

## МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»  
(СПбГТИ(ТУ))

### **ОПИСАНИЕ<sup>1</sup>**

дополнительной профессиональной программы повышения квалификации  
(далее - программа)  
«Квантово-химические подходы к оптимизации процессов синтеза низкоразмерных систем  
методом молекулярного наслаивания»

### **1. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ**

#### ***знать:***

- основные принципы метода молекулярного наслаивания (МН);
- физико-химические основы получения композиционных материалов (А/03.6);
- возможности технологии молекулярного наслаивания по синтезу нанопокрывтий заданного состава и строения;
- методы проектирования технологических процессов и режимов производства с использованием квантово-химических расчетов (для должностей: главный технолог; инженер-технолог (технолог));
- основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов.

#### ***уметь:***

- осуществлять анализ и интерпретацию результатов квантово-химического расчета низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц;
- оценивать тенденции влияния технологических параметров процесса молекулярного наслаивания на состав продуктов на основе результатов квантово-химического моделирования;
- подбирать технологические параметры процесса производства наноструктурированных композиционных материалов (А/03.6).

#### ***владеть навыками:***

- построения квантово-химических моделей процессов, протекающих на различных стадиях молекулярного наслаивания;
- проведения квантово-химических расчетов;
- использования математического аппарата обработки и анализа квантово-химических данных.

---

<sup>1</sup> Составлено на основании разделов 2, 5, 6, 7 утвержденной программы и установленного шаблона

## 2. РАБОЧИЕ ПРОГРАММЫ УЧЕБНЫХ ПРЕДМЕТОВ, КУРСОВ, ДИСЦИПЛИН (МОДУЛЕЙ), ПРАКТИК, СТАЖИРОВОК, РАЗДЕЛОВ, ТЕМ

### 2.1 Содержание лекций

№ темы	Название темы	Объем, час
1	<b>Синтез наноматериалов и наноструктур по технологии молекулярного наслаивания</b> Остовно-функциональное строение твердого вещества. Реакции функционалов и остовные реакции твердого вещества. Принципы метода молекулярного наслаивания. Формирование многослойных и многозонных структур методом молекулярного наслаивания. Программирование состава и толщины зон с точностью в один монослой полиэдров.	1
	Получение функциональной поверхности с заданной реакционной способностью. Регулирование физико-химических свойств поверхностных структур. Регулирование параметров пористой структуры твердого тела и его приповерхностного слоя. Термическая устойчивость тонкослойных систем. Проведение синтеза оксидных, нитридных и сульфидных покрытий. Травление атомарного слоя (Atomic Layer Etching).	1
2	<b>Основные принципы и методология проведения квантово-химических расчетов</b> Основы квантовой механики. Теория Планка. Корпускулярно-волновой дуализм. Принцип Гейзенберга. Уравнение Шредингера. Квантовые числа. Жесткий ротатор, гармонический осциллятор. Квантовая частица в потенциальной яме, туннелирование. Атом водорода. Электронные орбитали, набор квантовых чисел. Атом гелия, межэлектронное отталкивание, кулоновское и обменное взаимодействие.	1
	Квантово-химические программные пакеты. Принципиальные возможности прогнозирования состава, строения и свойств химических объектов с помощью квантовой химии. Аппаратные ограничения и пределы. Методы анализа выходного файла квантово-химического расчета. Ключевые слова и заголовки для поиска данных. Оценка корректности завершения расчета.	2
	Методы учета электронной корреляции. Поправки теории возмущений Меллера-Плессе различного порядка. Конфигурационное взаимодействие. Методы мультikonфигурационного самосогласованного поля и активное пространство. Методы связанных кластеров. Методы теории функционала плотности. Обменная и корреляционная составляющие. Гибридные функционалы.	1
3	<b>Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов</b> Колебательные спектры. Гармоническое приближение, ангармонические поправки. Расчет вероятности поглощения и комбинационного рассеяния. Спектры оптического поглощения, многодетерминантное приближение CIS и TDDFT, расчет характеристической энергии и вероятности поглощения. Прогнозирование спектров ЯМР.	1
4	<b>Прогнозирование химических превращений на поверхности твердофазных матриц методами квантовой химии</b> Феноменологические модели: химическая кинетика, химическая термодинамика. Правило фаз Гиббса. Метод поиска экстремумов характеристических функций.	3

№ темы	Название темы	Объем, час
Всего		<b>10</b>

## 2.2 Содержание лабораторных занятий

№ темы	Содержание занятия	Объем, час
2	Подготовка расчетных заданий и выполнение квантово-химических расчетов для низкомолекулярных систем: выбор базисного набора АО и уровня теории.	1
	Расчетный анализ химического и электронного строения низкоразмерных систем: межатомные расстояния, порядок химических связей, электронные энергетические уровни. Полная энергия системы.	1
3	Прогноз колебательных спектров для низкоразмерных структур на поверхности твердой подложки. Оценка способов спектральной идентификации поверхностных центров	1
4	Термодинамический анализ химических процессов между активными центрами на поверхности твердофазных подложек с газофазными реагентами, априорный выбор оптимальной температуры синтеза и давления паров реагента.	3
Всего		<b>6</b>

### **3. ФОРМЫ АТТЕСТАЦИИ, ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ**

#### **3.1. Формы контроля и аттестации, оценочные материалы по учебным предметам, курсам, дисциплинам (модулям), практикам, стажировкам, разделам, темам**

Промежуточная аттестации и текущий контроль в программе не предусмотрены.

#### **3.2.Оценочные материалы для итоговой аттестации**

Итоговая аттестация проводится в форме зачета в виде устного ответа по основным темам программы.

##### **3.2.1 Вопросы к итоговой аттестации по освоению программы**

1. Реакции молекулярного наслаивания как химические превращения в гомологическом ряду твердых веществ.
2. Технологические стадии осуществления одного цикла молекулярного наслаивания и технологические параметры при организации процесса МН.
3. Схема экспериментальной установки с реактором проточного типа и описание процесса синтеза оксидного покрытия.
4. Уравнение Шредингера. Квантовые числа. Жесткий ротатор, гармонический осциллятор.
5. Квантово-механическое описание многоэлектронных систем. Метод ЛКАО. Метод самосогласованного поля.
6. Приближение Хартри-Фока (ХФ). Проблема сходимости ХФ. Особенности реализации метода ХФ для систем с открытыми оболочками.
7. Атомный базис (слэтеровский и гауссовский). Размер базиса. Валентное расщепление. Поляризационные и диффузные функции. Хартри-Фоковский предел.
8. Методы теории функционала плотности. Обменная и корреляционная составляющие. Гибридные функционалы.
9. Кластерное описание твердых тел. Псевдоатомы. Сходимость по размеру кластера.
10. Квазимолекулярные модели наноструктурированных материалов. Оценки размерных эффектов методами квантовой химии.
11. Перечень основных задач квантово-химических расчетов. Прогнозируемые свойства и характеристики.
12. Принципы анализа результатов квантово-химических расчетов. Программное обеспечение для анализа и визуализации квантово-химических данных.
13. Построение прогноза структуры веществ и материалов. Алгоритмы оптимизации. Зависимость строения от уровня теории. Понятие расчетной релаксации.
14. Прогнозирование колебательных спектров. Гармоническое приближение, ангармонические поправки. Расчет вероятности поглощения и комбинационного рассеяния.
15. Оценка химических равновесий с помощью квантово-химического моделирования. Расчет и анализ термодинамических потенциалов при различной температуре.

#### 4. ОРГАНИЗАЦИОННО-ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ

##### 4.1. Учебно-методическое обеспечение программы

###### 4.1.1. Основная литература:

1. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и Gauss View / Е.В.Бутырская.- Москва: СОЛОН-Пресс, 2011.- 218 с. - ISBN 978-5-91359-095-4
2. Грибов, Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: Учебное пособие / Л.А.Грибов.- Долгопрудный: Интеллект, 2010.- 310 с. - ISBN 978-5-91559-082-2
3. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков.- Москва: Юрайт, 2010.- 555 с. - ISBN 978-5-9916-0587-8. - ISBN 978-5-9692-0331-0 (ИД Юрайт)
4. Чернышев, С.Л. Моделирование и классификация наноструктур / С.Л.Чернышев.- Москва: Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2011.- 210 с. - ISBN 978-5-397-01466-3
5. Фундаментальные и прикладные основы нанотехнологии молекулярного наслаивания: Учебное пособие. / С.И.Кольцов, А.А.Малыгин, А.А.Малков, Е.А.Соснов. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2021. - 279 с.

###### 4.1.2. Дополнительная литература

1. Малыгин, А.А. Химическая сборка функциональных наноматериалов методом молекулярного наслаивания: конспект лекций / А.А.Малыгин.- Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2012.- 74 с.
2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие / В.И. Барановский. - Москва: Academia, 2008. - 383 с. - ISBN 978-5-7695-3961-9
3. Гусев, А.И. Наноматериалы. Наноструктуры. Нанотехнологии / А.И.Гусев. - Москва: Физматлит, 2007. - 415 с. - ISBN 978-5-9221-0582-8
4. Елисеев, А.А. Функциональные наноматериалы / А.А.Елисеев, А.В.Лукашин; под ред. Ю.Д.Третьякова. – Москва: Физматлит, 2010. – 456 с. - ISBN 978-5-9221-1120-1
5. Суздальев, И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П.Суздальев. – Изд. 2-е испр. – Москва: Книжный дом «ЛИБРОМ», 2009. – 592 с. - ISBN 978-5-397-00217-2
6. Рамбиди, Н.Г. Физические и химические основы нанотехнологий / Н.Г.Рамбиди, А.В. Березкин. - Москва: Физматлит, 2009.– 454 с. - ISBN 978-5-9221-0988-8.

##### 4.2 Материально-техническое обеспечение программы

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
Аудитория	лекции	Компьютер с выходом в локальную сеть СПбГТИ (ТУ) и в Интернет, мультимедийный проектор, экран, доска. Программные пакеты MathCAD, MS EXCEL, GAUSSIAN, GAUSSVIEW
Технологическая лаборатория	лабораторные занятия	Компьютерный класс с выходом в локальную сеть СПбГТИ (ТУ) и в Интернет. Персональный компьютер преподавателя. Программные пакеты MathCAD, MS EXCEL, MS WORD, GAUSSIAN, GAUSSVIEW

#### **4.3.Кадровые условия реализации программы**

Программа реализуется квалифицированными специалистами в области получения и квантовохимического моделирования наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами, в т.ч. из числа сотрудников Первого Всероссийского инжинирингового центра технологии молекулярного наслаивания (ИЦТМН) СПбГТИ(ТУ).