

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
 «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»  
 Химико-технологический институт

УТВЕРЖДАЮ  
 Проректор по учебной работе

\_\_\_\_\_ С.Т. Князев

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ**  
**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Модуль</b> Квантово-химическое моделирование органических соединений	<b>Код модуля</b> 1128758 Учебный план № 5123 (3) очн. №5492 (3) заочн.
<b>Образовательная программа</b> Химическая технология неорганических, органических веществ, природных энергоносителей и лекарственных препаратов	<b>Код ОП</b> 18.03.01/01.01
<b>Траектория образовательной программы (ТОП)</b>	ТОП4 Химическая технология органических веществ
<b>Направление подготовки</b> Химическая технология	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 18.03.01
<b>Уровень подготовки</b> бакалавриат	
<b>ФГОС ВО</b>	<b>Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО:</b> № 1005 от 11.08.2016 г.

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Кафедра</b>	<b>Подпись</b>
1	Нейн Юлия Ивановна	к.х.н.	доцент	Кафедра технологии органического синтеза	

**Руководитель проектной группы модуля**

Ю.И.Нейн

**Рекомендовано учебно-методическим советом  
химико-технологического института**

Председатель учебно-методического совета  
Протокол № 8 от "10" октября 2018 г.

А.Б. Даринцева

**Согласовано:**

Дирекция образовательных программ

Р.Х. Токарева

**Руководитель образовательной программы (ОП),  
для которой реализуется модуль**

Т.Н. Останина

## 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ

### 1.1. Объем модуля, 9 з.е.

### 1.2. Аннотация содержания модуля

Модуль «Квантово-химическое моделирование органических соединений» относится к вариативной части по выбору студента ОП и является обязательным для освоения по ТОП4 Химическая технология органических веществ.

Модуль посвящен изучению основам квантовой химии и особенностей электронного строения органических соединений, их оптических свойств и реакционной способности. На лабораторных работах приобретаются практические навыки работы с оптическими приборами, анализ спектральных характеристик и их зависимость от структуры. Особенностью модуля является изучение теории строения атома, молекул и теории связей.

## 2. СТРУКТУРА МОДУЛЯ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ ПО ДИСЦИПЛИНАМ

Наименования дисциплин с указанием, к какой части образовательной программы они относятся: базовой (Б), вариативной – по выбору вуза (ВВ), вариативной - по выбору студента (ВС).	Семестр изучения	Объем времени, отведенный на освоение дисциплин модуля							
		Аудиторные занятия, час.				Самостоятельная работа, включая все виды текущей аттестации, час.	Промежуточная аттестация (зачет, экзамен), час.	Всего по дисциплине	
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Всего			Час.	Зач. ед.
По очной форме обучения									
1. (ВС) Основы квантовой химии и хемоинформатики	7	34	17	17	68	112	Экзамен, 18	180	5
2. (ВС) Основы теории цветности органических соединений	8	16		32	48	96	Зачет, 4	144	4
<b>Всего на освоение модуля</b>		40	17	49	116	208	22	324	9
По заочной форме обучения									
3. (ВС) Основы квантовой химии и хемоинформатики	9	6	4	8	18	162	Экзамен, 18	180	5
4. (ВС) Основы теории цветности органических соединений	9	6		8	14	130	Зачет, 4	144	4
<b>Всего на освоение модуля</b>		12	4	16	32	292	22	324	9

## 3. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИН В МОДУЛЕ

3.1.	Пререквизиты и постреквизиты в модуле	Основы квантовой химии и хемоинформатики; Основы теории цветности органических соединений
3.2.	Кореквизиты	

#### 4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ МОДУЛЯ

##### 4.1. Планируемые результаты освоения модуля и составляющие их компетенции

Коды ОП, для которых реализуется модуль	Планируемые в ОХОП результаты обучения -РО, которые формируются при освоении модуля	Компетенции в соответствии с ФГОС ВО, а также дополнительные из ОХОП, формируемые при освоении модуля
18.03.01/01.01	РО-ТОП4-2 Применять знания об основных классах, строении, химических свойствах при выборе оптимального метода синтеза органических соединений с заданными физико-химическими и прикладными свойствами	<ul style="list-style-type: none"> <li>- готовностью использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире (ОПК-3);</li> <li>- готовностью использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности (ПК-17);</li> <li>- способность использовать знания об основных классах, строении, химических свойствах органических соединений, методах получения основных видов продукции органического синтеза, области их применения в промышленности и народном хозяйстве; выбирать рациональный путь синтеза органических соединений с заданными физико-химическими и прикладными свойствами, отвечающими требованиям заданных стандартов качества (ДПК-3-ТОП4);</li> <li>- готовность использовать знания об организации проведения технологического процесса с учётом новейших достижений в области химического синтеза органических соединений (ДПК-4-ТОП4);</li> </ul>
18.03.01/01.01	РО-ТОП4-4 Самостоятельно использовать математическое моделирование и информационные технологии в профессиональной деятельности	<ul style="list-style-type: none"> <li>- владением основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией (ОПК-5);</li> <li>- готовность использовать теоретические основы квантовой механики для изучения строения и свойств химических соединений, реакционной способности, кинетики и механизма химических реакций (ДПК-11-ТОП4);</li> <li>- готовность использовать прикладные пакеты программ для решения конкретных исследовательских и инженерно-технических задач в области химической технологии получения органических веществ и полимеров (ДПК-12-ТОП4);</li> <li>- способность применять методы математической статистики для обработки результатов активных и</li> </ul>

		пассивных экспериментов, использовать пакеты прикладных программ для моделирования химико-технологических процессов (ДПК-13-ТОП4);
--	--	--

#### 4.2. Распределение формирования компетенций по дисциплинам модуля

Дисциплины модуля		ОПК-3	ОПК-5	ПК-17	ДПК-3-ТОП4	ДПК-4-ТОП4	ДПК-11-ТОП4	ДПК-12-ТОП4	ДПК-13-ТОП4
1	(ВС) Основы квантовой химии и хемоинформатики	*	*				*	*	*
2	(ВС) Основы теории цветности органических соединений			*	*	*			

#### 5. ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО МОДУЛЮ

5.1. Весовой коэффициент значимости промежуточной аттестации по модулю:  
Не предусмотрен.

5.2. Форма промежуточной аттестации по модулю:  
Не предусмотрена.

5.3. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по модулю  
(Приложение 1)

**ПРИЛОЖЕНИЕ 1**  
**к рабочей программе модуля**  
**"Квантово-химическое моделирование органических соединений"**

**5.3. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО МОДУЛЮ**

**5.3.1. ОБЩИЕ КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО МОДУЛЮ**

Система критериев оценивания результатов обучения в рамках модуля опирается на три уровня освоения: пороговый, повышенный, высокий.

<b>Компоненты компетенций</b>	<b>Признаки уровня освоения компонентов компетенций</b>		
	<b>пороговый</b>	<b>повышенный</b>	<b>высокий</b>
<b>Знания</b>	Студент демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем самостоятельного воспроизведения и применения информации.	Студент демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	Студент может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.
<b>Умения</b>	Студент умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое использование умений (технологий)
<b>Личностные качества</b>	Студент имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Студент имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Студент имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

## **5.3.2. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО МОДУЛЮ**

### **5.3.2.1. Перечень примерных вопросов для интегрированного экзамена по модулю.**

Не предусмотрено.

### **5.3.2.2. Перечень примерных тем итоговых проектов по модулю.**

Не предусмотрено.

**6. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ МОДУЛЯ**

<b>Номер листа изменений</b>	<b>Номер протокола заседания проектной группы модуля</b>	<b>Дата заседания проектной группы модуля</b>	<b>Всего листов в документе</b>	<b>Подпись руководителя проектной группы модуля</b>



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»  
Химико-технологический институт

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И ХЕМОИНФОРМАТИКИ**

<b>Перечень сведений о рабочей программе дисциплины</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Модуль</b> Квантово-химическое моделирование органических соединений	<b>Код модуля</b> 1128758
<b>Образовательная программа</b> Химическая технология неорганических, органических веществ, природных энергоносителей и лекарственных препаратов	<b>Код ОП</b> 18.03.01/01.01
<b>Направление подготовки</b> Химическая технология	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 18.03.01
<b>Уровень подготовки</b> бакалавриат	
<b>ФГОС ВО</b>	<b>Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО:</b> № 1005 от 11.08.2016 г.

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Кафедра</b>	<b>Подпись</b>
1	Нейн Юлия Ивановна	к.х.н.	доцент	Кафедра технологии органического синтеза	

**Руководитель модуля**

Ю.И. Нейн

**Рекомендовано учебно-методическим советом Химико-технологического института**

Председатель учебно-методического совета  
Протокол № 8 от "10" октября 2018 г.

А.Б. Даринцева

**Согласовано:**

Дирекция образовательных программ

Р.Х. Токарева

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ «ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И ХЕМОИНФОРМАТИКИ»

## 1.1. Аннотация содержания дисциплины

Дисциплина посвящена изучению основам квантовой химии и хемоинформатики. Программа включает разделы, связанные с основными положениями квантовой механики и методами квантово-химических расчетов молекул. Особенностью курса является теоретическое изучение теории строения атома, молекул и теории связей. Курс "Основы квантовой химии и хемоинформатики" является базовой дисциплиной в теоретической подготовке студентов к инженерной деятельности в области химических технологий. На практических занятиях приобретаются навыки решения основных квантово-механических задач. На лабораторных работах приобретаются навыки работы в основных компьютерных программах квантово-химических расчетов.

## 1.2. Язык реализации программы - русский

## 1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины

Результатом обучения в рамках дисциплины является формирование у студента следующих компетенций:

- готовностью использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире (ОПК-3); владением основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией (ОПК-5)
- готовность использовать теоретические основы квантовой механики для изучения строения и свойств химических соединений, реакционной способности, кинетики и механизма химических реакций (ДПК-11-ТОП4);
- готовность использовать прикладные пакеты программ для решения конкретных исследовательских и инженерно-технических задач в области химической технологии получения органических веществ и полимеров (ДПК-12-ТОП4); способность применять методы математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов, использовать пакеты прикладных программ для моделирования химико-технологических процессов (ДПК-13-ТОП4).

В результате освоения дисциплины студент должен:

### Знать:

- роль квантовой химии как теоретического фундамента современной химии,
- основные постулаты и методы квантово-химических расчетов,
- требования, предъявляемые к расчетным методам,
- методы решения уравнения Шредингера,
- свойства электронной структуры атомов и молекул,
- о границах применимости законов и теорий квантовой механики и квантовой химии.

### Уметь:

- применять квантово-механические представления и модели для анализа химических проблем;
- пользоваться вычислительными компьютерными программами.

### Демонстрировать навыки и опыт деятельности:

- работы стандартными вычислительными методами квантовой химии,
- владеть научной и справочной литературой по квантовой химии.

## 1.4. Объем дисциплины

По очной форме обучения

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)	
				7
1.	<b>Аудиторные занятия</b>	<b>68</b>	<b>68</b>	<b>68</b>
2.	Лекции	34	34	34
3.	Практические занятия	17	17	17
4.	Лабораторные работы	17	17	17
5.	<b>Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей аттестации</b>	<b>112</b>	<b>10,2</b>	<b>112</b>
6.	<b>Промежуточная аттестация</b>	<b>18</b>	<b>2,33</b>	<b>Э</b>
7.	<b>Общий объем по учебному плану, час.</b>	<b>180</b>		<b>180</b>
8.	<b>Общий объем по учебному плану, з.е.</b>	<b>5</b>		<b>5</b>

По заочной форме обучения

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)	
				9
1.	<b>Аудиторные занятия</b>	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>18</b>
2.	Лекции	6	6	6
3.	Практические занятия	4	4	4
4.	Лабораторные работы	8	8	8
5.	<b>Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей аттестации</b>	<b>162</b>	<b>2,7</b>	<b>162</b>
6.	<b>Промежуточная аттестация</b>	<b>18</b>	<b>2,33</b>	<b>Э</b>
7.	<b>Общий объем по учебному плану, час.</b>	<b>180</b>		<b>180</b>
8.	<b>Общий объем по учебному плану, з.е.</b>	<b>5</b>		<b>5</b>

## 2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Код раздела	Раздел дисциплины	Содержание
P1	Введение	Предмет квантовой химии и ее роль в описании химически. Операторы координат, импульсов, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона. $x$ явлений и процессов. Принципы квантовой механики. Стационарное уравнение Шредингера, его аналогия с уравнениями классической механики. Зависящее от времени уравнение Шредингера.
P2	Основные задачи квантовой механики	Решение уравнения Шредингера для задачи о движении свободной частицы и задачи о движении частицы в потенциальном одномерной яме, трехмерном ящике, по окружности, прохождение электрона через потенциальный барьер, туннельный эффект. Связь квантово-механических задач с химией.
P3	Решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома	Атом водорода, решение уравнения Шредингера в сферических координатах, вид волновой функции. Физический смысл квантовых чисел. Зависимость радиальной составля-

		<p>ющей волновой функции от расстояния между ядром и электроном при различных квантовых числах. Атомная система единиц. Анализ энергетического спектра водородоподобного атома. Правило отбора для электронных переходов. Водородоподобный атом во внешнем магнитном поле, критерий сильного и слабого полей. Эффекты Зеемана и Пашена-Бака. Расщепления энергетических уровней в слабом и сильном магнитных полях.</p>
<b>P4</b>	Решение уравнения Шрёдингера для атома гелия и других многоэлектронных атомов	<p>Многоэлектронные атомы. Трудности решения квантово-механической задачи для системы многих электронов. Одноэлектронное приближение. Орбитали слейтеровского и гауссова типа Правила Слейтера для вычисления констант экранирования. Основные базисные наборы АО: минимальный, дабл-дзета, поляризационный, дополненный диффузными функциями. Приближение независимых электронов. Приближение самосогласованного поля (ССП). Вариационный принцип, решение вариационной задачи для атома гелия в базисе слейтеровских функций. Теория возмущений, приближение нулевого и первого порядка. Энергия атома гелия в рамках теории возмущений.</p>
<b>P5</b>	Теория химической связи	<p>Оператор Гамильтона и волновая функция для молекулярных систем. Адиабатическое приближение в теории химической связи. Разделение электронного и ядерного движений в уравнении Шрёдингера. Поверхность потенциальной энергии молекулярной системы, равновесная ядерная конфигурация (молекулярная структура) и ее характеристики – длины химических связей и валентные углы. Вариационный принцип – сущность основной теоремы для произвольной пробной функции. Вариационный принцип Ритца – пробная функция как линейная комбинация известных функций с коэффициентами в качестве вариационных параметров. Реализация метода Ритца для бинарной пробной функции. Метод ВС Гайтлера-Лондона, Полинга-Слейтера, концепции гибридизации и резонанса в терминах квантовой механики. Гомоядерные двухатомные молекулы, вычисление энергии их МО с помощью вариационного принципа. Молекулярные квантовые числа. Метод МО – основные положения и постановка задачи. Одноэлектронное приближение, понятие молекулярной орбитали. Приближение МО ЛКАО в методе Хартри-Фока, уравнения Рутана и методика их решения. Молекула водорода. Решение задачи методами МО и ВС. Связывающие и разрыхляющие орбитали. Теорема Гельмана-Фейнмана Электронная конфигурация молекулы и правила ее составления. Классификация химических связей по механизму их образования (обменный и донорно-акцепторный) и по способу перекрытия валентных АО (<math>\sigma</math>, <math>\pi</math>, <math>\delta</math> – связи). Кратность связи. Понятие о насыщении химической связи, валентности, валентном состоянии атома.</p>
<b>P6</b>	Неэмпирические, полупэмпирические и эмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул	<p>Неэмпирические (<i>ab initio</i>) методы в квантовой химии. Уравнения Рутаана. Одно- и многоконфигурационный метод ССП Хартри-Фока-Рутаана (ССП ХФР). Ограниченный и неограниченный метод ССП ХФР. Метод полуэлектрона. Основные этапы решения задачи в методах <i>ab initio</i>. Комплекс</p>

		<p>программ неэмпирических расчетов GAUSSIAN. Составление задания для расчетов простейших молекул. Проблема выбора базиса АО. Оптимизация геометрии. Анализ заселенностей АО и порядков связей по Малликену. Преимущества и недостатки неэмпирических методов. Полуэмпирические методы ССП ХФР. Основные приближения полуэмпирических методов. Приближения валентных электронов, нулевого дифференциального перекрывания, расчет одно- и двухэлектронных интегралов. Метод CNDO. Метод INDO, расчет возбужденных состояний молекул. Методы MINDO, их модификации. Метод MNDO, приближение нулевого двухатомного дифференциального перекрывания. Методы AM1 и PM3. Возможности применения и сравнительный анализ различных полуэмпирических методов. Расчет физических характеристик молекул с помощью методов <i>ab initio</i> и полуэмпирических методов.</p>
--	--	--

### 3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ

#### 3.1. Распределение аудиторной нагрузки и мероприятий самостоятельной работы по разделам дисциплины







#### 4. ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ, САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

##### 4.1. Лабораторные работы

Для очной формы обучения

Код раздела	Номер работы	Наименование работы	Время на выполнение работы (час.)
P4	1	Работа с графическим редактором ChemDraw, Chem3D	3
P5	2	Подготовка задач для программы квантовой химии GAMESS	2
P5	3	Оптимизация геометрии молекул с помощью программы GAMESS	5
P6	4	Визуализация результатов квантово-химических расчетов	3
P6	5	Расчет колебательных и вращательных частот молекул и термодинамики	4

**Всего:** 17

Для заочной формы обучения

Код раздела	Номер работы	Наименование работы	Время на выполнение работы (час.)
P4	1	Работа с графическим редактором ChemDraw, Chem3D	2
P5	2	Подготовка задач для программы квантовой химии GAMESS	1
P5	3	Оптимизация геометрии молекул с помощью программы GAMESS	2
P6	4	Визуализация результатов квантово-химических расчетов	1
P6	5	Расчет колебательных и вращательных частот молекул и термодинамики	2

**Всего:** 8

##### 4.2. Практические занятия

Для очной формы обучения

Код раздела	Номер занятия	Тема занятия	Время на проведение занятия (час.)
P1	1	Операторы квантовой химии	4
P2	2	Решение задач квантовой механики	2
P2	3	Решение задач, связанных с прохождением частиц через потенциальные барьеры	2
P3	4	Атомные орбитали и их свойства	2
P3	5	Анализ энергетического спектра водородоподобного атома	2
P4	6	Орбитали Слейтера	2
P4	7	Двухатомные молекулы	3

**Всего:** 17

Для заочной формы обучения

Код раздела	Номер занятия	Тема занятия	Время на проведение занятия (час.)
P1	1	Операторы квантовой химии	1
P2	2	Решение задач квантовой механики	0,5
P2	3	Решение задач, связанных с прохождением частиц через потенциальные барьеры	0,5
P3	4	Атомные орбитали и их свойства	0,5
P3	5	Анализ энергетического спектра водородоподобного атома	0,5
P4	6	Орбитали Слейтера	0,5
P4	7	Двухатомные молекулы	0,5

Всего: 4

#### 4.3. Примерная тематика самостоятельной работы

##### 4.3.1. Примерный перечень тем домашних работ

Для очной формы обучения

Электрон, ускоряемый разностью потенциалов 1 В, падает на прямоугольную ступень высотой 2 эВ. Рассчитайте расстояние от границы ступени до точки, в которой  $\psi_2$  уменьшится в  $e$  раз.

Линейный полиен содержит  $2n$  атомов углерода. В рамках модели свободного электрона установите положение первой полосы поглощения полиена.

Рассчитайте вероятность туннельного эффекта для соединения  $\text{CH}_3(\text{CH}=\text{CH})_n\text{-CH}_2\text{-(CH}=\text{CH)}_n\text{CH}_3$ .

Получите четыре первых присоединенных полинома Лежандра.

Найдите, чему равен полином Лагерра с  $n=2$  и  $l=1$ .

Покажите, что полиномы Лагерра с различными  $n$  и  $l$  ортогональны.

Рассчитайте энергетические уровни и волновую функцию для молекулы хлористого водорода методом МО ЛКАО.

Покажите, используя метод МО ЛКАО, что молекула  $\text{Li}_2$  неустойчива.

##### 4.3.2. Примерный перечень тем графических работ

Не предусмотрено.

##### 4.3.3. Примерный перечень тем рефератов (эссе, творческих работ)

Не предусмотрено.

##### 4.3.4. Примерная тематика индивидуальных или групповых проектов

Не предусмотрено.

##### 4.3.5. Примерный перечень тем расчетных работ (программных продуктов)

Не предусмотрено.

##### 4.3.6. Примерный перечень тем расчетно-графических работ

Не предусмотрено.

##### 4.3.7. Примерный перечень тем курсовых проектов (курсовых работ)

Не предусмотрено.

##### 4.3.8. Примерная тематика контрольных работ

Для очной и заочной формы обучения

Расчет волновых функций молекулы водорода

Применение операторов квантовой химии

##### 4.3.8. Примерная тематика коллоквиумов

Не предусмотрено.

## 5. СООТНОШЕНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРИМЕНЯЕМЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ

Код раздела дисциплины	Активные методы обучения					Дистанционные образовательные технологии и электронное обучение						
	Проектная работа	Кейс-анализ	Деловые игры	Проблемное обучение	Командная работа	Другие (указать, какие)	Сетевые учебные курсы	Виртуальные практикумы и тренажеры	Вебинары и видеоконференции	Асинхронные web-конференции и семинары	Совместная работа и разработка контента	Другие (указать, какие)
P1				+								
P2		+		+								
P3				+								
P4				+								
P5		+								+		
P6					+				+			

### 6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ (Приложение 1)

### 7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ (Приложение 2)

### 8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (Приложение 3)

### 9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### 9.1. Рекомендуемая литература

##### 9.1.1. Основная литература

1. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учебное пособие [Электронный ресурс] / Цирельсон В. Г. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 496 с. Режим доступа: <URL:<https://e.lanbook.com/book/94104>>.

##### 9.1.2. Дополнительная литература

1. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : [Учеб. для вузов] / Н.Ф. Степанов. — М. : Мир : Изд-во моск. ун-та, 2001. — 519 с. (113 экз.)
2. Фларри Р.Л. Квантовая химия. Введение / Р.Л. Фларри ; пер. с англ. Э.Д. Германа, Е.Л. Розенберга ; под ред. А.М. Бродского. — Москва : Мир, 1985. — 472 с. (13 экз.)
3. Майер И. Избранные главы квантовой химии = / И. Майер ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. — Москва : Лаборатория знаний"" (ранее ""БИНОМ. Лаборатория знаний", 2017. — 384 с. Режим доступа: <URL:<https://e.lanbook.com/book/94102>>
4. Мелешина А.М. Курс квантовой химии : [учебное пособие для химических специальностей университетов] / А.М. Мелешина. — Воронеж : Издательство Воронежского университета, 1981. — 198 с. (98 экз.)
2. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам / Крашенинин В. И. ; Газенаур Е. Г. ; Кузьмина Л. В. — Кемерово : Кемеровский госу-

дарственный университет, 2012 .— 56 с. Режим доступа :  
<URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>>.

3. Цюлике, Л. Квантовая химия. Т. 1. Основы и общие методы / Л. Цюлике ; пер. с нем. М. М. Беренфельда, Н. П. Гамбарян, И. В. Станкевича ; под ред. М. В. Базилевского .— Москва : Мир, 1976 .— 512 с. (33 экз.).

## 9.2. Методические разработки

1. Квантово-химические расчеты органических молекул : метод. указания по проведению квантово-хим. расчетов в пакете программ CHEMOFFICE/CHEM3D курсов "Квантовая химия", "Компьютерные системы в химии и технологии" для студентов всех форм обучения специальностей 240901, 240401 / Урал. гос. техн. ун-т - УПИ ; [сост. В.А. Бакулев, Ю.Ю. Моржерин, Ю.О. Субботина ; науч. ред. В.С. Мокрушин] .— Екатеринбург : УГТУ-УПИ, 2006 .— 29 с.
2. Нейн Ю.И. Квантово-химические расчеты органических молекул : учеб.-метод. пособие / Ю.И. Нейн, Ю.Ю. Моржерин ; науч. ред. Т.В. Глухарева ; Урал. федер. ун-т им. первого Президента России Б. Н. Ельцина .— Екатеринбург : УрФУ, 2010 .— 128 с.
3. Наливайко Д. В. Квантово-химические расчеты / Наливайко Д.В. — ЭИ .— 2005 .— в корпоративной сети УрФУ: <URL:[http://study.urfu.ru/view/Aid\\_view.aspx?AidId=125](http://study.urfu.ru/view/Aid_view.aspx?AidId=125)>.

## 9.3. Программное обеспечение

1. Графический пакет для химиков ISIS Draw 2.5.
2. Пакет прикладных программ GAMESS.

## 9.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ [www.study.urfu.ru](http://www.study.urfu.ru)  
Электронная библиотека SOL <http://gse.publisher.ingentaconnect.com>  
Электронные ресурсы зональной библиотеки УрФУ <http://lib.urfu.ru>  
Электронные ресурсы Science Direct: <http://www.sciencedirect.com>  
Электронные ресурсы Web of Science: <http://apps.webofknowledge.com>

## 9.5. Электронные образовательные ресурсы

Не используются.

## 10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Сведения об оснащении дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием

Лекционный материал изучается в специализированной аудитории, оснащенной современным компьютером с подключенным к нему проектором при проецировании изображения на настенный экран.

В химико-технологическом институте имеется несколько компьютерных классов, оборудованных современными ЭВМ и необходимым набором программ.

**ПРИЛОЖЕНИЕ 1**  
к рабочей программе дисциплины  
"Основы квантовой химии и хемоинформатики"

**6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

**6.1. Весовой коэффициент значимости дисциплины – не применяется, в том числе, коэффициент значимости курсовых работ/проектов, если они предусмотрены – не применяется.**

**6.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине**

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – <math>k_{\text{лек.}} = 0,8</math></b>		
<b>Текущая аттестация на лекциях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>Посещение лекций</i>	7, 1-17	16
<i>Мини-контрольные работы по темам лекций (4)</i>	7, 5, 8, 12, 17	24
<i>Контрольная работа (Расчет волновых функций)</i>	7, 10	60
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – <math>k_{\text{тек.лек.}} = 0,4</math></b>		
<b>Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – <math>k_{\text{пром.лек.}} = 0,6</math></b>		
<b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0,1</b>		
<b>Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>Посещение практических занятий (8)</i>	7, 1-8	8
<i>Участие в работе практических занятий (8)</i>	7, 1-8	60
<i>Решение кейсов (4)</i>	7, 2, 3, 6, 8	16
<i>Домашние работы (2) (Применение операторов квантовой химии)</i>	7, 4	2 x 8 = 16
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – 1,0</b>		
<b>Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – нет.</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – 0</b>		
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – <math>k_{\text{лаб.}} = 0,1</math></b>		
<b>Текущая аттестация на лабораторных занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>Участие в лабораторных работах</i>	7, 9-18	8
<i>Выполнение задания по проведению расчета</i>	7, 9-17	36
<i>Выполнение отчета</i>	7, 9-18	36
<i>Домашние работы (2) (Сравнительная характеристика методов расчета) (18)</i>	7, 13	2 x 10 = 20
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – <math>k_{\text{тек.лаб.}} = 1</math></b>		
<b>Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – нет.</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – <math>k_{\text{пром.лаб.}} = 0</math></b>		

**6.3. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта**  
Не предусмотрены.

**6.4. Коэффициент значимости семестровых результатов освоения дисциплины**

<b>Порядковый номер семестра по учебному плану, в котором осваивается дисциплина</b>	<b>Коэффициент значимости результатов освоения дисциплины в семестре</b>
Семестр 7	1,0

**7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ**

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО <http://fepo.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте Интернет-тренажеры <http://training.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

В связи с отсутствием Дисциплины и ее аналогов, по которым возможно тестирование, на сайтах ФЭПО, Интернет-тренажеры и портале СМУДС УрФУ, тестирование в рамках НТК не проводится.

**ПРИЛОЖЕНИЕ 3**  
к рабочей программе дисциплины  
"Основы квантовой химии и хемоинформатики"

**8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

**8.1. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ В РАМКАХ БРС**

В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре критерии оценивания достижений студентов по каждому контрольно-оценочному мероприятию. Система критериев оценивания, как и при проведении промежуточной аттестации по модулю, опирается на три уровня освоения компонентов компетенций: пороговый, повышенный, высокий.

Компоненты компетенций	Признаки уровня освоения компонентов компетенций		
	пороговый	повышенный	высокий
<b>Знания</b>	Студент демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем самостоятельного воспроизведения и применения информации.	Студент демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	Студент может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.
<b>Умения</b>	Студент умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое использование умений (технологий)
<b>Личностные качества</b>	Студент имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Студент имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Студент имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

Оценивание производится в соответствии с утвержденными на заседании кафедры критериями оценок и шкалой соответствия баллов системы оценивания БРС, предусмотренной Уставом УрФУ:

**80 – 100 баллов** выставляются студенту, глубоко и прочно усвоившему программный материал, излагающему его последовательно, исчерпывающе, грамотно и логически стройно. Студент правильно обосновывает принятое решение, а также отвечает на дополнительные вопросы преподавателя.

**60 – 79 баллов** выставляются студенту, твердо и прочно знающему программный материал и по существу излагающему его. Даны правильные ответы на теоретические вопросы, в ответах на билет и на дополнительные вопросы студент не допускает существенных неточностей.

**40 – 59 баллов** выставляется студенту, который знает большую часть программного материала, но допускает неточности, недостаточно правильные формулировки. Данное количество баллов может быть поставлено студенту и в том случае, если получены ответы на два теоретических вопроса с помощью наводящих вопросов преподавателя.

**Менее 40 баллов** выставляются студенту, который отвечает лишь на один из трех вопросов. При ответе на дополнительные вопросы преподавателей выясняется, что студент не знает значительной части программного материала, допускает существенные неточности.

При обнаружении списывания выставляется 0 баллов.

## **8.2. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ**

При проведении независимого тестового контроля как формы промежуточной аттестации применяется методика оценивания результатов, предлагаемая разработчиками тестов. Процентные показатели результатов независимого тестового контроля переводятся в баллы промежуточной аттестации по 100-балльной шкале в БРС:

- в случае балльной оценки по тесту (блокам, частям теста) переводится процент набранных баллов от общего числа возможных баллов по тесту;
- при отсутствии балльной оценки по тесту переводится процент верно выполненных заданий теста, от общего числа заданий.

## **8.3. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

### **8.3.1. Примерные задания для проведения мини-контрольных в рамках учебных занятий**

- 1) Являются ли эрмитовыми следующие операторы:  $d/dx$  и  $id/dx$
- 2) Выполняется ли соотношение  $\hat{A}f = (\text{const})f$  для функции и оператора  $f = \sin kx$ ,  
$$\hat{A} = \frac{d}{dx}$$
.
- 3) Выразите волновую функцию для  $2p_x$  орбитали через декартовые координаты
- 4) Выразите волновую функцию для  $3d_{xy}$  орбитали через декартовые координаты
- 5) Запишите выражение для полной энергии основного состояния атома Be

### **8.3.2. Примерные контрольные задачи в рамках учебных занятий**

- 1) Запишите электронный гамильтониан в атомных единицах для иона  $\text{HeH}^{2+}$ . Вычислите значение электронной энергии низшего энергетического уровня этого иона.
- 2) Вычислите силовую постоянную для молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  методом МО ЛКАО.
- 3) Определите результаты действия операторов на указанные функции:
  - a.  $\hat{A} = d/dx$ ,  $f(x) = \sin x$  ;
  - б.  $\hat{A} = d/dx$ ,  $f(x) = x^5 + 3 \cdot e^x$  ;
  - в.  $\hat{A} = d^2/dx^2$ ,  $f(x) = e^{ax^2}$  ;
  - г.  $\hat{A} = d/dx$ ,  $\hat{B} = x$ ,  $f(x) = x^5 + 3 \cdot e^x$ , определить  $(\hat{A} + \hat{B})f(x) = ?$  и  $\hat{A}\hat{B}f(x) = ?$ ;



- 4) Нормируйте трехмерную функцию  $\Psi_m = N_m \cdot r^{m-1} \cdot e^{-a_m r}$ , где  $r$  – радиус-вектор частицы в сферической системе координат,  $a_m$  – постоянная,  $m=1,2,3,\dots$

### 8.3.3. Примерные контрольные кейсы

- 1) Отметьте правильные утверждения:

Выполнение принципа Паули приводит к тому, что

- волновая функция в методе Хартри-Фока записывается в виде детерминанта Слейтера
- волновая функция симметрична при перестановке двух электронов
- волновая функция антисимметрична при перестановке двух электронов
- два электрона не могут находиться вблизи одной точки пространства
- все орбитали в атоме имеют разную энергию
- в атоме не может быть двух электронов с одинаковой энергией
- в атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех квантовых чисел
- в атоме не может быть двух электронов с одинаковым спином

- 2) Записать электронную конфигурацию атома (иона), определить основной терм электронной конфигурации без учета ( $^{2S+1}L$ ) и с учетом спин-орбитального взаимодействия ( $^{2S+1}L_J$ ); представить диаграмму расщепления основного энергетического термина  $^{2S+1}L$  в сильном и слабом магнитных полях.

### 8.3.4. Перечень примерных вопросов для зачета

Не предусмотрено.

### 8.3.5. Перечень примерных вопросов для экзамена

- Принципы квантовой механики.
- Электрон в одномерной потенциальной яме.
- Ортогональность волновых функций и принцип Гейзенберга на примере задачи электрон в потенциальной яме.
- Электрон в трехмерной потенциальной яме.
- Электрон при движении по окружности.
- Туннельный эффект.
- Решение уравнения Шрёдингера для водородоподобного атома (разделение движения атома и электрона).
- Решение уравнения Шрёдингера для водородоподобного атома (разделение переменных в сферических координатах).
- Решение R-уравнения.
- Расчет свойств водородоподобного атома.
- Расчет спектров водородоподобного атома (правила отбора).
- Эффект Зеемана. Магнитный момент атома.
- Вариационный принцип.
- Теория возмущений для невырожденных состояний.
- Теория возмущений для вырожденных состояний.
- Решение уравнения Шрёдингера для атома гелия и других многоэлектронных атомов.
- Решение уравнения Шрёдингера для атома гелия методом возмущения.
- Теория возмущений для первого возбужденного состояния гелия.
- Решение уравнения Шрёдингера для многоэлектронных атомов. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.
- Вывод одноэлектронного уравнения Хартри.
- Теория химической связи. Простое адиабатическое приближение.
- Теория химической связи. Адиабатическое приближение.
- Расчет молекулы водорода по методу валентных связей в приближении Борна-Оппенгеймера.
- Метод молекулярных орбиталей и метод валентных связей.
- Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО.
- Теорема Гельмана-Феймана и теорема вириала.

27. Полуэмпирические и неэмпирические методы расчета. Общая характеристика методов CNDO, AM1, PM3, MINDO/3, ab initio, DFT. Базис расчета.
28. Вывод уравнения Рутаана.
29. Инвариантность полуэмпирических методов расчета.
30. Расчет поверхности потенциальной энергии.

**8.3.6. Ресурсы АПИМ УрФУ, СКУД УрФУ для проведения тестового контроля в рамках текущей и промежуточной аттестации**

Не используются.

**8.3.7. Ресурсы ФЭПО для проведения независимого тестового контроля**

Не используются.

**8.3.8. Интернет-тренажеры**

Не используются.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**ОСНОВЫ ТЕОРИИ ЦВЕТНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

<b>Перечень сведений о рабочей программе дисциплины</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Модуль</b> Квантово-химическое моделирование органических соединений	<b>Код модуля</b> 1128758
<b>Образовательная программа</b> Химическая технология неорганических, органических веществ, природных энергоносителей и лекарственных препаратов	<b>Код ОП</b> 18.03.01/01.01
<b>Направление подготовки</b> Химическая технология	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 18.03.01
<b>Уровень подготовки</b> бакалавриат	
<b>ФГОС ВО</b>	<b>Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО:</b> № 1005 от 11.08.2016 г.

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Кафедра</b>	<b>Подпись</b>
1	Бельская Наталья Павловна	д.х.н.	профессор	Кафедра технологии органического синтеза	
2	Иванцова Мария Николаевна	доцент, к.х.н	доцент	Кафедра технологии органического синтеза	

**Руководитель модуля**

Ю.И. Нейн

**Рекомендовано учебно-методическим советом Химико-технологического института**

Председатель учебно-методического совета  
Протокол № 8 от "10" октября 2018 г.

А.Б. Даринцева

**Согласовано:**

Дирекция образовательных программ

Р.Х. Токарева

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ «Основы теории цветности органических соединений»

## 1.1. Аннотация содержания дисциплины

Дисциплина посвящена изучению особенностей электронного строения и оптических свойств органических соединений, обладающих специфическими свойствами, что позволяет их использовать в качестве органических красителей, активных веществ для лазеров, флюоресцентных меток в биологии, органических переключателей. Программа включает разделы теории цветности органических соединений, взаимосвязи строения и оптических свойств органических красителей и фотоактивных материалов.

## 1.2. Язык реализации программы - русский

## 1.3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Результатом обучения в рамках дисциплины является формирование у студента следующих компетенций:

- готовностью использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности (ПК-17);
- способность использовать знания об основных классах, строении, химических свойствах органических соединений, методах получения основных видов продукции органического синтеза, области их применения в промышленности и народном хозяйстве; выбирать рациональный путь синтеза органических соединений с заданными физико-химическими и прикладными свойствами, отвечающими требованиям заданных стандартов качества (ДПК-3-ТОП4);
- готовность использовать знания об организации проведения технологического процесса с учётом новейших достижений в области химического синтеза органических соединений (ДПК-4-ТОП4)

В результате освоения дисциплины студент должен:

### Знать:

- особенности электронного строения органических соединений, определяющих возможность их использования в качестве фотоактивных материалов;
- методы теоретического исследования электронного состояния органических молекул;
- методы определения оптических характеристик органических красителей и флуорофоров;
- взаимосвязь строения красителей, пигментов, флюоресцентных веществ и оптических и их фотофизических свойств.

### Уметь:

- осуществлять дизайн и синтез фотоактивных соединений различных классов, в зависимости от области их применения;
- использовать причины избирательного поглощения органическими соединениями световой энергии, взаимосвязи между строением, цветностью и фотофизическими свойствами органических;

### Демонстрировать навыки и опыт деятельности:

- изучения оптических свойств органических соединений теоретическими и экспериментальными методами, осуществлять дизайн новых фотоактивных веществ с заданными характеристиками.

#### 1.4. Объем дисциплины

По очной форме обучения

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)	8
1.	<b>Аудиторные занятия</b>	<b>48</b>	<b>48</b>	<b>48</b>
2.	Лекции	16	16	16
3.	Практические занятия			
4.	Лабораторные работы	32	32	32
5.	<b>Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей аттестации</b>	<b>96</b>	<b>7,2</b>	<b>96</b>
6.	<b>Промежуточная аттестация</b>	<b>4</b>	<b>0,25</b>	<b>3</b>
7.	<b>Общий объем по учебному плану, час.</b>	<b>144</b>		<b>144</b>
8.	<b>Общий объем по учебному плану, з.е.</b>	<b>4</b>		<b>4</b>

По заочной форме обучения

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)	9
1.	<b>Аудиторные занятия</b>	<b>14</b>	<b>14</b>	<b>14</b>
2.	Лекции	6	6	6
3.	Практические занятия			
4.	Лабораторные работы	8	8	8
5.	<b>Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей аттестации</b>	<b>130</b>	<b>2,1</b>	<b>130</b>
6.	<b>Промежуточная аттестация</b>	<b>4</b>	<b>0,25</b>	<b>3</b>
7.	<b>Общий объем по учебному плану, час.</b>	<b>144</b>		<b>144</b>
8.	<b>Общий объем по учебному плану, з.е.</b>	<b>4</b>		<b>4</b>

#### 2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Код разделов	Раздел дисциплины	Содержание
P1	Электронные переходы в молекулах органических соединений	<p>Краткий исторический обзор развития химии и производства материалов, обладающих фотоактивными свойствами. Физические основы цветности. Способность вещества поглощать и преобразовывать энергию электромагнитного излучения в видимой и ультрафиолетовой (УФ) областях спектра. Спектр электромагнитного излучения и его энергетические характеристики в различных диапазонах. Область электронных спектров. Спектры поглощения и их графическое изображение. Основной закон светопоглощения, его следствия и применение. Монохроматический свет. Избирательное поглощение света. Причины избирательного поглощения света.</p> <p>Основы современной электронной теории цветности органических соединений. Типы электронных переходов в молекулах органических соединений. Простые и сложные хромофоры. Энергия возбуждения молекул. Диаграмма энергетических уровней молекулы органического соединения.</p>

P2	Первое положение теории цветности	Электронные переходы. Электронные переходы в углеводородах, этилене, бутadiене и ароматических системах. Бензольное поглощение.
P3	Второе положение теории цветности	$\pi \rightarrow \pi^*$ -Электронные переходы в молекулах, содержащих гетероатомы. $\pi \rightarrow \pi^*$ - Переходы в молекулах с гетероатомами, не входящими в цикл. Электронные переходы с участием неподеленных электронов. $n \rightarrow \sigma^*$ -Переходы, $n \rightarrow \pi^*$ -переходы.
P4	Третье положение теории цветности	Поляризующие заместители. Электронодонорные заместители. Электроноакцепторные заместители. Совместное действие поляризующих заместителей. Гиперхромный эффект поляризующих заместителей.
P5	Четвертое положение теории цветности	Ионизация молекул органических соединений. Ионизация электронодонорных и электроноакцепторных заместителей.
P6	Пятое положение теории цветности	Конкурирующие и перекрещивающиеся хромофорные системы. Введение второго электронодонорного заместителя и разветвление сопряженной системы квазиавтономных сопряженных систем. Замыкание гетероциклов.
P7	Шестое положение теории цветности	Влияние пространственных факторов. Нарушение плоскостности. Свободное вращение. Пространственные затруднения. Искажение валентных углов.
P8	Седьмое положение теории цветности	Комплексообразование с металлами. Комплексообразование с углублением цвета. Комплексообразование без углубления цвета. Седьмое положение теории цветности.

### 3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ

#### 3.1. Распределение аудиторной нагрузки и мероприятий самостоятельной работы по разделам дисциплины







#### 4. ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ, САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

##### 4.1. Лабораторные работы

Для очной формы обучения

Код раздела	Номер работы	Наименование работы	Время на выполнение работы (час.)
P2	1	Электронные спектры поглощения соединений, содержащих системы сопряженных связей, ароматические системы	4
P3	2	Электронные спектры поглощения органических соединений, содержащих различные заместители	4
P4	3	Влияние поляризующих заместителей на спектры поглощения органических соединений в видимой и УФ-областях	4
P5	4	Влияние ионизации на спектры поглощения и цвет ароматических amino- и гидроксисоединений	4
P6	5	Электронные спектры соединений, содержащих конкурирующие и перекрещивающиеся системы сопряжения	4
P7	6	Влияние пространственных факторов на систему сопряжения органических красителей	6
P8	7	Влияние комплексообразования с металлами на электронные спектры органических красителей	6
<b>Всего:</b>			<b>32</b>

Для заочной формы обучения

Код раздела	Номер работы	Наименование работы	Время на выполнение работы (час.)
P2	1	Электронные спектры поглощения соединений, содержащих системы сопряженных связей, ароматические системы	1
P3	2	Электронные спектры поглощения органических соединений, содержащих различные заместители	1
P4	3	Влияние поляризующих заместителей на спектры поглощения органических соединений в видимой и УФ-областях	1
P5	4	Влияние ионизации на спектры поглощения и цвет ароматических amino- и гидроксисоединений	1
P6	5	Электронные спектры соединений, содержащих конкурирующие и перекрещивающиеся системы сопряжения	1
P7	6	Влияние пространственных факторов на систему сопряжения органических красителей	1
P8	7	Влияние комплексообразования с металлами на электронные спектры органических красителей	2
<b>Всего:</b>			<b>8</b>

##### 4.2. Практические занятия

Не предусмотрены.

### **4.3. Примерная тематика самостоятельной работы**

#### **4.3.1. Примерный перечень тем домашних работ**

1. Электронные переходы в молекулах углеводов
2. Характеристика хромофорной системы моноазокрасителей.
3. Характеристика хромофорной системы ди и три-азокрасителей.
4. Характеристика хромофорной системы антрахиноновых красителей
5. Особенности хромофорной системы триарилметановых красителей
6. Характеристика хромофорной системы ариламиновых красителей
7. Характеристика хромофорной системы индигоидных красителей
8. Характеристика хромофорной системы фталоцианиновых красителей
9. Особенности хромофорной системы полициклохиноновых красителей
10. Характеристика хромофорной системы полиметиновых красителей

#### **4.3.2. Примерный перечень тем графических работ**

Не предусмотрено.

#### **4.3.3. Примерный перечень тем рефератов (эссе, творческих работ)**

Для студентов очной формы обучения:

Органические красители – активное вещество лазеров.

Органические красители – как жидкие кристаллы.

Органические красители – сенсоры.

Органические красители – метки в биологических исследованиях.

Органические красители – активное вещество солнечных батарей.

#### **4.3.4. Примерная тематика индивидуальных или групповых проектов**

Не предусмотрено.

#### **4.3.5. Примерный перечень тем расчетных работ (программных продуктов)**

Не предусмотрено.

#### **4.3.6. Примерный перечень тем расчетно-графических работ**

Не предусмотрено.

#### **4.3.7. Примерный перечень тем курсовых проектов (курсовых работ)**

Не предусмотрено.

#### **4.3.8. Примерная тематика контрольных работ**

Для очной и заочной формы обучения

- Спектр электромагнитного излучения и его энергетические характеристики в различных диапазонах. Физические основы теории цветности. Избирательное поглощение света.
- Электронные переходы в молекулах органических молекул (углеводороды, олефины, бутадиен и бензол).
- Типы электронных переходов в молекулах органических соединений. Простые и сложные хромофоры. Ранние теории цветности.

#### **4.3.9. Примерная тематика коллоквиумов**

Для очной формы обучения

- Электронные спектры поглощения соединений, содержащих системы сопряженных связей, ароматические системы.
- Электронные спектры поглощения органических соединений, содержащих сопряженные и несопряженные системы кратных связей.
- Влияние поляризующих заместителей на спектры поглощения органических соединений в видимой и УФ-областях.
- Влияние поляризующих заместителей на спектры поглощения органических соединений в видимой и УФ-областях.

- Влияние комплексообразования с металлами на электронные спектры поглощения и цвет органических соединений
- Спектры органических соединений в УФ- и видимой области. Основные характеристики

## 5. СООТНОШЕНИЕ РАЗДЕЛОВ, ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРИМЕНЯЕМЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ

Код раздела дисциплины	Активные методы обучения					Дистанционные образовательные технологии и электронное обучение						
	Проектная работа	Кейс-анализ	Деловые игры	Проблемное обучение	Командная работа	Другие (указать, какие)	Сетевые учебные курсы	Виртуальные практикумы и тренажеры	Вебинары и видеоконференции	Асинхронные web-конференции и семинары	Совместная работа и разработка контента	Другие (указать, какие)
P1												
P2-P7				+								
P8				+	+							

## 6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ (Приложение 1)

## 7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ (Приложение 2)

## 8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (Приложение 3)

## 9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 9.1. Рекомендуемая литература

#### 9.1.1. Основная литература

1. Мельников Б.Н., Щеглова Т.Л., Виноградова Г.И. Применение красителей: учебное пособие для вузов / 3-е изд., испр. и доп. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 331 с. (7 экз.)
2. Михеев В.В., Миронов М.М., Абдуллина В.Х. Химия красителей и крашения. Учебное пособие. — Казань: КГТУ, 2009. — 81 с. — ISBN 5-7882-0053-9. Режим доступа: <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=258983>>

#### 9.1.2. Дополнительная литература

1. Степанов Б.И. Введение в химию и технологию органических красителей. М.: Химия, 1984. - 592 с. (25 экз.)
2. Чекалин М.А., Пассет Б.В., Иоффе Б.А. Технология органических красителей и промежуточных продуктов. М.: Химия 1980. - 458 с. (6 экз.)
3. Смирнов Е.В. Пищевые красители. Справочник. – СПб.: Профессия, 2009. - 352 с. (6 экз.)

4. Эфрос Л. С. Химия и технология промежуточных продуктов / Л. С. Эфрос, М. В. Горелик. — Л. : Химия, 1980. — 544 с. (24 экз.)
5. Бородин В. Ф. Химия красителей : Учеб. для вузов. — М. : Химия, 1981. — 247 с. (12 экз.)

## 9.2. Методические разработки

Не используются.

## 9.3. Программное обеспечение

- Операционная система Microsoft Windows;
- Microsoft Office в составе Word, Excel;

## 9.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- American Chemical Society (ACS Publications): [www.pubs.acs.org](http://www.pubs.acs.org).
- Royal Chemical Society (RCS Publishing): [www.rsc.org](http://www.rsc.org).
- Химические журналы издательств:
- Elsevier Ltd. ([http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws\\_home](http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws_home))
- Wiley-VCH (<http://onlinelibrary.wiley.com/browse/publications>)
- Электронные базы и поисковые системы:
- Science-Direct ([http://www.sciencedirect.com/science?\\_ob=BrowseListURL&\\_type=all&\\_auth=y&\\_btn=Y&\\_acct=C000059308&\\_version=1&\\_urlVersion=0&\\_userid=2949021&md5=f80b565cb6b43b4e6fc27bd1fda24ad](http://www.sciencedirect.com/science?_ob=BrowseListURL&_type=all&_auth=y&_btn=Y&_acct=C000059308&_version=1&_urlVersion=0&_userid=2949021&md5=f80b565cb6b43b4e6fc27bd1fda24ad)),
- Reaxys (<https://www.reaxys.com/reaxys/secured/start.do.com>),
- Scopus (<http://www.scopus.com/home.url>)
- Реферативные журналы: Реферативный журнал «Химия», Chemical Abstracts
- Российских химических журналов (через издательство Springer):
- Журнал органической химии (Russian Journal of Organic Chemistry) <http://www.springerlink.com/content/1070-4280/>
- Известия Академии наук. Серия химическая. (Russian Chemical Bulletin) <http://www.springerlink.com/content/1066-5285/>
- Доклады Академии наук (Doklady of Chemistry) (<http://www.springerlink.com/content/0012-5008/>), .
- Журнал структурной химии (Journal of Structural Chemistry) <http://www.springerlink.com/content/0022-4766/>
- Успехи химии (Russian Chemical Reviews) Международных журналов по химии: Журналы Американского химического общества:
- Chemical Reviews (<http://pubs.acs.org/journal/chreay>)
- Journal of the American Chemical Society (<http://pubs.acs.org/journal/jacsat>)
- Journal of Organic Chemistry <http://pubs.acs.org/journal/jocea>
- Organic Letters <http://pubs.acs.org/journal/orlef7>) Журналы королевского химического общества:
- Chemical Society Reviews (<http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/cs>)
- Chemical communications (<http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/cc>) Издательства Wiley:
- Chemistry – A European Journal ([http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1521-3765](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1521-3765))
- Angewandte Chemie International Edition ([http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1521-3773](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1521-3773))
- Helvetica Chimica Acta ([http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1522-2675](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1522-2675))
- Chinese Journal of Chemistry ([http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1614-7065](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1614-7065))

- European Journal of Organic Chemistry ([http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1099-0690](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1099-0690))
- Journal of Heterocyclic Chemistry ([http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1943-5193](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1943-5193))
- Journal of Physical Organic Chemistry ([http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1099-1395](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1099-1395))
- Luminescence ([http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1522-7243](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1522-7243))  
Издательства Elsevier:
- Tetrahedron (<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00404020>)
- Tetrahedron Letters (<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00404039>)
- Organic electronics (<http://www.sciencedirect.com/science/journal/15661199>)
- Dyes and Pigments (<http://www.journals.elsevier.com/dyes-and-pigments/>)
- Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ [www.study.urfu.ru](http://www.study.urfu.ru)
- Электронная библиотека SOL <http://gse.publisher.ingentaconnect.com>
- Электронные ресурсы зональной библиотеки УрФУ <http://lib.urfu.ru>

#### 9.5. Электронные образовательные ресурсы

Не используются.

### 10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием

На кафедре Технологии органического синтеза имеется синтетическая лаборатория, укомплектованная специальным оборудованием, реактивами, растворителями и химической посудой для получения органических соединений. Лабораторные работы выполняются в специализированных залах, оснащённых вытяжной вентиляцией, ламинарными шкафами, канализацией, ёмкостями для сбора сливов.

Оборудование специализированной синтетической лаборатории:

- УФ-спектрометр;
- рН-метры;
- магнитные мешалки;
- компьютеры.

Для изучения дисциплины используются:

- Электронный демонстрационный материал, содержащий химические схемы, таблицы и рисунки;
- учебный материал в электронном виде;
- контрольные задания для контроля полученных знаний;

Лекционный материал изучается в специализированной аудитории, оснащённой:

- Мультимедийным проектором.
- Компьютером с необходимым программным обеспечением (Word, IsisDraw, Microsoft PowerPoint)

Лабораторные работы проводятся в студенческом лабораторном зале кафедры ТОС, оснащённым оборудованием, необходимым для проведения органического синтеза:

- вытяжными шкафами;
- химическая посуда и приборы для синтетических экспериментов
- УФ-спектрометр PerkinElmer Lambda 45 и флюориметр «Панорама».

Назначение: спектроскопия в УФ- и видимой области 190-1100 нм. Исследование флуоресценции органических материалов, и флуоресцентных меток для молекулярной биологии.

**ПРИЛОЖЕНИЕ 1**  
к рабочей программе дисциплины  
"Основы теории цветности органических соединений"

**6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

**6.1. Весовой коэффициент значимости дисциплины – не предусмотрен, в том числе, коэффициент значимости курсовых работ/проектов – не предусмотрен.**

**6.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине**

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – k лек. = 0,7</b>		
<b>Текущая аттестация на лекциях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>Посещение лекций</i>	8, 1-8	24
<i>СРС: выполнение домашних работ</i>	8, 1-8	5 x 6 = 30
<i>СРС: выполнение контрольных работ (3)</i>	8, 7	3 x 6 = 18
<i>Подготовка и защита реферата (2)</i>	8, 4-8	2 x 14 = 28
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – k тек.лек.=0,3</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лекциям – зачет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – k пром.лек.=0,7</b>		
<b>2. Практические/семинарские занятия: не предусмотрены.</b>		
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – k лаб. =0,3</b>		
<b>Текущая аттестация на лабораторных занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, Учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>Участие в лабораторных работах (8)</i>	8, 1-8	40
<i>Коллоквиумы(4)</i>	8, 2, 4, 6	4 x 5 = 20
<i>СРС – выполнение и защита отчетов</i>	8, 8	40
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – k тек.лаб.=1</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – не предусмотрено</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – k пром.лаб. =0</b>		

**6.3. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта**  
Не предусмотрены.

**6.4. Коэффициент значимости семестровых результатов освоения дисциплины**

<b>Порядковый номер семестра по учебному плану, в котором осваивается дисциплина</b>	<b>Коэффициент значимости результатов освоения дисциплины в семестре</b>
Семестр 8	1,0

**ПРИЛОЖЕНИЕ 2**  
**к рабочей программе дисциплины**  
**"Основы теории цветности органических соединений"**

**7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ**

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО <http://fero.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте Интернет-тренажеры <http://training.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

В связи с отсутствием Дисциплины и ее аналогов, по которым возможно тестирование, на сайтах ФЭПО, Интернет-тренажеры и портале СМУДС УрФУ, тестирование в рамках НТК не проводится.



**ПРИЛОЖЕНИЕ 3**  
**к рабочей программе дисциплины**  
**"Основы теории цветности органических соединений"**

**8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

**8.1. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ В РАМКАХ БРС**

В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре критерии оценивания достижений студентов по каждому контрольно-оценочному мероприятию. Система критериев оценивания, как и при проведении промежуточной аттестации по модулю, опирается на три уровня освоения компонентов компетенций: пороговый, повышенный, высокий.

Компоненты компетенций	Признаки уровня освоения компонентов компетенций		
	пороговый	повышенный	высокий
<b>Знания</b>	Студент демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем самостоятельного воспроизведения и применения информации.	Студент демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	Студент может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.
<b>Умения</b>	Студент умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое использование умений (технологий)
<b>Личностные качества</b>	Студент имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Студент имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Студент имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

Оценивание производится в соответствии с утвержденными на заседании кафедры критериями оценок и шкалой соответствия баллов системы оценивания БРС, предусмотренной Уставом УрФУ:

**80 – 100 баллов** выставляются студенту, глубоко и прочно усвоившему программный материал, излагающему его последовательно, исчерпывающе, грамотно и логически стройно. Студент правильно обосновывает принятое решение, а также отвечает на дополнительные вопросы преподавателя.

**60 – 79 баллов** выставляются студенту, твердо и прочно знающему программный материал и по существу излагающему его. Даны правильные ответы на теоретические вопросы, в ответах на билет и на дополнительные вопросы студент не допускает существенных неточностей.

**40 – 59 баллов** выставляется студенту, который знает большую часть программного материала, но допускает неточности, недостаточно правильные формулировки. Данное количество баллов может быть поставлено студенту и в том случае, если получены ответы на два теоретических вопроса с помощью наводящих вопросов преподавателя.

**Менее 40 баллов** выставляются студенту, который отвечает лишь на один из трех вопросов. При ответе на дополнительные вопросы преподавателей выясняется, что студент не знает значительной части программного материала, допускает существенные неточности.

При обнаружении списывания выставляется 0 баллов.

## **8.2. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ**

При проведении независимого тестового контроля как формы промежуточной аттестации применяется методика оценивания результатов, предлагаемая разработчиками тестов. Процентные показатели результатов независимого тестового контроля переводятся в баллы промежуточной аттестации по 100-балльной шкале в БРС:

- в случае балльной оценки по тесту (блокам, частям теста) переводится процент набранных баллов от общего числа возможных баллов по тесту;
- при отсутствии балльной оценки по тесту переводится процент верно выполненных заданий теста, от общего числа заданий.

## **8.3. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

### **8.3.1. Примерные задания для проведения мини-контрольных в рамках учебных занятий**

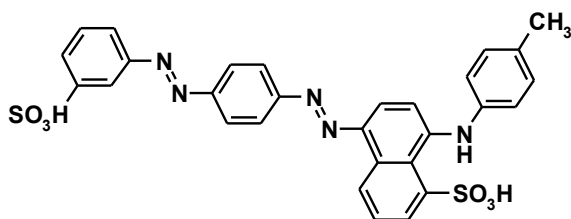
1. Физические основы теории цветности.
2. Избирательное поглощение света. Примеры.
3. Энергия возбуждения.
4. Энергетические уровни.
5. Спектр электромагнитного излучения
6. Энергетические характеристики электромагнитного излучения.
7. Область электронных спектров.
8. Спектры поглощения и их графическое изображение.
9. Основной закон светопоглощения.
10. Причины избирательного поглощения света. Спектральные кривые поглощения.
11. Теория цветности А.Е. Порай-Кошица.
12. Теория цветности В.А. Измаильского.
13. Типы электронных переходов в молекулах органических соединений.
14. Простые хромофоры. Приведите примеры.
15. Сложные хромофоры. Приведите примеры.

### **8.3.2. Примерные контрольные задачи в рамках учебных занятий**

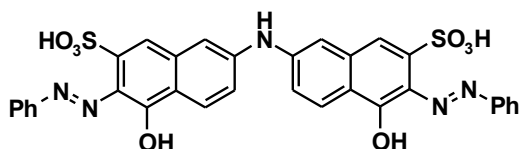
Объясните происхождение окраски соединения, формула которого приведена ниже.

Какие элементы строения определяют его цвет? К какой группе по химической классификации относится данный краситель?

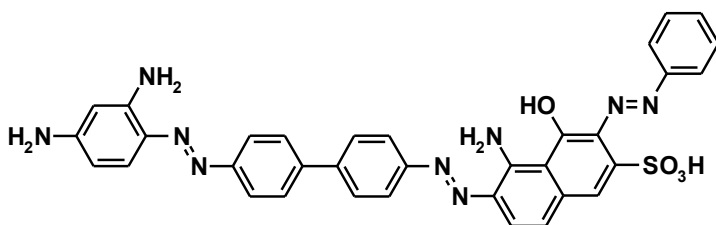
1. Кислотный синий К



2. Прямой красный 4С



3. Прямой черный 3



### 8.3.3. Примерные контрольные кейсы

Не используются.

### 8.3.4. Перечень примерных вопросов для зачета

1. Энергия возбуждения. Энергетические уровни.
2. Спектр электромагнитного излучения и его энергетические характеристики в различных диапазонах.
3. Область электронных спектров. Спектры поглощения и их графическое изображение.
4. Основной закон светопоглощения, его следствия и применение.
5. Причины избирательного поглощения света. Спектральные кривые поглощения.
6. Ранние теории цветности (хромофорно-ауксохромная, теория координационно-ненасыщенных атомов, хиноидная теория). Работы А.Е. Порай-Кошица и В.А. Измайльского.
7. Типы электронных переходов в молекулах органических соединений. Простые и сложные хромофоры.
8. Электронные переходы. Энергия возбуждения молекул. Диаграмма энергетических уровней молекулы органического соединения.
9. Электронные переходы в молекулах органических молекул (углеводороды, олефины, бутadiен и бензол). Первое положение теории цветности
10. Электронные переходы в молекулах, содержащих гетероатомы. p-p\*-переходы в молекулах с гетероатомами, не входящими в цикл. n-sigma\*-переходы, p-p\*-переходы. Второе положение теории цветности.
11. Поляризующие заместители. Совместное действие поляризующих заместителей. Третье положение теории цветности.
12. Ионизация электронодонорных и электроноакцепторных заместителей. Четвертое положение теории цветности.
13. Разветвленные и перекрещивающиеся хромофорные системы. Введение второго элек-

тронодонорного заместителя и разветвление сопряженной системы квазиавтономных сопряженных систем. Пятое положение теории цветности.

14. Влияние пространственных факторов. Нарушение плоскостности. Пространственные затруднения. Искажение валентных углов. Шестое положение теории цветности.
15. Комплексообразование с металлами. Комплексообразование с углублением цвета. Комплексообразование без углубления цвета. Седьмое положение теории цветности
16. Современное применение красителей. Новые области применения красителей.

#### **8.3.5. Перечень примерных вопросов для экзамена**

Не предусмотрено.

#### **8.3.6. Ресурсы АПИМ УрФУ, СКУД УрФУ для проведения тестового контроля в рамках текущей и промежуточной аттестации**

Не используются.

#### **8.3.7. Ресурсы ФЭПО для проведения независимого тестового контроля**

Не используются.

#### **8.3.8. Интернет-тренажеры**

Не используются.