрические боргидридные анионы $B_nH_n^{2-}$ ($n = 5 \div 12$) и карбораны. Координационные соединения. Комплексы переходных металлов AX_n : Двойное связывание. Карбонилы металлов $Ni(CO)_4, Fe(CO)_5, Cr(CO)_6$. Металлоорганические комплексы. Биологические комплексы (хлорофилл *a*, гем).

V. КОЛЕБАНИЯ И ВРАЩЕНИЕ МОЛЕКУЛ

Молекулярные колебания. Нормальные координаты. Нормальные колебания. Колебательное представление.

Классификация вращающихся (жестких) молекул. Асимметричный волчок (H_2O, \dots). Симметричный волчок (NH_3, \dots). Линейные молекулы (HCN, \dots). Сферический волчок (CH_4, SF_6).

Электронно-колебательные (вибронные) состояния. Теорема Яна-Теллера
Электронно – колебательно - вращательные (ровибронные) состояния.
Влияние ядерного спина.

2. Темы, объекты и методические указания по подготовке к лабораторным занятиям

Планы лабораторных работ и методические рекомендации по подготовке к ним разработаны в соответствии с программой дисциплины «Дополнительные главы квантовой химии» и предназначены для проведения лабораторных занятий и для самостоятельной подготовки студентов.

Лабораторные занятия по дисциплине «Дополнительные главы квантовой химии» являются одной из важнейших форм обучения студентов и проводятся с целью углубления и закрепления знаний, привития навыков поиска, обобщения и изложения материала. Развитие темы лабораторного занятия регламентируется (количество академических часов) преподавателем.

Темы лабораторных работ.

1. Методы отображения молекул в пространстве. Z-матрица и декартовы координаты. Способы их решения в квантовой химии
2. Квантово-химические расчетные программы и комплексы. Возможности и недостатки.
3. Расчетные базисы. Классификации базисов. Основы построения базисов различных базисов. Расширенные наборы Поппла.
4. Методы вычисления функционала, используемые в DFT.
5. Радиальные и угловые волновые функции в приближении Борна-Оппенгеймера. Разделение переменных.
6. Стационарные состояния молекулярной системы Рассчитываемые методом МО ЛКАО.
7. Распределение электронной плотности молекул в терминологии QTAIM. Программа AIMALL и её свободно распространяемый пакет расчета электронных характеристик AIMQB.
8. Получение электронных характеристик распределения электронной плотности на атомах в AIMQB.
9. Определение внутримолекулярных эффектов через электронные свойства молекул.
10. Получение распределения электронной плотности в критических точках связей. Анализ величин.
11. Использование собственных значений Гессiana КТ связей. Анализ величин и работа с ними.
12. Определение свойств химических связей через топологию электронной плотности в рамках «квантовой теории атомов в молекулах»

Примеры объектов исследования для лабораторных занятий

- | | |
|--|---|
| 1. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-CH}_3$ | 14. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ |
| 2. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_2$ | 15. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C}(\text{O})\text{-CH}_3$ |
| 3. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHCl-CH}_3$ | 16. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}_3$ |
| 4. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ | 17. $\text{CH}_3\text{-CHCl-CH}_3$ |
| 5. $\text{CH}_3\text{-O-CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-CH}_3$ | 18. $\text{CH}_2=\text{CH-C}(\text{O})\text{OH}$ |
| 6. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}_3$ | 19. $\text{C}(\text{O})\text{H- C}(\text{O})\text{H}$ |
| 7. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C}(\text{O})\text{H}$ | 20. $\text{CCl}_3\text{-CH}_3$ |
| 8. $\text{C}(\text{OH})\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ | 21. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ |
| 9. $\text{CH}_3\text{-C}(\text{O})\text{H}$ | 22. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{NO})\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ |
| 10. $\text{CH}_3\text{-C}(\text{O})\text{-CH}_3$ | 23. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{SH})\text{-CH}_3$ |
| 11. $\text{CH}_3\text{-C}(\text{COOH})\text{H-CH}_3$ | 24. $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{OH})\text{-CH}_2\text{-COOH}$ |
| 12. $\text{CH}_2\text{Cl - CHCl-CH}_2\text{Cl}$ | 25. $\text{COOH -C}(\text{O})\text{- COOH}$ |
| 13. COOH-COOH | |

Студент бакалавриата может выбрать другой объект более близкий к своей научной работе после согласования с преподавателем дисциплины.

3. Задания и контроль самостоятельной работы

Перед каждым лабораторным занятием необходима самостоятельная работа по подготовке к его выполнению по индивидуальным объектам. Для этого обучающемуся предлагаются вопросы для самостоятельной проработки. Данные, которые будут получены в результате выполнения домашнего задания, будут использованы в лабораторных работах. Все лабораторные работы, не выполненные в аудиторные часы занятий, так же остаются в качестве домашнего задания. Срок выполнения – две недели, после чего максимальное количество баллов за соответствующее задание снижается в два раза.

Самостоятельная работа по дисциплине «Дополнительные главы квантовой химии» проводится с целью углубления и закрепления полученных в ходе лекционных занятий знаний и приобретение навыков пользования рекомендованной литературой, навыков научного исследования. Самостоятельная работа начинается с работы над лекционным материалом. Она включает конспектирование лекций и последующую работу над ними. При конспектировании лекции рекомендуется на каждой странице оставлять поля для последующих записей в дополнение к конспекту. При работе над текстом лекции студенту следует обратить особое внимание на проблемные вопросы, поставленные преподавателем при чтении лекции, а так же на его задание и рекомендации.

Перечень вопросов для самостоятельной работы над материалом:

1. Молекулярное уравнение Шредингера. Разделение переменных.
2. Энергетические состояния молекул: электронные, колебательные и вращательные (их относительное расположение, переходы и т.п).
3. Потенциальная поверхность молекулы (общая характеристика).

4. Электронное уравнение Шредингера.
 5. Уравнения Хартри-Фока и Хартри-Фока-Рутаана. Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии.
 6. Элементы абстрактной (общей) теории групп.
 7. Точечные группы симметрии: их структура и взаимосвязи (прямые произведения, соподчинение и др.), НП групп и характеры.
 8. Инвариантность гамильтониана по отношению к операциям симметрии. Собственные функции как базис представления группы.
 9. Классификация электронных и одноэлектронных состояний по НП групп.
 10. Типы симметрии АО. Групповые орбитали (ГО).
 11. Электронное строение органических соединений.
 12. Сопряженные системы. Ароматичность и антиароматичность.
 13. Полиэдрические боргидридные анионы $B_nH_n^{2-}$ ($n = 5 \div 12$) и карбораны.
 14. Комплексы переходных металлов вида $AХ_n$. Карбонилы металлов. Ферроцен, дибензолхром. Биокомплексы.
 15. Молекулярные колебания. Нормальные координаты. Классификация нормальных колебаний (по НП группы).
 16. Классификация вращающихся (жестких) молекул. Асимметричный волчок. Симметричный волчок. Линейные молекулы. Сферический волчок.
- И т.д.

Примеры заданий для индивидуальной работы:

1. Какой командой задаётся вычисление равновесной конфигурации циклобутана в расчётном пакете программы HyperChem?
Выбрать верный вариант:

a) RNF	c) SCF
b) RMS	d) MP2

2. Какой командой задаётся приближение для вычисления радикальной структуры в программе HyperChem?
Выбрать верный вариант:

a) RMS	c) UNF
b) MP2	d) SCF

3. При моделировании определения наиболее устойчивой конформации какого-либо соединения вычисляют?
 - А. скорости вращения заместителей относительно друг друга.
 - Б. минимум потенциальной энергии
 - В. энергию связей.
 - Г. величины валентных углов.

4. Использование программы HyperChem позволяет визуализировать результаты квантово-химических расчётов. Опишите алгоритм действий при определении внутренних координат рассчитанной молекулы

5. При внесении в таблицы частотных характеристик оптимизированной геометрии соединения следует помнить, что погрешность экспериментального измерения частот составляет $\pm 1 \text{ см}^{-1}$, следовательно:

- а) округление данных проводится до сотых,
- б) округление данных проводится до десятых,
- в) округление данных проводится до единиц,
- г) округление данных искажает истинную картину теоретического исследования
- д) округления данных не производится.

6. Сравните полученную в результате квантово-химических расчётов геометрию выбранного Вами соединения с геометрическими параметрами, приведёнными в базах данных, справочниках и энциклопедиях. Составьте литературный обзор полученных результатов и оформите по нему список литературы не менее 10-12 источников.

7. Что называют группой симметрии? (выбрать верный вариант):

- а) группу всех точек вращения вокруг связи, представленных ядрами атомов и электронов
- б) группу всех ядерных конформаций квантовой системы
- с) группу всех движений, для которых данный объект является инвариантом, с композицией в качестве групповой операции

8. Какой формулой задается группа симметрии метана? (выбрать правильный вариант):

- а) S_1
- б) S_2
- с) S_3
- д) S_4

9. Оператор одноэлектронного гамильтониана является:

Выберите правильный ответ:

- а) математической моделью для описания энергии электрона в многоэлектронной системе
- б) математической моделью для описания энергии ядра в многоэлектронной системе
- с) математической моделью для описания полной электронной энергии многоэлектронной системы

10. Используя базу данных <http://aquila.tversu.ru> (на основании электронных параметров: заряд, объём)

- а) выделить переносимые фрагменты для таутомеров *n*-8-тиокарбон-октанола-1.
- б) оценить индуктивный эффект концевых заместителей для таутомеров *n*-8-тиокарбон-октанола-1.
- в) опираясь на данные по групповым зарядам составить шкалу электроотрицательностей для таутомеров *n*-8-тиокарбон-октанола-1.

11. Каким способом можно задать молекулу для квантово-химического расчёта?

- а) С помощью пространственных координат ядер
- б) С помощью структурной формулы
- в) С помощью аддитивности свойств
- г) С помощью Z-матрицы
- д) С помощью матрицы смежности

12. С точки зрения квантовой химии, с помощью базы данных <http://aquila.tversu.ru> (характеристика зарядов) определите и обоснуйте возможность проведения реакции между

- а) гексином и NaH
- б) тиогексановой кислотой и $CaCl$

13. Что дает использование приближения Борна-Оппенгеймера?

- а) Возможность рассчитать электронные свойства квантовой системы
- б) Возможность выделить в волновой функции системы радиальную и угловые составляющие
- в) Возможность выделить в гамильтониане стационарного уравнения Шредингера операторы, зависящие от угловых и радиальных степеней свободы квантовой частицы
- г) Возможность получить значения уравнения Шредингера для многоэлектронных систем

14. Покажите что понятие химии об аддитивности свойств соотносится в классическом и квантово-химическом представлениях на

- а) таблице групповых электронных энергий спиртов базы данных <http://aquila.tversu.ru>
- б) таблице групповых зарядов тиокарбоновых кислот базы данных <http://aquila.tversu.ru>
- в) таблице групповых объемов карбоновых кислот базы данных <http://aquila.tversu.ru>

4. Вопросы к экзамену

1. Адиабатический электронный потенциал, его физический смысл. ППЭ и её свойства, стационарные точки и конформации молекул.
2. Типы движения квантовой частицы: одномерный потенциальный ящик, волновая функция частицы, оператор Гамильтона
3. Квантовая теория атомов в молекулах. Основные элементы
4. Одноэлектронное приближение Хартри физический смысл, математическое отображение, недостатки
5. Волновая функция для одноэлектронного приближения, приближения Хартри-Фока, приближения МО ЛКАО – отличия, преимущества и недостатки каждой из них.

6. Постулаты квантовой механики
7. Принцип Паули и правило Хунда для квантовой системы, Планковская константа, соотношение неопределённостей Гейзенберга
8. Атом водорода в квантовой механике
9. Метод ССП
10. Особенности различных систем координат в квантовой механике. Опишите систему координат, используемую для многоэлектронных атомов и систему координат, используемую для молекул.
11. Приближение Борна-Оппенгеймера, физический смысл, математическое отображение, недостатки
12. Типы движения квантовой частицы: квантовый гармонический осциллятор, волновая функция
13. Условие ортонормированности волновой функции в квантовой механике, пять ограничений, накладываемых на волновую функцию, условия, накладываемые на операторы физических свойств.
14. Уравнение Хартри-Фока-Рутаана и его упрощение для метода МО ЛКАО
15. Базис. Базисные наборы
16. Детерминант Слейтера.
17. Квантование. Квантование физических величин
18. Мультиплетность атома
19. Вывод стационарного уравнения Шредингера.
20. Детерминант Слейтера.
21. Функции Ферми.
22. Атомные термы.
23. Спин-спиновое взаимодействие. Тонкая структура терма.
24. Система атомных единиц.
25. Силовой подход к образованию химической связи.
26. Энергетический подход к образованию химической связи
27. Образование гомоядерной молекулы.
28. Интерференция электронной плотности.
29. Кратность связи.
30. Заряды на атомах по Малликену, Лёвдину, Бейдеру.
31. Вспомогательные функции распределения электронной плотности. Теория деформационной электронной плотности
32. Вспомогательные функции распределения электронной плотности. Квантово-топологическая теория атомных взаимодействий.
33. Физическая природа химической связи.

5. Указания для обучающихся по самостоятельной работе.

Организуя свою учебную работу студенты должны, во-первых, выявить рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса, применению изученного материала в лабораторных работах, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Во-вторых, ознакомиться

с указанным в методическом материале по дисциплине перечнем учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнению самостоятельной работы, а также с методическими материалами на бумажных и/или электронных носителях, предоставляемых студентам преподавателем во время занятий.

Самостоятельная работа обучающихся, предусмотренная учебным планом, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Подготовка отчета по объекту самостоятельной работы

Оформление отчета происходит на русском языке. Каждая тема самостоятельной работы раскрыта и описана на отдельном листке формата А4, со всеми полями 2 см. шрифтом ТNR, кегль 12, с одиночным интервалом между строками. Вверху, справа фамилия, имя и группа обучающегося.

Подготовка презентации по объекту самостоятельной работы

Структура презентации.

Структура презентации должна соответствовать структуре разрабатываемой темы:

1. Титульный слайд (1 слайд).

Первый лист – это титульный лист, на котором обязательно должны быть представлены: название темы; план презентации (вопросы, раскрывающие тему)

2. Слайды, раскрывающие тему (9 - 10 слайдов).

Следующими слайдами должно быть содержание, где представлены основные вопросы темы. Желательно, чтобы из содержания по гиперссылке можно перейти на необходимую страницу и вернуться вновь на содержание.

3. Финальный слайд (1 слайд).

На последнем слайде должны быть выводы о проделанной работе, так же фамилия, имя, отчество студента, группа; должность, фамилия, имя, отчество преподавателя

Рекомендуемое общее количество слайдов – 10 - 12

Этапы подготовки презентации

Создание презентации состоит из следующих этапов:

I. Планирование презентации – это многошаговая процедура, включающая определение целей, изучение темы, формирование структуры и логики подачи материала. Планирование презентации включает в себя два основных этапа:

1 – Формирование материала на русском языке

Он включает в себя самую кропотливую работу с материалом и подразделяется на:

- Определение целей.
- Сбор информации о материале.
- Определение основной идеи презентации.

- Подбор дополнительной информации.
- Планирование презентации.
- Подготовка заключения.

2 – Формирование презентации на английском языке

На данном этапе требуется внимательная работа по переводу материалов на английский язык

II. Разработка презентации – методологические особенности подготовки слайдов презентации, включая вертикальную и горизонтальную логику, содержание и соотношение текстовой и графической информации.

III. Репетиция презентации – это проверка и отладка созданной презентации. Она проводится на русском языке

6. Подготовка к выполнению и темы курсовых работ. Требования и рекомендации к курсовой работе по дисциплине.

Студенты бакалавриата в течении семестра выполняют курсовую работу по дисциплине «Дополнительные главы квантовой химии» и работают над её оформлением. В основу курсовых работ положено самостоятельное выполнение проекта по теоретической химии. Подбор методики осуществляется с помощью преподавателя курса, подбор литературы проводится самостоятельно. Качественно подготовленная курсовая работа может стать первоначальным фундаментом выпускной квалификационной работы и впоследствии даже магистерской или кандидатской диссертации.

Примерные темы курсовых работ:

1. Использование метода ВЗЛУР при анализе глицерина
2. Влияние серы на электронные свойства в бензоле
3. Квантовая теория атомов в молекулах при расчете бутадиена
4. Электронные свойства 1,3-дихлорпропана
5. Связевые характеристики электронной плотности в критических точках изобутена
6. Метод функционала плотности в расчете *n*-пентана
7. Квантово-химическое исследование пропандиала
8. Расчет электронной плотности глицина.

Методические рекомендации по написанию курсовой работы

Задачи написания курсовой работы:

1. Приобретение новых теоретических знаний в соответствии с темой работы и заданием руководителя;

2. Формирование у студентов навыков и умений проведения различного рода научно-исследовательских работ;
3. Показать умение студентов находить и анализировать различные источники учебного и научного характера;
4. Научить студентов применять полученные знания и навыки работы в области теоретической химии для научного исследования;
5. Показать способность студентов к творческой и научно-исследовательской работе, умение формулирования самостоятельных выводов по решению той или иной теоретической или практической проблемы, возможность аргументировать свое заключение;
6. Выработка у студентов навыков и умений правильно оформлять проведенное исследование;

К основным требованиям, предъявляемым к курсовой работе, относятся:

1. Курсовая работа должна быть выполнена студентом самостоятельно и носить творческий и научно-исследовательский характер;
2. Она должна основываться на выполнении проекта в области квантовой химии и анализе различного материала, начиная от периодической и справочной и заканчивая научной и учебной литературой;
3. Курсовая работа должна быть правильно оформлена, в соответствии со всеми требованиями;
4. Изложенный материал должен быть хорошо аргументированным;
5. Структура работы должна отличаться стройностью, логической продуманностью и полностью соответствовать заявленной тематике.

1. ПЕРВЫЙ ЭТАП

1.1. Выбор темы курсовой работы

Тему курсовой работы по дисциплине «Дополнительные главы квантовой химии» можно выбрать из примерного перечня тем. Допускается написание курсовой работы и по теме, которая отсутствует в примерном перечне тем, но только после предварительной консультации и утверждения ее научным руководителем. В противном случае работа может быть не принята к оценке.

1.2. Регистрация темы курсовой работы и выбор научного руководителя

После того как определились с интересующей темой будущей курсовой работы, необходимо зарегистрировать ее на кафедре физической химии. Дублирование тем курсовых работ не допускается, в связи с этим, рекомендуется, как можно раньше выбрать и зарегистрировать тему курсовой работы.

1.3. Консультирование с научным руководителем

После выбора темы курсовой работы, необходимо пройти консультацию по теме с научным руководителем. В ходе консультации происходит

уточнение тематики работы, согласование плана курсовой работы и разбор возникших вопросов по теме. В связи с этим рекомендуется заранее посмотреть определенную литературу по теме вашей работы, составить предварительный план работы, записать все непонятные и интересующие вас вопросы и т.д.

Научный руководитель осуществляет контроль за процессом выполнения работы, а по окончании ее подготовки проверяет и дает на нее рецензию.

2. ВТОРОЙ ЭТАП

2.1. Составление плана курсовой работы

План работы – это первоначальная основа работы, от грамотного составления которой зависит правильность написания и полнота раскрытия выбранной темы. Составление плана – это непростая задача, так как при этом уже необходимо владение материалом по выбранной теме курсовой работы, и, кроме того, он должен с одной стороны полно раскрывать содержание заявленной темы, а с другой наоборот не выходить за рамки предмета исследования. Более того, план должен быть логически выстроенным, т. е. последовательно раскрывать обозначенную тему.

Согласно устоявшейся традиции по написанию научных работ план должен состоять из введения, двух-трех глав по два-три параграфа в каждой (не допускается глава без разделения хотя бы на два параграфа), заключения и списка использованных источников и литературы. *При этом надо помнить, что название глав не должно ни в коем случае повторять название темы, а название параграфов – название глав.*

Студент может составить план самостоятельно, но согласовать его с научным руководителем. Кроме того, в процессе написания, в связи с нахождением студентом интересного материала, а также по другим причинам, план работы может меняться и корректироваться. И в этом случае также необходимо предварительное согласие научного руководителя.

2.2. Подбор и анализ источников и литературы

Основная часть работы должна быть основана на анализе различных источников научного (различные монографии, статьи, диссертации и авторефераты диссертаций) и учебного плана (например, учебники или учебные пособия) как отечественных, так и зарубежных авторов. Данная литература либо берется в библиотеке, либо из Интернет-ресурсов, либо из других источников.

Кроме того, студент должен показать способности поиска необходимой информации для написания исследования, поэтому в данном пособии не приводится список рекомендуемой литературы, так как необходимые материалы студенты должны найти сами и тем самым продемонстрировать свои научно-исследовательские навыки по поиску информации.

Любое цитирование как научной и учебной литературы, так и периодических и справочных изданий, должно быть дословным либо изложенным своими словами, максимально повторяющими смысл первоисточника, а после каждого цитирования обязательно ставится ссылка, в которой указываются все данные об авторе и источнике цитируемого материала.

3. ТРЕТИЙ ЭТАП

3.1. Структура курсовой работы

Структура курсовой работы должна соответствовать избранной теме, способствовать ее полному раскрытию и решению поставленных цели и задач. В структуру курсовой работы входят следующие элементы:

1. Титульный лист.
2. Содержание.
3. Введение.
4. Основное содержание, включающее в себя теоретическую часть, которая должна содержать не менее двух параграфов.
5. Заключение.
6. Список источников и литературы.
7. Приложения (*данный пункт не является обязательным*).

3.2. Требования к структурным элементам курсовой работы

3.2.1. Титульный лист

Титульный лист является первой страницей курсовой работы и служит источником информации, необходимой для обработки и поиска документа.

3.2.2. Содержание

Содержание включает введение, наименование всех разделов, подразделов, заключение, список использованных источников и литературы, приложения с указанием номеров страниц, на которых размещается начало материала.

3.2.3. Введение

Курсовая работа начинается с введения, однако это не означает, что начинать ее написание необходимо с данного раздела. Как это не парадоксально звучит, но рекомендуется приступать к написанию введения в последнюю очередь или, по крайней мере, когда будет закончена содержательная часть курсовой работы .

Во введении обязательно должны содержаться указания на:

- актуальность темы исследования;
- объект курсовой работы;
- предмет курсовой работы;
- цели и задачи исследования;
- методологическая основа исследования;
- теоретическая основа курсовой работы;
- структура работы.

Актуальность темы исследования. В данном разделе указывается значимость проведения исследования именно по данной теме на современном этапе развития химической промышленности и химической науки, а также обосновывается позиция автора по выбору им тематики курсовой работы. Кроме того, здесь может быть затронута практическая и теоретическая ценность исследования в выбранном направлении. Однако необходимо помнить, что актуальность не должна занимать слишком много места, оптимальный объем составляет 1/2 или 2/3 страницы.

Цели и задачи исследования. Цели исследования predetermined предметом курсовой работы, непосредственно вытекают из него, а задачи, в свою очередь, predetermined целью исследования. Чаще всего цель исследования одна, а задач, естественно, несколько. Цель курсовой работы – это тот ориентир, то конечное состояние, которое автор стремится в итоге достигнуть. Цели с задачами соотносятся как общее и частное, то есть задачи – это определенные промежуточные пункты, которые необходимо достичь, чтобы осуществить общую цель.

3.2.4. Содержательная часть курсовой работы

Данный раздел курсовой работы состоит из нескольких глав и параграфов, в которых собственно и проводится само исследование, необходимо, чтобы они были последовательными и логически выстроенными. Поэтому следует соблюдать логическое построение материала и плавные переходы мысли из одного параграфа в другой. При этом очень важно, чтобы автор не только переписывал имеющийся материал, но и глубоко анализировал его, приводя различные размышления по данному поводу. В идеале курсовая работа должна содержать не просто анализ, а критический анализ различных источников, а автор должен излагать и свое видение проблематики.

Оптимальный объем содержательной части курсовой работы должен составлять примерно 13-18 страниц.

3.2.5. Заключение

В заключении приводится краткий ретроспективный обзор проведенной в исследовании работы, указываются узловые моменты исследования, излагаются теоретические и практические выводы, к которым пришел студент в результате исследования, а также предложения по улучшению, оптимизации состояния изучаемого вопроса. Они должны быть краткими и четкими, дающими полное представление о содержании, значимости, обоснованности и эффективности предлагаемых разработок. Оно представляет результат научного творчества студента, краткий итог курсовой работы. По объему заключение составляет 1-2 страницы .

3.2.6. Список литературы

В содержание данный элемент должен быть отражен как Список источников и литературы. Он должен включать в себя не менее 10

источников, используемых при написании работы. Литературные источники группируются в порядке использования материала источника в курсовой.

3.2.7. Приложения

В приложении следует помещать вспомогательный материал, который при включении в основную часть загромождает текст. К вспомогательному материалу относятся большие таблицы, графики, схемы, рисунки.

3.3. Научный руководитель

Научный руководитель осуществляет руководство на протяжении всего времени подготовки и написания курсовой работы, а в конце дает рецензию на выполненную работу и на защите определяет, оценивает качество и самой работы, и непосредственно процесса защиты работы студентом. В связи с этим можно обращаться к научному руководителю по поводу всех неясных или уточняющих вопросов. К ним относятся:

- помощь научного руководителя при выборе тематики работы и составления ее плана;
- оказание помощи в подборе учебных и научных источников;
- рекомендации по написанию курсовой работы, в том числе разрешение спорных вопросов;
- разъяснение правил оформления курсовой работы;
- предварительная проверка отдельных глав или параграфов работы и т.д. и т.п.

3.4. Наиболее часто встречаемые ошибки при написании курсовой работы

- содержание работы полностью или частично не соответствует заявленной тематике;
- переписывание одного или нескольких учебников;
- отсутствуют резюмирующие выводы, к которым пришел автор в результате исследования;
- не показана работа с периодическими изданиями;
- отсутствует авторское мнение в работе.

4. ЧЕТВЕРТЫЙ ЭТАП

4.1. Оформление курсовой работы

4.1.1. Общие требования

Курсовая работа набирается на компьютере в текстовом редакторе Microsoft Word. Рекомендуется следующий вариант форматирования текста: шрифт – Times New Roman размером 14 пт., междустрочный интервал – полуторный, выравнивание текста на странице – по ширине. Абзацный отступ 1,25 см. Работа печатается на одной стороне листа белой бумаги формата А4 со следующими полями: левое – 25 мм, верхнее – 20 мм, нижнее – 20 мм,

правое – 15 мм. Рекомендуемый объем курсовой работы составляет не более 20-25 страниц печатного текста.

На титульном листе между сведениями об авторе работы и его фамилией ставится подпись автора, подтверждающая личное написание курсовой работы.

Каждая структурная часть курсовой работы (введение, глава, заключение, список использованных источников и литературы) начинается с новой страницы.

Страницы курсовой работы следует нумеровать арабскими цифрами, соблюдая сквозную нумерацию по всему тексту работы в центре нижней части листа без точки. Титульный лист включают в общую нумерацию страниц, но номер страницы на титульном листе не проставляется.

Наименования структурных элементов курсовой работы: «СОДЕРЖАНИЕ», «ВВЕДЕНИЕ», «ЗАКЛЮЧЕНИЕ», «СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ И ЛИТЕРАТУРЫ», а также названия глав следует печатать полужирным шрифтом, выравнивание по центру без абзацного отступа и точки в конце прописными буквами, не подчеркивая.

Заголовки параграфов, пунктов и подпунктов следует печатать с прописной буквы, не подчеркивая, без точки в конце. Если заголовок включает несколько предложений, их разделяют точками. Переносы слов в заголовках не допускаются.

Расстояние между заголовками курсовой работы, разделами основной части и текстом должно быть не менее 3 (2 x 1,5 интервала) интервалов.

Введение и заключение не нумеруются.

Главы, параграфы, пункты и подпункты работы нумеруются арабскими цифрами с точкой .

4.1.2. Ссылки и сноски

Сноски в курсовой работе применяются тогда, когда автор желает либо уточнить какой-либо факт, либо расшифровать то или иное утверждение, или что-либо прокомментировать и т. п. Сноски приводятся в конце страницы, а нумерация и оформление осуществляется также как и в случае использования ссылок.

Ссылки же применяются в том случае, когда используются или цитируются источники или литература, а также другие факты, взятые из источников и литературы. Рекомендуется использовать в курсовой работе *подстрочные ссылки с постраничной нумерацией арабскими цифрами.*

Для оформления ссылок и сносок следует использовать функцию в Microsoft Word 97-2003 «вставка – ссылка – вставить сноску», в Microsoft Word 2007 «ссылки – вставить сноску». Знак ссылки, если примечание относится к отдельному слову, должен стоять непосредственно у этого слова. Если же он относится к предложению или группе предложений, то ставится после знака препинания в их конце. Подстрочные ссылки нумеруются арабскими цифрами

без скобки на каждой странице, начиная с цифры 1. На каждой следующей странице нумерацию ссылок начинают сначала.

В ссылке обязательно приводятся следующие данные: фамилия и инициалы автора(ов), название работы, место, год издания и страница(ы) откуда цитируется или другим образом используется в курсовой работе данный источник или литература.

Если цитирование производится не по первоисточнику, а по работе другого автора, этот факт необходимо обозначать в ссылке. В таких случаях она начинается со слов «Цит. по:», а далее оформляется, как было указано выше. Цитирование источника может быть дословным, в этом случае такая цитата заключается в кавычки в тексте курсовой работы, а любое исправление в ней не допускается. Если же вы все равно сделали незначительные изменения, то необходимо сразу после них указать в круглых скобках то, что вы изменили и поставить первые буквы вашего имени и фамилии. Если же цитирование осуществляется не дословно, но при этом главная мысль заимствована из источника, тогда заключать цитату в кавычки не требуется, однако необходимо поставить ссылку.

4.1.3. Оформление списка использованных источников и литературы

Список использованных источников и литературы должен состоять из четырех разделов:

1. Периодические издания.
2. Научная и учебная литература включает в себя различные научные и учебные издания, монографии, статьи, диссертации, авторефераты диссертаций и т.д.
3. Издания на иностранном языке.
4. Интернет-ресурсы.

4.1.4. Иллюстрации

Иллюстрации (фотографии, рисунки, схемы, графики) располагаются в курсовой работе непосредственно на странице с текстом после абзаца, в котором они упоминаются впервые, или отдельно на следующей странице. Иллюстрации, которые расположены на отдельных листах, должны включаться в общую нумерацию страниц.

Иллюстрации обозначают словом «Рисунок» и нумеруют последовательно в пределах параграфа. Номер иллюстрации должен состоять из номера параграфа и порядкового номера иллюстрации, разделенных точкой. Например: **Рис.1.2** (второй рисунок первого параграфа). Номер иллюстрации, ее название и поясняющие подписи помещают последовательно под иллюстрацией. Если в курсовой работе приведена одна иллюстрация, то ее не нумеруют и слово «Рисунок» не пишут.

Иллюстрации должны иметь наименование, которое дается после номера рисунка. При необходимости иллюстрации снабжают поясняющими подписями (подрисуночный текст). Номер иллюстрации, ее название и поясняющие подписи помещают под иллюстрацией.

Иллюстрации должны быть расположены так, чтобы их было удобно рассматривать без поворота работы или с поворотом по часовой стрелке. Качество иллюстраций должно обеспечивать их четкое воспроизведение.

4.1.5. Таблицы

Цифровой материал, как правило, должен оформляться в виде таблиц. Каждая таблица должна иметь заголовок, который располагают над таблицей и печатают в начале строки. Надпись «Таблица» с указанием её номера помещается в правом верхнем углу над заголовком таблицы. Заголовок и слово «Таблица» начинают с прописной буквы. Подчеркивать заголовок не следует. Точка в конце заголовка не ставится.

Заголовки граф должны начинаться с прописных букв, подзаголовки - со строчных, если они составляют одно предложение с заголовком, и с прописных, если они самостоятельные. Деление заголовка таблицы по диагонали не допускается. Высота строк в таблице должна обеспечивать четкое воспроизведение включенной в нее информации. Графа «№ п/п» в таблицу не включается.

Таблицы нумеруются последовательно (за исключением таблиц, приведенных в приложении) в пределах параграфа. В правом верхнем углу над соответствующим заголовком таблицы помещается надпись «Таблица» с указанием её номера. Номер таблицы должен состоять из номера параграфа и порядкового номера таблицы, разделенных точкой, например: «Таблица 1.2» (вторая таблица первого параграфа). Если в курсовой работе одна таблица, её не нумеруют и слово «Таблица» не пишут.

Таблица размещается после первого упоминания о ней в тексте таким образом, чтобы ее можно было читать без поворота работы или с поворотом по часовой стрелке.

Таблицу с большим количеством строк допускается переносить на другой лист. При переносе части таблицы на другой лист (страницу) слово «Таблица» и номер её указываются один раз справа над первой частью таблицы, над другими частями пишут слово «Продолжение». Если в работе несколько таблиц, то после слова «Продолжение» указывается номер таблицы, например: «Продолжение табл. 1.2». При переносе таблицы на другой лист (страницу) заголовок помещается только над первой её частью.

Таблицу с большим количеством граф допускается делить на части и помещать одну часть под другой в пределах одной страницы. Если строки графы таблицы выходят за формат страницы, то в первом случае в каждой части таблицы повторяется её головка, во втором случае – боковик.

Если повторяющийся в разных строках графы таблицы текст состоит из одного слова, его после первого написания допускается заменять кавычками; если из двух и более слов, то при первом повторении его заменяется словами «То же», а далее – кавычками. Ставить кавычки вместо повторяющихся цифр и иных символов не допускается. Если цифровые или иные данные в какой-либо строке таблицы не приводятся, то в ней ставится прочерк.

4.2. Правила скрепления курсовой работы

Курсовая работа должна быть аккуратно скреплена путем использования переплета или с помощью использования папки – скоросшивателя. Не допускается при скреплении курсовой работы использовать папку с индивидуальными файлами, в которые по отдельности вкладывается каждый лист, так как это затрудняет делать исправления в процессе ее проверки.

Наиболее часто встречаемые ошибки при оформлении курсовой работы:

- неправильное оформление (отсутствуют номера страниц, сноски, список источников и литературы оформлен не в соответствии с вышеуказанными правилами и т. д.);
- небольшое количество источников в списке использованных источников и литературы;
- использование в работе различных шрифтов;
- текст или полностью, или частично не выровнен по ширине;
- точки в конце заголовка;
- неправильно оформлены рисунки;
- неправильно оформлены таблицы.

5. ПЯТЫЙ ЭТАП

5.1. Проверка и защита курсовой работы

5.1.1. Проверка курсовой работы научным руководителем

После того как курсовая работа выполнена и надлежащим образом оформлена, рекомендуется еще раз ее внимательно прочитать и проверить на наличие различных ошибок, в том числе и грамматических, и неточностей. После этого работа сшивается и сдается на кафедру неорганической и аналитической химии, где регистрируется лаборантом кафедры и передается на проверку научному руководителю. Если работа соответствует всем предъявляемым и выше перечисленным требованиям, то она допускается к защите. При этом научный руководитель подготавливает рецензию на курсовую работу, в которой могут быть указаны определенные незначительные замечания или основные вопросы, на которые следует обратить внимание при защите курсовой работы. Курсовая работа возвращается обратно студенту для подготовки к защите.

Если работа не соответствует предъявляемым требованиям, то она не допускается до защиты и передается студенту на доработку. При этом на не допущенную работу также научным руководителем составляется рецензия, в которой отражаются те недостатки, которые необходимо устранить.

5.1.2. Примерные критерии оценки курсовой работы

В курсовой работе студент должен показать:

- профессиональную эрудированность, знание общей и специальной литературы;
- умение планировать и проводить исследование;
- способность видеть взаимосвязь проблем и вопросов теории и практики;
- умение сопоставлять и анализировать научные подходы и идеи;
- умение логично и стройно излагать материал в соответствии с планом;
- умение делать выводы и обобщения;
- умение объяснить и защитить положения работы.

Общими требованиями к курсовой работе и первичными критериями качества её выполнения являются:

- логичность в изложении материала при раскрытии темы;
- обоснованность (социальная и научная) актуальности темы и точность постановки проблемы исследования;
- конкретность целей и задач исследования, принципиальная возможность их достижения и решения в ходе работы;
- полнота изложения вопросов плана;
- привлечение достаточно широкого круга учебной и научной литературы и, в первую очередь, первоисточников;
- самостоятельность и доказательность выводов и предложений, которые содержатся в соответствующих разделах работы и заключении;
- грамотность написания, правильность и аккуратность оформления.

«Отлично» выставляется в том случае, если работа выполнена без замечаний и в ней присутствует большая доля самостоятельных авторских выводов и предложений. Студент в процессе защиты хорошо владеет содержанием проведенного исследования, смог ответить на все поставленные вопросы, входящие в предмет исследования курсовой работы, смог в должном образе аргументировать свои выводы, опираясь на проанализированные источники и литературу.

«Хорошо» выставляется в том случае, если тема курсовой раскрыта полностью, но имеются замечания по оформлению курсовой или студент в процессе защиты не смог ответить на все поставленные вопросы, входящие в предмет исследования курсовой работы.

«Удовлетворительно» выставляется в том случае, если тема курсовой раскрыта не полностью, имеются замечания по оформлению, студент в процессе защиты не смог ответить на все поставленные вопросы, входящие в предмет исследования курсовой работы, плохо ориентировался в теме.

«Неудовлетворительно» выставляется в том случае, если работа не соответствует предъявляемым требованиям.

VII. Материально-техническое обеспечение

Для аудиторной работы

Аудитория кафедры физической химии. № 408, 170002, Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35	Столы, стулья, доска учебная, стационарный мультимедийный проектор, стационарный экран УФ-спектрометр Specord-VIS M40, ИК-спектрометр Specord-M75, лабораторный фотоэлектрический абсорциометр-нефелометр ЛМФ-69, рефрактометр ИРФ-454 Б2М, ареометры, спектрофотометр ПромЭкоЛаб ПЭ-5400В, анализатор вольтамперометрический АКВ-07МК, магнитные мешалки, лабораторный кондуктометр Анион 4120, весы аналитические лабораторные ВЛ-120 и ВК-600, весы технические лабораторные ВЛТЭ-1100, дистиллятор UD-1100, сушильный шкаф, вытяжной шкаф, потенциометр постоянного тока, барометр анероид, электрическая плитка, рН-метры 410, стационарный мутномер НАСН 2100NIS, лабораторные столы, лабораторная химическая посуда, реактивы MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017
Компьютерный класс 4В (помещение для самостоятельной работы) 170002, Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35	Столы, стулья, мультимедийный проектор, стационарный экран, Компьютеры MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017; MS Windows 10 Enterprise – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017; Google Chrome – бесплатное ПО. Origin 8.1 Sr2 договор №13918/М4 от 24.09.2009 с ЗАО «СофтЛайн Трейд»; ISIS Draw 2.4 Standalone – бесплатное ПО HyperChem - акт предоставления прав № Tr008313 от 20.02.2016 г

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			