

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
физической химии



А.В. Введенский
31.08.2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ОД.5 Квантовая химия

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
- 2. Профиль подготовки/специализации:** без специализации
- 3. Квалификация (степень) выпускника:** специалист.
- 4. Форма образования:** Очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** Физической химии
- 6. Составители программы:** Кондрашин Владимир Юрьевич, к.х.н., доцент
- 7. Рекомендована:** НМС химического факультета от 26.06.17, протокол № 6

8. Учебный год: 2019 / 2020

Семестр: 5

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цель: Раскрыть принципы квантово-химического описания строения химических частиц (атомов, молекул, полимеров); научить интерпретировать результаты квантово-химических расчетов химических частиц; дать представление о возможностях квантово-химического моделирования.

Задачи: Познакомить студентов с приближенными методами квантовой механики; с решением простейших квантово-механических задач; с основами метода и математическим аппаратом метода молекулярных орбиталей; с полуэмпирическими методами квантовой химии; дать понятие о квантово-химическом моделировании как методе химических исследований.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Вариативная часть Блока 1. Обязательная дисциплина.

Наиболее важные предшествующие дисциплины: Математика, Физика, Неорганическая химия. Для изучения данной дисциплины студент должен знать декартову и сферическую системы координат; уметь дифференцировать и интегрировать элементарные функции; знать специальные интегралы; знать основы классической механики, молекулярной физики, теории электричества, оптики, атомной и ядерной физики; иметь представления о строении ряда молекул неорганической и органической химии.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	<p>Знать: Основные приближения, используемые в квантовой химии; метод самосогласованного поля и его приложения к задачам квантовой химии; возможности неэмпирических и основных полуэмпирических методов квантовой химии, а также квантово-химического моделирования.</p> <p>Уметь: Решать несложные квантово-механические задачи; интерпретировать результаты квантово-механических расчетов движения частиц в заданных силовых полях; интерпретировать результаты квантово-химических расчетов молекул в общехимических терминах; делать выбор оптимального метода квантовой химии для расчета электронного строения конкретной молекулы.</p> <p>Иметь навыки практического использования законов квантовой механики и результатов квантово-химических расчетов молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ.</p>
ПК-3	Владение системой фундаментальных химических понятий	<p>Знать: Квантово-механические аналоги классических химических понятий (химической связи, кратности связи, полярности связи и др.).</p> <p>Уметь: Получать необходимую квантово-химическую информацию о строении и свойствах химических</p>

		<p>веществ; использовать данные об электронном строении отдельных молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ и их реакционной способности.</p> <p>Иметь навыки в выборе необходимых положений квантовой механики и методов квантовой химии для решения поставленных химических и физико-химических задач</p>
ПК-4	Способность применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов	<p>Знать: основные законы и формулы квантовой химии.</p> <p>Уметь: применять основные естественнонаучные законы при обсуждении экспериментальных результатов</p> <p>Иметь навыки использования знаний теоретических основ квантовой химии к полученным результатам</p>

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час — 4/144.
Форма промежуточной аттестации: Экзамен.

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		5 семестр	№ семестра	...
Аудиторные занятия	68	68		
в том числе: лекции	34	34		
практические	—	—		
лабораторные	34	34		
Самостоятельная работа	40	40		
Контроль	36	36		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – _ час.)		Экзамен		
Итого:	144	144		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Введение	Предмет изучения и задачи квантовой химии. История становления и развития. Проблема многих тел и способы ее решения в квантовой химии. Неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии.
1.2	Движение в центральном поле. Атом водорода.	Общее рассмотрение движения в центральном поле. Полный набор динамических переменных. Задача о

		жестком квантовом ротаторе. Квантовые числа, волновые функции и энергетический спектр жесткого квантового ротатора. Уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Радиальные и сферические функции. Квантовые числа n , l и m . Энергетический спектр атома водорода. Атомные орбитали. Электрический ток в атоме водорода. Пространственное квантование вектора момента импульса электрона.
1.3	Волновая функция системы тождественных частиц	Спин электрона. Оператор спина электрона. Спиновые функции. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления. Принцип тождественности частиц. Бозоны и фермионы. Волновая функция системы тождественных частиц. Волновая функция системы электронов.
1.4	Уравнение Шредингера для молекулы	Уравнение Шредингера для многоэлектронной молекулы. Проблема многих тел. Адиабатическое приближение.
1.5.	Метод самосогласованного поля	Необходимость и сущность одноэлектронного приближения. Метод самосогласованного поля Хартри и его недостатки. Учет тождественности электронов. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении (Дж.Слэтер). Энергия многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении. Вариационный принцип в квантовой механике. Уравнения самосогласованного поля Хартри-Фока для молекул с замкнутой электронной оболочкой и метод их решения. Пределы применимости метода Хартри-Фока. Понятие об электронной корреляции.
1.6	Многоэлектронный атом	Квантовые числа многоэлектронных атомов. Энергетический спектр.
1.7	Метод молекулярных орбиталей с применением метода самосогласованного поля	Основные положения метода МО. Приближение МО ЛКБФ (МО ЛКАО). Выбор базисных функций для расчета. Уравнения Хартри-Фока на конечном базисе: метод ССП МО ЛКАО (метод Рутана). Пределы применимости метода Рутана. Энергия корреляции. Понятие о методе конфигурационного взаимодействия.
1.8	Полуэмпирические методы квантовой химии	Необходимость и принципы упрощения вычислительной процедуры в методе МО ЛКАО. Валентное приближение. π -Электронное приближение. Приближение нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Понятие о полуэмпирических методах ССП МО ЛКАО и полуэмпирических несамосогласованных методах МО ЛКАО. Расширенный метод Хюккеля (РМХ) и простой метод Хюккеля (МОХ). Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.
1.9	Методы рассмотрения некоторых квантово-химических систем. Квантово-химическое	Обоснование валентного штриха в молекулах методами квантовой химии. «Классические» и «неклассические» молекулы. Концепция гибридизация атомных орбиталей в методе МО. Обоснование модели независимой σ -связи в предельных

	моделирование.	углеводородах. Сопряженные π -электронные системы и квантово-химические принципы их рассмотрения. Понятие о квантово-химическом моделировании. Обзор квантово-химических программ.
2. Лабораторные работы		
2.1	Движение в центральном поле. Атом водорода.	Рассмотрение решения уравнения Шредингера для жесткого ротатора. Получение физической информации из решения уравнения Шредингера (графические работы). Рассмотрение решения уравнения Шредингера для атома водорода. Получение физической информации из решения уравнения Шредингера (графические работы).
2.2	Волновая функция системы тождественных частиц.	Построение волновых функций системы тождественных бозонов и системы тождественных фермионов
2.3	Уравнение Шредингера для молекулы.	Построение молекулярного уравнения Шредингера для малых молекул. Проблема многих тел. Молекулярное уравнение Шредингера в адиабатическом приближении. Понятие одноэлектронного приближения.
2.4	Метод самосогласованного поля.	Вариационный принцип в квантовой механике. Уравнения Хартри-Фока, общий метод решения. Точность расчета многоэлектронных систем методом Хартри-Фока.
2.5	Уравнения Хартри-Фока на конечном базисе. Метод Рутана.	Преобразования уравнений Хартри-Фока при представлении молекулярных орбиталей в виде приближения ЛКАО. Рассмотрение расчета неорганической молекулы (N_2 , CO и т.п.) методом Рутана. Проблема связывающих и разрыхляющих орбиталей (графические работы).
2.6	Полуэмпирические методы квантовой химии.	Приближения, используемые в полуэмпирических методах квантовой химии. «Табель о рангах» полуэмпирических методов. Рассмотрение расчета органической молекулы (C_2H_4 , CH_2O) расширенным методом Хюккеля или ППДП/2. Проблема возможности построения классической формулы (графические работы).
2.7.1	Методы рассмотрения некоторых квантово-химических систем.	Обоснование валентного штриха в молекулах методами квантовой химии. «Классические» и «неклассические» молекулы.
2.7.2	Методы рассмотрения некоторых квантово-химических систем.	Концепция гибридизация атомных орбиталей в методе МО. Обоснование модели независимой σ -связи в предельных углеводородах. Сопряженные π -электронные системы и квантово-химические принципы их рассмотрения.
2.8	Квантово-химическое моделирование.	Ознакомление с возможностями квантово-химического моделирования в различных областях теоретической химии

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		Лекции	Контроль	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Введение	2	—	—	—	2
2	Движение в центральном поле. Атом водорода.	6	6	6	6	24
3	Волновая функция системы тождественных частиц	4	4	4	4	16
4	Уравнение Шредингера для молекулы	2	2	2	2	8
5	Метод самосогласованного поля	6	6	6	6	24
6	Многэлектронный атом	2	2	2	4	10
7	Метод молекулярных орбиталей	4	4	4	4	16
8	Полуэмпирические методы квантовой химии	4	2	2	4	12
9	Методы рассмотрения некоторых квантово-химических систем. Квантово-химическое моделирование.	4	10	8	10	32
	Итого:	34	36	34	40	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Для освоения курса лекций необходимо ознакомиться с презентационными материалами по данному курсу. Они размещены на сайте www.moodle.vsu.ru. Там же представлен план семинарских занятий.

Необходимо иметь хотя бы основную рекомендуемую литературу, а из числа дополнительной литературы - Сборник задач по квантовой механике : для студ. 2 курса д/о и 4 курса в/о хим. фак. / сост. : Е. М. Авербах, В. Ю. Кондрашин, В. Р. Пшестанчик. — Воронеж, 2001. — 41 с.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия / А.И. Ермаков : учеб. для студ. хим. фак. ун-тов. – М.: Юрайт, 2010. – 555 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
-------	----------

2	Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. Пособие / В.И. Барановский. — М. : Академия, 2008 .— 382 с.
3	Минкин В.И. Теория строения молекул : учеб. пособие для студ. вузов / В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев .— 2-е изд., перераб. и доп. — Ростов н/Д : Феникс, 1997 .— 557 с.
4	Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. для студ. хим. фак. ун-тов / Н.Ф.Степанов .— М. : Мир, 2006.— 518 с.
5	Сборник задач по квантовой механике : для студ. 2 курса д/о и 4 курса в/о хим. фак. / сост. : Е. М. Авербах, В. Ю. Кондрашин, В. Р. Пшестанчик. — Воронеж, 2001. — 41 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
6	Зональная научная библиотека www.lib.vsu.ru

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия / А.И. Ермаков : учеб. для студ. хим. фак. ун-тов. — М.: Юрайт, 2010. — 555 с.
2	Сборник задач по квантовой механике : для студ. 2 курса д/о и 4 курса в/о хим. фак. / сост. : Е. М. Авербах, В. Ю. Кондрашин, В. Р. Пшестанчик. — Воронеж, 2001. — 41 с.

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Сборник задач. Таблицы производных и интегралов. Таблицы специальных интегралов. Хорошая доска в аудитории. Программируемый научный калькулятор.

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС (средства оценивания)
ОПК-1	<p>Знать: Основные приближения, используемые в квантовой химии; метод самосогласованного поля и его приложения к задачам квантовой химии; возможности неэмпирических и основных полуэмпирических методов квантовой химии, а также квантово-химического моделирования.</p>	1.1-1.9, 2.1-2.4, 2.8	Практическое задание
	<p>Уметь: Решать несложные квантово-механические задачи, относящиеся к атому водорода и жесткому ротатору; интерпретировать результаты квантово-механических расчетов движения частиц в заданных силовых полях; интерпретировать результаты квантово-химических расчетов молекул в общехимических терминах; делать выбор оптимального метода квантовой химии для расчета электронного строения конкретной молекулы.</p>	1.1-1.8, 2.1-2.6	Контрольная работа
	<p>Иметь навыки практического использования законов квантовой механики и результатов квантово-химических расчетов молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ.</p>	1.1-1.9, 2.1-2.8	Практическое задание
ПК-3 Владение системой фундаментальных химических понятий	<p>Знать: Квантово-механические аналоги классических химических понятий (химической связи, кратности связи,</p>	1.1-1.9, 2.5-2.7	Контрольная работа

	полярности связи и др.).		
	Уметь: Получать необходимую квантово-химическую информацию о строении и свойствах химических веществ; использовать данные об электронном строении отдельных молекул для предсказания макроскопических свойств химических веществ и их реакционной способности.	1.1-1.9, 2.5-2.7	Практическое задание
	Иметь навыки в выборе необходимых методов квантовой химии для решения поставленных химических и физико-химических задач:	1.1-1.9, 2.5-2.7	Практическое задание
ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов	Знать: основные законы и формулы квантовой химии.	1.1-1.9, 2.1-2.8	Практическое задание
	Уметь: применять основные естественнонаучные законы при обсуждении экспериментальных результатов	1.1-1.9, 2.1-2.8	Практическое задание
	Иметь навыки использования знаний теоретических основ квантовой химии к полученным результатам	1.1-1.9, 2.1-2.8	Практическое задание
Промежуточная аттестация			КИМ

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Для оценивания результатов обучения на экзамене используются следующие показатели:

1. Владение понятийным аппаратом квантовой механики и квантовой химии; владение теоретическими основами данной дисциплины; умение мыслить в терминах квантовой науки; способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.
2. Умение использовать математический аппарат квантовой механики и квантовой химии для решения практических задач.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом квантовой механики и квантовой химии, умеет мыслить в терминах квантовой науки; способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач в области квантовой химии.	Повышенный уровень	Отлично
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует только одному из перечисленных показателей, но обучающийся дает правильные ответы на дополнительные вопросы. Содержатся отдельные недочеты при решении задач на вычисление (дифференцирование, интегрирование).	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся частично владеет теоретическими основами дисциплины, показывая фрагментарное владение программой курса. Неуверенно применяет теоретические знания для решения практических задач в области квантовой химии. Не умеет решать задачи на вычисления.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допуская при ответе грубые ошибки. К освоению учебной дисциплины «Строение вещества» не подготовлен.	–	Неудовлетворительно

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к экзамену:

1. Понятие волновой функции. Свойства волновой функции.
2. Уравнение Шредингера как постулат квантовой механики. Основные свойства уравнения.
3. Теоремы о собственных функциях коммутирующих операторов.
4. Условие, при котором несколько динамических переменных могут быть измерены одновременно. Понятие полного набора физических величин.
5. Операторы динамических переменных M_x, M_y, M_z, M, M^2 . Принцип соответствия.
6. Функция Гамильтона. Оператор Гамильтона. Оператор полной энергии.
7. Понятие стационарного состояния. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.
8. Уравнение Шредингера и закон сохранения числа частиц. Вектор плотности потока вероятности.
9. Одномерное свободное движение. Волна де Бройля.
10. Движение частицы в трехмерном потенциальном «ящике».

11. Общая характеристика движения в центральном поле.
12. Задача о жестком квантовом ротаторе.
13. Уравнение Шредингера для атома водорода. Принцип решения. Энергетический спектр атома водорода.
14. Волновые функции электрона атома водорода. Распределение электронной плотности в атоме водорода.
15. Действительные орбитали атома водорода.
16. Физический смысл квантового числа l в атоме водорода.
17. Физический смысл квантового числа m_l в атоме водорода.
18. Токи в атоме водорода. Гиромагнитное отношение.
19. Спин микрочастицы. Оператор спина электрона. Спиновые функции электрона.
20. Волновая функция системы частиц. Принцип тождественности частиц.
21. Волновая функция системы тождественных частиц для бозонов и для фермионов.
22. Уравнение Шредингера для молекулы. Адиабатическое приближение.
23. Понятие об одноэлектронном приближении. Метод ССП Хартри и его недостатки.
24. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении. Детерминант Слэтера.
25. Энергия многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении.
26. Вариационный принцип в квантовой механике.
27. Метод ССП Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока для замкнутых электронных оболочек.
28. Основные положения метода молекулярных орбиталей. Приближение МО ЛКАО.
29. Выбор базисных функций в методе МО ЛКАО. Функции Слэтера и функции Гаусса.
30. Уравнения ССП на конечном базисе. Метод Рутана.
31. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. Валентное приближение. Расширенный метод Хюккеля.
32. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. π -Электронное приближение. Простой метод Хюккеля (метод МОХ) и его возможности.
33. Гибридизация атомных орбиталей в методе МО.
34. Теорема Гельмана-Фейнмана и критерий прочности химической связи.

19.3.2 Перечень практических заданий

1. Назвать основные постулаты квантовой механики.
2. Назвать полный набор физических величин в предложенной квантовой системе.
3. Найти коэффициент нормировки заданной волновой функции при заданных граничных условиях.
4. Извлечь физическую информацию из предложенной волновой функции.
5. Записать уравнение Шредингера для одной частицы, движущейся в заданном силовом поле (стационарные состояния).

6. Вычислить энергию частицы, движущейся в заданном силовом поле, на основе волновой функции.
7. Пояснить смысл пространственного квантования вектора момента импульса электрона, движущегося в центральном поле.
8. Доказать отсутствие электрического тока вдоль меридиана в атоме водорода.
9. Вычислить величину гиромагнитного отношения для электрона атома водорода.
10. Дать частичное или полное исследование структуры электронного облака атома водорода по предложенной атомной орбитали
11. Изобразить графически функции плотности вероятности нахождения электрона атома водорода:
 $|\psi(r, \theta, \varphi)|^2$, $r^2 R^2(n, l)$ и $|Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2$.
12. Изобразить энергетическую диаграмму электрона в атоме водорода с учетом кратности вырождения энергетических уровней.
13. Вычислить средние значения потенциальной и кинетической энергий электрона в атоме водорода.
14. Построить диаграмму пространственного квантования вектора момента импульса электрона атома водорода.
15. Изобразить энергетическую диаграмму многоэлектронного атома с учетом кратности вырождения энергетических уровней электронов.
16. Записать уравнение Шредингера для предложенной молекулы.
17. Записать детерминант Слэтера для электронной оболочки молекулы.
18. Записать формулу для энергии многоэлектронной молекулы в одноэлектронном приближении.
19. Записать уравнение Хартри-Фока для предложенной многоэлектронной молекулы.
20. Записать уравнения Рутана для предложенной многоэлектронной молекулы.
21. На основе списка молекулярных орбиталей двухатомной молекулы установить тип симметрии каждой орбитали.
22. Преобразованием детерминанта Слэтера получить для молекулы CH_4 локализованные молекулярные орбитали.
23. На основе списка молекулярных орбиталей несложной молекулы показать возможность (или невозможность) построения ее классической структурной формулы.
24. Указать источники ошибок расчета полной энергии молекулы по методу Рутана.
25. Используя следствие из теоремы Гельмана-Фейнмана, сравнить прочность связи в двух двухатомных молекулах.
- 26*. Высказать соображения по квантово-химическому расчету геометрической структуры активированного комплекса в реакции между двумя простыми веществами.

19.3.4 Перечень заданий для контрольных работ

1. Найти коэффициент нормировки заданной волновой функции.
2. Вычислить вероятность пребывания частицы в указанном пространстве на основе известной волновой функции.
3. Вычислить плотность потока вероятности частицы на основе известной волновой функции.

4. Вычислить плотность вероятности нахождения частицы в указанной точке пространства (в декартовой и в сферической системе координат).
5. Рассчитать среднее значение динамической переменной в заданном квантовом состоянии.
6. Назвать полный набор физических величин в заданном квантовом состоянии.
7. Записать уравнение Шредингера для предложенной молекулы.
7. Изобразить графически функции плотности вероятности нахождения электрона атома водорода:
 $|\psi(r, \theta, \varphi)|^2$, $r^2 R^2(n, l)$ и $|Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2$.
8. Построить диаграмму пространственного квантования вектора момента импульса электрона атома водорода.
7. Дать определение понятиям молекулярной орбитали, спиновой функции, спин-орбитальной функции. Построить детерминант Слэтера для конкретной многоэлектронной системы.
8. На основе списка молекулярных орбиталей двухатомной молекулы установить тип симметрии каждой орбитали.
9. Преобразованием детерминанта Слэтера получить для молекулы CH_4 локализованные молекулярные орбитали.
10. Используя следствие из теоремы Гельмана-Фейнмана, сравнить прочность связи в нескольких двухатомных молекулах.

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

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в формах устного опроса (фронтальная беседа) и письменных работ (выполнение практико-ориентированных заданий и одна контрольная работа). Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и оценить степень сформированности навыков. При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.