

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 13.09.2023 17:26:24  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

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

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по учебной  
и методической работе  
\_\_\_\_\_ Б.В.Пекаревский  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2021 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**КВАНТОВАЯ ХИМИЯ СТРУКТУРИРОВАННЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ**

Направление подготовки

**18.04.01 Химическая технология**

Программа магистратуры

**Химическая технология материалов и изделий электронной техники**

Квалификация

**Магистр**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **Химии веществ и материалов**

Кафедра **Химической нанотехнологии и материалов электронной техники**

Санкт-Петербург

2020

**Б1.В.07**

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Доцент		доцент С.Д. Дубровенский
Доцент		Е.О. Дроздов

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия структурированных наноматериалов»  
обсуждена на заседании кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной  
техники

протокол от \_\_\_\_ . \_\_\_\_ . 2020 № \_\_\_\_

Заведующий кафедрой ХНиМЭТ

профессор А.А. Малыгин

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов

протокол от \_\_\_\_ . \_\_\_\_ . 2020 № \_\_\_\_

Председатель

доцент С.Г. Изотова

## СОГЛАСОВАНО

Руководитель ООП «Химическая технология»		доцент М.В. Рутто
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы .....	05
3. Объем дисциплины.....	05
4. Содержание дисциплины .....	06
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины ....	06
4.3. Занятия лекционного типа.....	07
4.4. Занятия семинарского типа .....	08
4.4.1. Семинары, практические занятия .....	08
4.4.2. Лабораторные занятия.....	09
4.5. Самостоятельная работа.....	09
4.5.1. Темы курсовых работ .....	10
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	10
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	11
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	12
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины .....	12
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	13
10.1. Информационные технологии .....	13
10.2. Программное обеспечение .....	13
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	13
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	13
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	14
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	15

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Для освоения образовательной программы магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p><b>ПК-3</b> Способен строить и использовать модели для описания и прогнозирования характеристик материалов, осуществлять их качественный и количественный анализ, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования</p>	<p><b>ПК-3.3</b> Способность к использованию методов квантово-химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов</p>	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- теоретические основы квантовой механики и квантовой химии (ЗН-1).</li> <li>- основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов (ЗН-2).</li> <li>- основные принципы квантово-химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов (ЗН-3).</li> <li>- возможности использования квантово-химических моделей для прогнозирования свойств реальных объектов (ЗН-4).</li> <li>- способы оценки адекватности квантово-химических моделей и прогнозов (ЗН-5).</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- осуществлять подготовку исходных данных для проведения квантово-химических расчетов (У-1).</li> <li>- осуществлять анализ результатов квантово-химических расчетов (У-2).</li> <li>- строить на основе квантово-химических расчетных данных прогнозы физических и химических свойств моделируемых объектов (У-3).</li> </ul> <p><b>Владеть:</b> методиками проведения квантово-химических расчетов, специализированным программным обеспечением (Н-1).</p>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина "Квантовая химия структурированных наноматериалов" относится к части Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы магистратуры, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.07) и изучается на втором году обучения в 3 семестре.

Изучение дисциплины базируется на знаниях и умениях, полученных в ходе обучения по программам бакалавриата по направлению подготовки 18.03.01 при изучении курсов физики, физической химии твердого тела, методов исследования наносистем и наноматериалов.

Полученные в процессе освоения дисциплины знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе магистранта, а также при выполнении магистерских диссертаций по тематике, связанной с созданием наноматериалов.

## 3. Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц / академических часов)	<b>4 / 144</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>76</b>
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	36 (9)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	-
курсовое проектирование (КР или КП)	18
КСР	4
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>68</b>
<b>Формы текущего контроля</b>	<b>-</b>
<b>Форма промежуточной аттестации</b>	<b>зачет, КР</b>

#### 4. Содержание дисциплины

##### 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1	Общие принципы квантово-химических расчетов	4	6		14	ПК-3
2	Квантово-механическое описание много-электронных систем и базисные наборы атомных орбиталей	4	6		14	ПК-3
3	Учет взаимной корреляции движения электронов	2	8		14	ПК-3
4	Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов	4	8		14	ПК-3
5	Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии	4	8		12	ПК-3

##### 4.2 Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ПК-3.3	Общие принципы квантово-химических расчетов Квантово-механическое описание многоэлектронных систем и базисные наборы атомных орбиталей Учет взаимной корреляции движения электронов Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии

### 4.3. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<b>Общие принципы 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	4	Лекция-беседа
2	<b>Квантово-механическое описание многоэлектронных систем и базисные наборы атомных орбиталей</b> Основные приближения квантовой химии (одноэлектронное, адиабатическое). Метод МО ЛКАО. Метод самосогласованного поля. Приближение Хартри-Фока (ХФ). Особенности реализации метода ХФ для систем с открытыми оболочками (ограниченный, неограниченный и ограниченный по спину методы ХФ). Проблема сходимости ХФ. Полуэмпирические и неэмпирические квантовые расчеты. Связь размерности электронной подсистемы с необходимой вычислительной мощностью.	4	Лекция-беседа
3	<b>Учет взаимной корреляции движения электронов</b> 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	2	Лекция-беседа
4	<b>Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов</b> Расчетные методы теоретической оценки колебательных состояний	4	Лекция-визуализация
5	<b>Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии</b> Использование теоретических подходов для оценки термодинамических характеристик для прогнозирования равновесного состава продуктов химических превращений	4	Лекция-беседа

#### 4.4. Занятия семинарского типа

##### 4.4.1. Семинары, практические занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в т.ч. на практическую подготовку	
1	<b>Общие принципы квантово-химических расчетов</b> Аппаратные требования для квантово-химических расчетов. Программные средства для квантовой химии	3	1	Групповая научная дискуссия
1	<b>Программное обеспечение для квантово-химических расчетов</b> Файл-ориентированный текстовый интерфейс. Формирование расчётного задания. Анализ расчетных данных.	3	1	Разбор конкретных ситуаций
2	<b>Квантово-механическое описание многоэлектронных систем и базисные наборы атомных орбиталей.</b> Атомный базис атомных орбиталей (слэтеровский и гауссовский). Размер базисного набора. Валентное расщепление. Поляризационные и диффузные функции	6	1	
3	<b>Учет взаимной корреляции движения электронов</b> Сравнительный анализ методов Хартри-Фока, Меллера-Плессе и DFT	8	1	Компьютерное моделирование и практический анализ результатов
4	<b>Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов</b> Колебательные состояния. Гармоническое и ангармоническое приближения. Расчетные частоты колебаний. Прогноз интенсивности полос в ИК- и КР спектров	4	1	Компьютерное моделирование и практический анализ результатов
	<b>Расчетный прогноз колебательных спектров низкоразмерных структур на поверхности кремнезема</b>	4	1	Разбор конкретных ситуаций

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в т.ч. на практическую подготовку	
5	<b>Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии</b> Прогнозирование термодинамических характеристик методами квантовой химии	4	1	Компьютерное моделирование и практический анализ результатов
	<b>Прогнозирование термодинамических характеристик и равновесного состава продуктов реакции</b>	4	2	Разбор конкретных ситуаций

#### 4.4.2. Лабораторные занятия

Учебным планом не предусмотрены.

#### 4.5. Самостоятельная работа обучающихся

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	<b>Теоретические основы квантовой химии</b> Квантово-химическое моделирование периодических систем. Одномерные, двумерные и трехмерные кристаллы. Особенности моделирования ковалентных кристаллов. Кластерный подход. Аморфные твердые тела	14	опрос
2	<b>Программное обеспечение и методология проведения квантово-химических расчетов</b> Сравнительный анализ квантово-химических пакетов. Роль распределенных вычислений и компьютерных кластеров в квантовой химии. Графические интерфейсы к квантово-химическим программам.	14	опрос
3	<b>Методология и алгоритмы анализа результатов квантово-химических расчетов</b> Визуализация квантово-химических моделей	14	опрос
4	<b>Прогнозирование спектральных характеристик твердофазных объектов</b> Теоретическая оценка спектров комбинационного рассеяния	14	опрос
5	<b>Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии</b> Молекулярная динамика. Силовое поле. Анализ динамики сложных систем. Прогнозирование фазовых переходов	12	опрос

#### 4.5.1. Темы курсовых работ.

1. Прогноз равновесного состава продуктов взаимодействия паров  $TiCl_4$  с изолированными группами поверхности кремнезема на основе квантово-химических данных
2. Расчет энергии сорбции молекулярной воды на поверхности  $SiO_2$
3. Расчет оптимальной температуры синтеза  $Si_3N_4$  из газовой фазы
4. Разработка способов идентификация локальных центров на поверхности оксида титана по данным квантово-химических расчетов
5. Прогноз кинетических характеристик процесса дегидроксилирования поверхности кремнезема
6. Использование квантовой химии для расчета динамики хлорирования ОН-групп на поверхности оксидов нуклеофильными молекулярными агентами

#### 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

1. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011.– 60 с. (ЭБ)
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И.Ермаков.- М.: Юрайт, 2010.- 555 с. (ЭБ)
3. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и Gauss View / Е.В.Бутырская.- М.: СОЛОН-Пресс, 2011.- 218 с.
4. Дубровенский, С.Д. Компьютерный дизайн и визуализация молекулярных объектов : Практикум / С. Д. Дубровенский. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2016. - 16 с. (ЭБ)

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>

#### 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («зачтено») освоения предусмотренных элементов компетенций. Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине – в конце 3 семестра в виде защиты курсовой работы и зачета в устной форме. К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и включает 2 вопроса из различных тем пройденного материала. Время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Результаты зачета включаются в приложение к диплому.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

Примеры вопросов, предлагаемых на зачете:

1. Моделирование точечных дефектов в кристаллах. Сверхячейка.
2. Полуэмпирические и неэмпирические квантовые расчеты. Связь размерности электронной подсистемы с необходимой вычислительной мощностью
3. Решение уравнения Шредингера для квантовой частицы в потенциальной яме, туннелирование.
4. Прогнозирование спектров ЯМР. Расчет постоянной экранирования, изотропного химического сдвига и параметров анизотропии.
5. Программное обеспечение для квантовой химии. Основные программные пакеты. Файл-ориентированный интерфейс. Принципы подготовки задания для расчета.

## 7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

### а) печатные издания:

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. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. - 57 с.
4. Дубровенский, С.Д. Компьютерный дизайн и визуализация молекулярных объектов : Практикум / С. Д. Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2016. - 16 с.
5. 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)
6. Мартинсон, Л.К. Квантовая физика: Учебное пособие для вузов по техническим направлениям и спец. / Л.К.Мартинсон, Е.В.Смирнов.- 3-е изд.- Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2009.- 527 с. - ISBN 978-5-7038-3371-1
7. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие для вузов по химико-технологическим направлениям и спец./ В.Г. Цирельсон.- Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010.- 495 с. - ISBN 978-5-9963-0080-8
8. Чернышев, С.Л. Моделирование и классификация наноструктур / С.Л.Чернышев.- Москва: Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2011.- 210 с. - ISBN 978-5-397-01466-3

### б) электронные издания:

1. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. - 57 с. // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.
2. Дубровенский, С.Д. Компьютерный дизайн и визуализация молекулярных объектов : Практикум / С. Д. Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2016. - 16 с. // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.
3. Ермаков, А.И. Начальный курс квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков.- Электрон. текстовые дан. - Москва: Юрайт, 2010.- 555 с. – ISBN 978-5-9916-0587-8 (Юрайт). – ISBN 978-5-9692-0331-0 (ИД Юрайт) // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.

## **8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины**

1. Учебный план, РПД и учебно-методические материалы - [media.technolog.edu.ru](http://media.technolog.edu.ru)
2. ЭБ "Библиотех" СПбГТИ(ТУ) (доступ к сайту библиотеки) - [technolog.bibliotech.ru](http://technolog.bibliotech.ru);
3. Информационно-справочные поисковые системы и БД в сети Интернет;
4. Российское образование. Федеральный образовательный портал - <http://www.edu.ru/>
5. Всероссийский институт научной и технической информации. - <http://www.viniti.ru>
6. ГосНИИ информационных технологий. - <http://www.informika.ru>
7. Библиотека eLIBRARY. - [www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru)

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины**

Все виды занятий по дисциплине проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

1. СТО СПбГТИ(ТУ) 039-2013. Магистратура. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2013.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2013.- 25 с.
2. СТП СПбГТИ 040-02. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.07.2002.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2002.- 7 с.
3. СТО СПбГТИ(ТУ) 018-2014. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2014.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2014.- 16 с.
5. СТП СПбГТИ 048-2009. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2010.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2009.- 6 с.
6. СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. Порядок организации и проведения зачётов и экзаменов./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.06.2015. - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2015.- 45 с.

В ходе лекционных занятий магистранту необходимо готовить конспект лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; пометать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Провести проверку терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь.

Аудиторная часть курса должна сопровождаться интенсивной самостоятельной работой магистрантов с рекомендованными преподавателями литературными источниками и информационными ресурсами сети Интернет по всем разделам дисциплины. Планирование времени для изучения дисциплины необходимо осуществлять на весь период обучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо в рамках внеаудиторной самостоятельной работы регулярно дополнять сведениями из литературных источников, приведенных в разделе 7 настоящей программы. При этом на основе изучения рекомендованной литературы целесообразно составить конспект основных положений, терминов и определений, требующих запоминания и необходимых для освоения следующих разделов учебной дисциплины. Для расширения и углубления знаний по учебной дисциплине необходимо активно использовать информационные ресурсы сети Интернет.

В качестве рекомендаций по использованию Интернет-ресурсов можно предложить следующий план работы с Интернет-источниками:

- осуществить поиск библиографической информации на заданную тему на сайтах издательств: [www.elsevier.com](http://www.elsevier.com), [www.pubs.acs.org](http://www.pubs.acs.org), [www.rsc.org](http://www.rsc.org), [www.wiley.com](http://www.wiley.com), [www.springer.com](http://www.springer.com), [www.journals.aip.org](http://www.journals.aip.org), [www.publishaps.org](http://www.publishaps.org), а также с использованием библиографических поисковых систем [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com), [www.scirus.com](http://www.scirus.com)

- осуществить поиск патентной информации на заданную тему на сайтах [www.dpma.de](http://www.dpma.de), [www.uspto.gov](http://www.uspto.gov)

- для ознакомления с возможностями библиографических и химических баз данных, способам и условиям доступа к ним в режиме on- и off-line обратиться к сайтам [www2.viniti.ru](http://www2.viniti.ru), [www.cas.org](http://www.cas.org), [www.belstein.com](http://www.belstein.com), [www.gmelin.com](http://www.gmelin.com), [www.e-library.ru](http://www.e-library.ru) и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

- среди найденного материала, в первую очередь, необходимо просматривать сайты со строгим соответствием запросу и только затем просматривать остальные найденные сайты;

- при необходимости возможно напрямую обратиться к тому или иному сайту. Например, при поиске информации полезным может оказаться сайт [www.rushim.ru](http://www.rushim.ru), а также сайты государственных ВУЗов: МГУ, СПбГУ, АГУ и т.д.

Для работы на практических занятиях необходимы: проработка рабочей программы, уделив особое внимание целям и задачам структуре и содержанию дисциплины, и конспектирование источников, а также изучение конспекта лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам и просмотр рекомендуемой литературы.

Промежуточная аттестация по дисциплине – в конце 3 семестра в виде защиты курсовой работы и зачета в устной форме (включает 2 вопроса из различных тем пройденного материала). Результаты зачета включаются в приложение к диплому.

## **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

### **10.1. Информационные технологии.**

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций, видеоматериалов;
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

### **10.2. Программное обеспечение.**

Представление лекционного материала и проведение практических занятий:

ОС – не ниже MS Windows XP SP3

MS PowerPoint 97 и выше

Программный пакет GAMESS

### **10.3. Базы данных и информационные справочные системы**

1. ЭБ "Библиотех" СПбГТИ(ТУ) (доступ к сайту библиотеки);
2. Информационно-справочные поисковые системы и БД в сети Интернет; ЭБС «Лань»

## **11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Реализация программы учебной дисциплины не предполагает наличия специализированного учебного кабинета при условии соответствия учебных кабинетов санитарным нормам, а его оборудования – изложенным ниже требованиям:

1. Учебная аудитория на 10 и более мест
2. Персональный компьютер.
3. Мультимедиа-проектор (разрешение не хуже 1024×758).
4. Стационарный или переносной проекционный экран.
5. Комплект презентаций и видеofilмов по дисциплине.

Практические занятия проводятся в учебном кабинете, отвечающем санитарным нормам, а его оборудование – следующим требованиям:

1. Учебная аудитория на 10 и более мест
2. Персональный компьютер.
3. Мультимедиа-проектор (разрешение не хуже 1024×758).
4. Стационарный или переносной проекционный экран.

## **12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.**

Инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, допущенные по медицинским показаниям к обучению по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология, изучают дисциплину в полном объеме. Учебный процесс осуществляется в соответствии с "Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья ФГБОУ ВПО СПбГИ(ТУ)", утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине  
"Квантовая химия структурированных наноматериалов"**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

<b>Индекс компетенции</b>	<b>Содержание</b>	<b>Этап формирования</b>
<b>ПК-3</b>	Способен строить и использовать модели для описания и прогнозирования характеристик материалов, осуществлять их качественный и количественный анализ, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)	
			«не зачтено»	«зачтено»
<b>ПК-3.3</b> Способность к использованию методов квантового химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов	Знает теоретические основы квантовой механики и квантовой химии (ЗН-1).	Ответы на вопросы №№ 1-5 к зачету	Не знает теоретические основы квантовой механики и квантовой химии	Знает теоретические основы квантовой механики и квантовой химии
	Знает основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов (ЗН-2).	Ответы на вопросы №№ 6-10 к зачету	Не знает основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов	Знает основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов
	Знает основные принципы квантово-химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов (ЗН-3).	Ответы на вопросы №№ 11-13 к зачету	Не знает основные принципы квантово-химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов	Знает основные принципы квантово-химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов
	Знает возможности использования квантово-химических моделей для прогнозирования свойств реальных объектов (ЗН-4).	Ответы на вопросы №№ 14-16 к зачету	Не знает возможности использования квантово-химических моделей для прогнозирования свойств реальных объектов	Знает возможности использования квантово-химических моделей для прогнозирования свойств реальных объектов
	Знает способы оценки адекватности квантово-химических моделей и прогнозов (ЗН-5).	Ответы на вопросы №№ 17-19 к зачету	Не знает способы оценки адекватности квантово-химических моделей и прогнозов	Знает способы оценки адекватности квантово-химических моделей и прогнозов

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)	
			«не зачтено»	«зачтено»
	Умеет осуществлять подготовку исходных данных для проведения квантово-химических расчетов (У-1).	Ответы на вопросы №№ 20-23 к зачету	Не умеет осуществлять подготовку исходных данных для проведения квантово-химических расчетов	Умеет осуществлять подготовку исходных данных для проведения квантово-химических расчетов
	Умеет осуществлять анализ результатов квантово-химических расчетов (У-2).	Ответы на вопросы №№ 24-26 к зачету	Не умеет осуществлять анализ результатов квантово-химических расчетов	Умеет осуществлять анализ результатов квантово-химических расчетов
	Умеет построить на основе квантово-химических расчетных данных прогнозы физических и химических свойств моделируемых объектов (У-3).	Ответы на вопросы №№ 27-29 к зачету	Не умеет построить на основе квантово-химических расчетных данных прогнозы физических и химических свойств моделируемых объектов	Умеет построить на основе квантово-химических расчетных данных прогнозы физических и химических свойств моделируемых объектов
	Владеет методиками проведения квантово-химических расчетов, специализированным программным обеспечением (Н-1).	Ответы на вопросы №№ 30-32 к зачету	Не владеет методиками проведения квантово-химических расчетов, специализированным программным обеспечением	Владеет методиками проведения квантово-химических расчетов, специализированным программным обеспечением

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ (ТУ): промежуточная аттестация проводится в форме **зачета**. Критерии оценивания – **«зачтено»**, **«не зачтено»** приведены в таблице 2.

Оценка «зачтено» выставляется, если ответ студента отличается последовательностью, логикой изложения, учащийся демонстрирует глубину владения представленным материалом, ответы формулируются аргументировано, обосновывается собственная позиция в проблемных ситуациях.

Оценка «не зачтено» ставится, если ответ студента не передает содержание проблемы, не демонстрирует умение выделять главное, существенное, ответ носит краткий, неглубокий, поверхностный характер.

### 3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

#### а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-3

1. Основы квантовой механики. Теория Планка. Корпускулярно-волновой дуализм. Принцип Гейзенберга.
2. Уравнение Шредингера. Квантовые числа. Жесткий ротатор, гармонический осциллятор.
3. Решение уравнения Шредингера для квантовой частицы в потенциальной яме, туннелирование.
4. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Электронные орбитали, набор квантовых чисел. Вырождение по энергии.
5. Решение уравнения Шредингера для атома гелия, межэлектронное отталкивание, кулоновское и обменное взаимодействие
6. Квантово-механическое описание многоэлектронных систем. Метод ЛКАО. Метод самосогласованного поля.
7. Приближение Хартри-Фока (ХФ). Проблема сходимости ХФ.
8. Одномерные, двумерные и трехмерные кристаллы. Периодические условия. Волновые функции Блоха. Образование зон в кристаллах. Зона Бриллюэна.
9. Метод псевдопотенциала для описания кристаллов. Форма псевдопотенциала для основных уровней.
10. Кластерное описание твердых тел. Псевдоатомы. Сходимость по размеру кластера.
11. Квазимолекулярные модели наноструктурированных материалов. Оценки размерных эффектов методами квантовой химии.
12. Моделирование поверхности раздела твердых тел. Вакуумные слои. Двумерные кристаллы
13. Моделирование точечных дефектов в кристаллах. Сверхячейка.
14. Построение прогноза структуры веществ и материалов. Алгоритмы оптимизации. Зависимость строения от уровня теории. Понятие расчетной релаксации.
15. Анализ зарядовых состояний и распределения электронной плотности. Оценка порядка химической связи. Топология электронной плотности и способы оценки степени ионности.
16. Прогнозирование колебательных спектров. Гармоническое приближение, ангармонические поправки. Расчет вероятности поглощения и комбинационного рассеяния
17. Прогнозирование спектров оптического поглощения, многодетерминантное приближение CIS и TDDFT, расчет характеристической энергии и вероятности поглощения.
18. Прогнозирование спектров ЯМР. Расчет постоянной экранирования, изотропного химического сдвига и параметров анизотропии.
19. Оценка химических равновесий с помощью квантово-химического моделирования. Расчет и анализ термодинамических потенциалов при различной температуре
20. Особенности алгоритмов оптимизации для поиска переходных состояний. Оценка энергии переходного комплекса и констант скорости химических реакций.
21. Маршруты и пути реакции. Основные принципы квантово-химического анализа и прогноза механизмов химических реакций.
22. Полуэмпирические и неэмпирические квантовые расчеты. Связь размерности электронной подсистемы с необходимой вычислительной мощностью
23. Особенности реализации метода ХФ для систем с открытыми оболочками (ограниченный, неограниченный и ограниченный по спину методы ХФ). Роль межэлектронного отталкивания и вырождения по энергии.
24. Атомный базис (слэтеровский и гауссовский). Размер базиса. Валентное расщепление. Поляризационные и диффузные функции. Хартри-Фоковский предел.
25. Методы неитерационного учета электронной корреляции (поправки Меллера-Плессе (МП) различного порядка).

26. Конфигурационное взаимодействие. Методы мультконфигурационного самосогласованного поля и активное пространство.
27. Методы теории функционала плотности. Обменная и корреляционная составляющие. Гибридные функционалы
28. Методы прогнозирования состава, строения и свойств химических объектов с помощью квантовой химии.
29. Основные принципы аппаратной реализации квантово-химических расчетов, их ограничения и пределы. Способы повышения производительности. Клиент-серверный подход. Кластерные вычисления.
30. Программное обеспечение для квантовой химии. Основные программные пакеты. Файл-ориентированный интерфейс. Принципы подготовки задания для расчета.
31. Перечень основных задач квантово-химических расчетов. Прогнозируемые свойства и характеристики.
32. Принципы анализа результатов квантово-химических расчетов. Программное обеспечение для анализа и визуализации квантово-химических данных.

К зачету допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче зачета, студент получает 2 вопроса из перечня, приведенного выше.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

**4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

1. Положение о формах, периодичности и порядке проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в СПбГТИ(ТУ) (Утв. Приказом ректора СПбГТИ(ТУ) от 12.12.2014 № 463).

2. СТО СПбГТИ 039-2013. Магистратура. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2013.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2013.- 25 с.

3. СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. Порядок организации и проведения зачётов и экзаменов./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.06.2015. - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2015.- 45 с.