

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ  
Декан химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/  
«31» августа 2021 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**  
**Строение молекул**

**Уровень высшего образования:**  
Специалитет

---

**Направление подготовки (специальность):**  
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**  
Аналитическая химия, Биоорганическая химия, Высокомолекулярные соединения, Коллоидная химия, Лазерная химия, Медицинская химия и тонкий органический синтез, Нанобиоматериалы и нанобиотехнологии, Неорганическая химия, Нефтехимия, Органическая химия, Радиохимия, Физическая химия, Фундаментальная и прикладная энзимология, Химия ионных и молекулярных систем, Химическая кинетика, Химия высоких энергий, Химия и технология веществ и материалов, Химия твердого тела, Электрохимия

**Форма обучения:**  
очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №7 от 07.07.2021)

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770.

Год (годы) приема на обучение 2021/2022

---

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: базовая часть ООП, блок ХД, модуль «Квантовая химия».

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p><b>УК-1.С</b> Способен формулировать научно обоснованные гипотезы, создавать теоретические модели явлений и процессов, применять методологию научного познания в профессиональной деятельности</p>	<p><b>УК-1.С.1</b> Осуществляет поиск, критический анализ и синтез информации с использованием требований системного подхода</p>	<p><b>Уметь:</b> находить необходимые для работы сведения в открытых источниках информации  <b>Уметь:</b> сопоставлять информацию из разных источников, оценивать ее достоверность</p>
	<p><b>УК-1.С.2</b> Формулирует научно обоснованные гипотезы, создает теоретические модели явлений и процессов</p>	<p><b>Уметь:</b> формулировать научные гипотезы при обсуждении литературных и собственных данных</p>
<p><b>УК-6.С</b> Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном языке (иностранных языках), для академического и профессионального взаимодействия</p>	<p><b>УК-6.С.2.</b> Осуществляет письменную и устную коммуникацию на русском и иностранном языке в профессиональной сфере</p>	<p><b>Уметь:</b> выбирать коммуникативно приемлемый стиль делового общения, использовать необходимые языковые средства, тактики и стратегии для решения коммуникативных задач в академической и профессиональной сферах  <b>Уметь:</b> работать с учебными и научными текстами разного уровня сложности, отвечающими задачам профессиональной деятельности</p>
<p><b>УК-7.С</b> Способен использовать современные информационно-коммуникационные технологии в академической и профессиональной сферах</p>	<p><b>УК-7.С.1</b> Использует современные информационные технологии для обмена информацией в деловой и профессиональной сфере с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p><b>Уметь:</b> использовать программные средства удаленного коллективного доступа для решения задач научной деятельности  <b>Владеть:</b> навыками обмена профессиональной информацией с учетом основных требований информационной безопасности</p>
<p><b>ОПК-1.С.</b> Способен решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя ме-</p>	<p><b>ОПК-1.С.1.</b> Воспринимает информацию химического содержания, систематизирует и анализирует ее,</p>	<p><b>Знать:</b> основные приближения квантовой химии и принципы методов, используемых при расчетах электронной структуры, строения и реакционной способности хими-</p>

<p>тодологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>оценивает актуальность и степень новизны данных</p>	<p>ческих соединений  <b>Знать</b> границы применимости расчетных результатов квантовой механики в статистической термодинамике, теории элементарного акта химических превращений, молекулярной спектроскопии и других разделах современной химии  <b>Уметь:</b> использовать теоретические модели для обоснования строения и реакционной способности веществ различной природы, планирования синтетических работ</p>
<p><b>ОПК-3.С.</b> Владеет методами регистрации и обработки результатов экспериментов, в том числе, полученных на современном научном оборудовании</p>	<p><b>ОПК-3.С.2.</b> Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, изменений</p>	<p><b>Знать:</b> требования к оформлению и представлению результатов квантово-химических расчетных работ  <b>Уметь:</b> получать структурные, энергетические и спектральные данные, проводить их математическую обработку  <b>Уметь:</b> проводить математическую обработку структурных, энергетических и спектральных данных, обобщать полученные результаты  <b>Владеть:</b> навыками оформления протоколов результатов изучения структурных, энергетических и спектральных характеристик молекул</p>
<p><b>ОПК-4.С.</b> Способен создавать математические модели профессиональных задач, учитывать ограничения и границы применимости моделей, интерпретировать полученные математические результаты</p>	<p><b>ОПК-4.С.1</b> Предлагает математические и (или) физические модели химических процессов</p>	<p><b>Знать:</b> математические и физические модели, используемые при решении типовых задач курса Строение молекул  <b>Владеть:</b> навыками физико-математического моделирования свойств химических объектов и процессов с их участием</p>
	<p><b>ОПК-4.С.2</b> Грамотно интерпретирует математические результаты расчета характеристик (свойств, параметров) химических объектов</p>	<p><b>Знать:</b> ограничения и границы применимости физических и математических моделей в химии  <b>Уметь:</b> интерпретировать результаты физико-математического моделирования свойств химических объектов</p>

<p><b>ОПК-5.С.</b> Способен использовать современные расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием при решении профессиональных задач</p>	<p><b>ОПК-5.С.1.</b> Оценивает свойства веществ и материалов, прогнозирует результаты химических процессов с использованием современных расчетно-теоретических методов и представлений</p>	<p><b>Знать:</b> структурные, энергетические и спектральные характеристики молекулярных систем, которые могут быть определены с использованием современных квантовохимических методов расчетов и экспериментальных спектроскопических подходов  <b>Уметь:</b> оценить корректность результатов теоретических расчетов и экспериментального определения структурных, энергетических и спектральных характеристик молекулярных систем</p>
<p><b>ОПК-6.С.</b> Способен использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области физики и математики</p>	<p><b>ОПК-6.С.3.</b> Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений</p>	<p><b>Уметь:</b> использовать физические законы и представления при интерпретации уравнений, определяющих ядерные состояния молекулярных систем и вероятности изменения состояний систем при взаимодействии с излучением, и результатов, полученных при их решении  <b>Уметь:</b> проводить необходимые математические преобразования при решении задач строения и динамики молекул  <b>Владеть:</b> навыками использования базовых физических знаний при решении химических задач</p>
<p><b>ОПК-7.С.</b> Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p><b>ОПК-7.С.1</b> Использует современные компьютерные технологии при сборе информации химического профиля с использованием общих и профессиональных баз данных</p>	<p><b>Знать:</b> основные базы данных в области структурной, энергетической и спектральной информации  <b>Уметь:</b> корректно составлять поисковый запрос информации структурно-энергетического и спектроскопического содержания  <b>Владеть:</b> навыками работы с профессиональными базами данных структурно-энергетического и спектроскопического профиля</p>
	<p><b>ОПК-7.С.2</b> Использует современные компьютерные технологии при анализе, обработке и представлении результатов профессиональной деятельности</p>	<p><b>Уметь:</b> пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.)</p>
<p><b>ОПК-9.С.</b> Способен представлять результаты профессиональной дея-</p>	<p><b>ОПК-9.С.1.</b> Представляет результаты работы в виде отчета по стан-</p>	<p><b>Знать:</b> требования к оформлению и представлению результатов работ в области строения и динамики молекул</p>

тельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	дартной форме на русском языке	
---	--------------------------------	--

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

*Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетные единицы, всего 144 часа, из которых 80 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов занятия семинарского типа, 4 часа групповых консультаций, 4 часа мероприятий текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 64 часа составляет самостоятельная работа учащегося.*

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся должен

**знать:** основы математического анализа, линейной алгебры, теории вероятности, методов решения дифференциальных уравнений и уравнений математической физики, а также таких разделов физики, как механика и электричество, колебания, волны и оптика, теоретическая механика и квантовая механика в объеме соответствующих курсов Химического факультета МГУ;

**уметь:** формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, усвоенных в различных курсах; получать расчетные оценки искомых величин, проводить их математическую обработку, обобщать полученные результаты;

**владеть:** расчетными методами решения дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений, навыками поиска необходимых данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных).

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной атте-	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	<b>Всего</b>	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов. ит.п.	<b>Всего</b>
Тема 1. Молекулярная задача в квантовой механике	5	2	2				4	1		1
Тема 2. Анализ ядерных движений молекулярной системы	5	2	2				4	1		1
Тема 3. Анализ вращательной динамики молекулярной системы	8	4	2				6	2		2
Тема 4. Колебания молекул	6	2	2				4	2		2
Тема 5. Ангармонизм и взаимодействие колебаний	6	2	2				4	2		2
Тема 6. Движения большой амплитуды в молекулах	6	2	2				4	2		2
Тема 7. Электронно-колебательное взаимодействие	8	2	2	2			6	2		2
Тема 8. Обобщение особенностей и методов решения ядерной задачи	7	2	2			2	6	1		1

Тема 9. Молекула во внешнем электромагнитном поле	6	2	3				5	1		1
Тема 10. Процессы поглощения и испускания излучения	7	2	3				5	2		2
Тема 11. Правила отбора в спектрах поглощения	8	4	2				6	2		2
Тема 12. Колебательно-вращательные спектры поглощения многоатомных молекул	6	2	2				4	2		2
Тема 13. Взаимодействие молекул с электромагнитным полем: эффекты, квадратичные по напряженности приложенного поля	6	2	2				4	2		2
Тема 14. Спектры рассеяния	8	2	2	2			6	2		2
Тема 15. Состояния молекул в магнитных полях	7	2	3				5	2		2
Тема 16. Теоретические основы магнитно-резонансных методов	9	2	3			2	7	2		2
Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>	36									36
<b>Итого</b>	<b>144</b>	<b>36</b>	<b>36</b>	<b>4</b>		<b>4</b>	<b>80</b>	<b>28</b>		<b>64</b>

#### 6. Образовательные технологии:

- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.



#### 7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Учебники и монографии, освещающие отдельные разделы курса; методические разработки, посвященные экспериментальной регистрации и анализу электронных и колебательных спектров, нацеленному на извлечение структурных и энергетических характеристик молекул.

#### Литература для углубленного изучения:

1. Ф. Банкер, П. Йенсен, "Симметрия молекул и спектроскопия", Москва: Мир, 2004.
2. П.А. Браун, А.А. Киселев, "Введение в теорию молекулярных спектров", Ленинград: Изд. ЛГУ, 1983.
3. А.А. Мальцев, "Теоретическое введение к практическим работам по молекулярной спектроскопии", Москва: Изд. МГУ, 1975.
4. Г. Герцберг, "Электронные спектры и строение двухатомных молекул", М: Мир, 1967.
5. Г. Герцберг, "Электронные спектры и строение многоатомных молекул", М: Мир, 1969.

#### 8. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу.

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках.

Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

#### Основная литература

1. У. Флайгер, "Строение и динамика молекул", Москва: Мир, 1982, том 1 (главы 1, 3, 4).
2. А.С. Давыдов, "Квантовая механика", Москва: Физматлит, 1963 (главы 9 и 12)
3. Ю.В. Новаковская. "Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением", часть II "Квантовые состояния молекул", Москва: УРСС, 2004.
4. Ю.В. Новаковская, "Молекулярные системы: теория строения и взаимодействия с излучением", Москва: УРСС, 2004, ч. III "Полуклассическая теория взаимодействия молекул с излучением", Москва: УРСС, 2004.
5. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, т. 3 "Квантовая механика (нерелятивистская теория)", Москва: Наука, 1989 (главы 6 и 13).
6. Ефремов Ю. С. Квантовая механика 2-е изд., испр. и доп. Учебное пособие для вузов. Юрайт. 2021.
7. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов. Издательство "Лаборатория знаний». 2021.

#### Дополнительная литература

1. Е. Вильсон, Дж. Дешиус, П. Кросс. "Теория колебательных спектров молекул", Москва: Изд. ин. лит., 1960.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, "Теория поля" (том 2). Москва: Наука, 1988.
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, "Механика" (том 1). Москва: Наука, 1988.

4. В.М. Татевский, "Строение молекул", Москва: Химия, 1977.
5. Р. Драго, "Физические методы в химии", 2 тома, Москва: Мир, 1981.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

**НОВАКОВСКАЯ ЮЛИЯ ВАДИМОВНА**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической химии МГУ, [jnovakovskaya@gmail.com](mailto:jnovakovskaya@gmail.com)

### **Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения**

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

#### **Вопросы к коллоквиуму**

1. Молекулярная задача в квантовой механике. Стационарное уравнение Шредингера и ядерная задача в адиабатическом приближении. Адиабатический потенциал и теорема Гельмана-Фейнмана.
2. Лабораторная и молекулярная системы координат. Анализ динамики ядерной подсистемы: условия Экарта и выделение кинетической энергии поступательного движения, вращения и колебаний молекулы.
3. Вращение молекулярной системы. Главные оси инерции. Молекулярные волчки: сферические, симметричные и асимметричные; связь с симметрией ядерной конфигурации. Вращательная функция Гамильтона и вращательные постоянные. Общий вид решения вращательной задачи в случае сферических и симметричных волчков. Вариационный подход к анализу состояний асимметричных волчков. Спектры энергетических состояний различных волчков.
4. Колебания молекул. Квадратичная аппроксимация адиабатического потенциала. Нормальные координаты. Модель колеблющейся молекулы как совокупности не взаимодействующих гармонических осцилляторов. Симметрия колебаний. Невырожденные и вырожденные колебания.
5. Ангармонизм и взаимодействие колебаний. Применение теории возмущений для уточнения решений колебательной задачи и представление энергии колебательных состояний молекул в виде ряда по степеням  $(v_i + 1/2)$ .
6. Учет колебательно-вращательного взаимодействия в рамках теории возмущений и зависимость вращательных постоянных от колебательного возбуждения молекул.

7. Движения большой амплитуды в молекулах. Опорная конфигурация. Внутреннее вращение: анализ задачи с использованием вариационного подхода. Свободное и заторможенное вращение, крутильные колебания.
8. Электронно-колебательное взаимодействие. Учет смещений ядер как возмущения электронной задачи. Эффект Яна-Теллера: неустойчивость высокосимметричных конфигураций ядер в вырожденных электронных состояниях.
9. Молекула в поле электромагнитной волны. Временное уравнение Шредингера и условия применимости временной теории возмущений при анализе состояний молекул. Процессы, описываемые в первом и втором порядках теории возмущений: поглощение, испускание и рассеяние излучения. Полуклассическая теория взаимодействия молекул с излучением.
10. Поглощение и испускание излучения. Оценка вероятности процессов в дипольном приближении. Правила отбора в спектрах поглощения. Приближенный характер правил отбора и использование метода разделения переменных при их выводе.
11. Электронные спектры поглощения молекул. Принцип Франка-Кондона. Колебательная структура полосы и факторы Франка-Кондона.
12. Вращательные и колебательно-вращательные спектры поглощения двухатомных молекул. Правила отбора для соответствующих переходов. Вращательная структура полосы колебательного спектра.
13. Колебательно-вращательные спектры поглощения многоатомных молекул. Вращательные контуры полос. Фундаментальные, составные и обертоновые переходы в спектрах.
14. Правила отбора в спектрах рассеяния. Приближенный характер правил отбора и использование метода разделения переменных при их выводе.
15. Колебательно-вращательные спектры комбинационного рассеяния многоатомных молекул: правила отбора.

## **Варианты контрольных работ**

### Контрольная работа 1

- Определить тип молекулярного волчка и оценить соотношение главных моментов инерции предложенных частиц. Указать на рисунке молекулярной структуры расположение осей молекулярной системы координат, прокомментировав их положение по отношению к определенным структурным фрагментам и/или элементам симметрии частицы.
- Определить точечную группу симметрии, построить колебательное представление и указать, сколько колебаний какой симметрии есть у предложенной молекулы.
- На основании представленных в таблице значений предложить аппроксимацию сечения поверхности потенциальной энергии, отвечающего внутреннему вращению функциональных групп в предложенной молекуле. Пояснить выбор координаты и охарактеризовать структуры, отвечающие экстремальным точкам данного сечения. Сравните результаты, получающиеся при использовании одного наиболее существенного члена ряда Фурье и при его дополнении следующим с подходящим периодом.

## Контрольная работа 2

- Определите число линий в ИК- спектрах поглощения и комбинационного рассеяния предложенной молекулы.
- Формально однократно возбужденные конфигурации молекулы могут возникать при переходе электрона с высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) на виртуальные орбитали (МО). Считая однодетерминантное приближение применимым для описания всех интересующих состояний молекулы и полагая изменение остальных орбиталей при таком возбуждении пренебрежимо малым, на основании приведенных изображений ВЗМО я ряда виртуальных МО указать, какие возбуждения с наибольшей вероятностью должны реализоваться при поглощении данной молекулой энергии излучения с подходящей частотой, а какие наименее вероятны.
- Согласно анализу ЭПР-спектра предложенного радикала были определены константы сверхтонкого взаимодействия. На основании этих данных определить характер локализации орбитали неспаренного электрона и представить качественный вид зарегистрированного ЭПР-спектра.

## Вопросы для подготовки к экзамену:

1. Ядерная задача в адиабатическом приближении. Адиабатический потенциал и теорема Гельмана-Фейнмана.
2. Условия Экарта, границы их применимости и разделение поступательного движения, вращения и колебаний молекулы.
3. Вращение молекулярной системы. Главные оси инерции. Классификация молекулярных волчков; связь с симметрией ядерной конфигурации.
4. Вращательная функция Гамильтона и вращательные постоянные. Общий вид решения вращательной задачи в случае сферических и симметричных волчков.
5. Колебания молекул. Аппроксимация адиабатического потенциала. Нормальные координаты и нормальные колебания.
6. Колебания многоатомных молекул. Симметрия колебаний. Невырожденные и вырожденные колебания.
7. Ангармонизм и взаимодействие колебаний. Применение теории возмущений для уточнения решений колебательной задачи.
8. Колебательно-вращательное взаимодействие: зависимость вращательных постоянных от колебательного возбуждения молекул.
9. Молекулы с внутренним вращением: анализ задачи с использованием вариационного подхода. Свободное и заторможенное вращение, крутильные колебания.
10. Электронно-колебательное взаимодействие. Устойчивость высокосимметричных конфигураций ядер. Эффект Яна-Теллера.
11. Молекула в постоянном электрическом поле. Электрический дипольный момент и поляризуемость молекулы.
12. Молекула в постоянном магнитном поле. Магнитный дипольный момент. Эффект Зеемана..

13. Вероятности процессов поглощения и испускания, описываемых в первом порядке теории возмущений, при действии на молекулу поля электромагнитной волны. Дипольное приближение.
14. Вероятности процессов рассеяния, описываемых во втором порядке теории возмущений, при действии на молекулу поля электромагнитной волны.
15. Феноменологическая модель Эйнштейна: равновесное состояние системы «молекула в поле излучения». Коэффициенты Эйнштейна.
16. Правила отбора в спектрах поглощения. Приближенный характер правил отбора и использование метода разделения переменных при их выводе.
17. Электронные спектры поглощения молекул. Принцип Франка-Кондона. Колебательная структура полосы и факторы Франка-Кондона (на примере двухатомной молекулы).
18. Вращательные спектры поглощения двухатомных молекул. Правила отбора.
19. Колебательно-вращательные спектры поглощения двухатомных молекул. Правила отбора и вращательная структура полосы колебательного спектра.
20. Колебательно-вращательные спектры поглощения многоатомных молекул. Фундаментальные, составные и обертоновые переходы в спектрах.
21. Правила отбора в спектрах рассеяния. Приближенный характер правил отбора и использование метода разделения переменных при их выводе.
22. Колебательно-вращательные спектры комбинационного рассеяния многоатомных молекул: правила отбора.
23. Электронный парамагнитный резонанс: общие правила отбора для дублетных систем и структура линий спектра.
24. Ядерный магнитный резонанс: общие правила отбора для синглетных систем и структура линий спектра при учете спин-спинового взаимодействия ядер.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные	Сформированные систематиче-

	знаний		знания	ские знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
<p>Знать: основные приближения квантовой химии и принципы методов, используемых при расчетах электронной структуры, строения и реакционной способности химических соединений</p> <p>Знать границы применимости расчетных результатов квантовой механики в статистической термодинамике, теории элементарного акта химических превращений, молекулярной спектроскопии и других разделах современной химии</p> <p>Знать: требования к оформлению и представлению результатов квантово-химических расчетных работ</p> <p>Знать: математические и физические модели, используемые при решении типовых задач курса Строение молекул</p> <p>Знать: ограничения и границы применимости физических и математических моделей в химии</p> <p>Знать: структурные, энергетические и спектральные характеристики молекулярных систем, которые могут быть определены с использованием современных квантовохимических методов расчетов и экспериментальных спектроскопических подходов</p> <p>Знать: основные базы данных в области структурной, энергетической и спектральной информации</p> <p>Знать: требования к оформлению и представлению результатов работ в области строения и динамики молекул</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Уметь: находить необходимые для работы сведения в открытых источниках информации</p> <p>Уметь: сопоставлять информацию из разных источников, оценивать ее достоверность</p> <p>Уметь: формулировать научные гипотезы при обсуждении литературных и собственных данных</p> <p>Уметь: выбирать коммуникативно приемлемый стиль делового общения, использовать необходимые языковые средства, тактики и стратегии для решения коммуникативных задач в академической и профессиональной сферах</p>	<p>Мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>

<p>Уметь: работать с учебными и научными текстами разного уровня сложности, отвечающими задачам профессиональной деятельности</p> <p>Уметь: использовать программные средства удаленного коллективного доступа для решения задач научной деятельности</p> <p>Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.)</p> <p>Уметь: использовать теоретические модели для обоснования строения и реакционной способности веществ различной природы, планирования синтетических работ</p> <p>Уметь: получать структурные, энергетические и спектральные данные, проводить их математическую обработку</p> <p>Уметь: проводить математическую обработку структурных, энергетических и спектральных данных, обобщать полученные результаты</p> <p>Уметь: интерпретировать результаты физико-математического моделирования свойств химических объектов</p> <p>Уметь: оценить корректность результатов теоретических расчетов и экспериментального определения структурных, энергетических и спектральных характеристик молекулярных систем</p> <p>Уметь: использовать физические законы и представления при интерпретации уравнений, определяющих ядерные состояния молекулярных систем и вероятности изменения состояний систем при взаимодействии с излучением, и результатов, полученных при их решении</p> <p>Уметь: проводить необходимые математические преобразования при решении задач строения и динамики молекул</p> <p>Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации структурно-энергетического и спектроскопического содержания</p>	
<p>Владеть навыками поиска и критического анализа информации по теме научного проекта</p> <p>Владеть: навыками обмена профессиональной информацией с учетом основных требований информационной безопасности</p> <p>Владеть: навыками оформления протоколов результатов изучения структурных, энергетических и спектральных характеристик молекул</p> <p>Владеть: навыками физико-математического моделирования свойств химических объектов и процессов с их участием</p> <p>Владеть: навыками использования базовых физических знаний при решении химических задач</p> <p>Владеть: навыками работы с профессиональными базами данных структурно-энергетического и спектроскопического профиля</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>

