

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 27.04.2022 16:32:00  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84

**Рабочая программа дисциплины**  
**КВАНТОВАЯ ХИМИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Направление подготовки

**22.03.01 Материаловедение и технологии материалов**

Направленность образовательной программы

**Материаловедение и технологии конструкционных и функциональных материалов**

Профессиональный модуль

**Материаловедение и технологии наноматериалов и наносистем**

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчик		доцент С.Д. Дубровенский

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

протокол от 28.01.2016 № 03

Заведующий кафедрой

А.А.Малыгин

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов

протокол от 18.02.2016 № 05

Председатель

С.Г.Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Материаловедение и технологии материалов»		доцент Н.О.Тагильцева
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. Занятия лекционного типа.....	06
4.3. Занятия семинарского типа.....	07
4.3.1. Семинары, практические занятия .....	07
4.3.2. Лабораторные занятия.....	07
4.4. Самостоятельная работа.....	08
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	08
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	09
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	09
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	10
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	11
10.1. Информационные технологии.....	11
10.2. Программное обеспечение.....	11
10.3. Информационные справочные системы.....	11
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	11
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	11
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации....	12

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

Для получения планируемых результатов освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся в соответствии с ФГОС ВО по направлению "Материаловедение и технологии материалов" (22.03.01) (Утв. Приказом Минобрнауки России от 12.11.2015 № 1331) должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
<b>ПК-3</b>	Готовность использовать методы моделирования при прогнозировании и оптимизации технологических процессов и свойств материалов, стандартизации и сертификации материалов и процессов	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- теоретические основы квантовой механики и квантовой химии;</li> <li>- основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов;</li> <li>- основные принципы квантово-химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов;</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- осуществлять подготовку исходных данных для проведения квантово-химических расчетов;</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- основными методическими принципами анализа результатов квантово-химических расчетов.</li> </ul>
<b>ПК-6</b>	Способность использовать на практике современные представления о влиянии микро- и нано-структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями, частицами и излучениями	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- основные принципы и методы физико-химических методов анализа материалов, физические процессы, лежащие в основе этих методов</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- практически выполнять квантово-химические расчеты;</li> <li>- строить на основе квантово-химических расчетных данных прогнозы физических и химических свойств моделируемых объектов.</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- методиками проведения квантово-химических расчетов, специализированным программным обеспечением</li> </ul>
<b>ПК-7</b>	Способность выбирать и применять соответствующие методы моделирования физических, химических и технологических процессов	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- способы оценки адекватности квантово-химических моделей и прогнозов.</li> </ul>

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
		<p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использовать возможности квантово-химических моделей для прогнозирования свойств реальных объектов</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- методами квантово-химических расчетов и интерпретировать их результатов</li> </ul>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к профессиональному модулю по выбору Б1.В.ДВ.03.03. «Материаловедение и технологии наноматериалов и наносистем», является обязательной (Б1.В.ДВ.03.03.06) и изучается на 4 курсе обучения в 7 семестре.

Изучение дисциплины базируется на знаниях и умениях, полученных при изучении дисциплин «Химия», «Информатика», «Физика» и специальных дисциплин «Химическая технология наноматериалов и наносистем», «Физическая химия твердого тела и наноразмерных систем».

Полученные знания и навыки необходимы студентам при подготовке, выполнении и защите выпускной квалификационной работы и при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских и производственно-технологических задач.

## 3. Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц / академических часов)	<b>5 / 180</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>80</b>
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия	-
лабораторные работы	36
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	8
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>55</b>
<b>Формы текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	<b>экзамен (45)</b>

#### 4. Содержание дисциплины.

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

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1	Общие принципы квантово-химических расчетов.	2				ПК-3
2	Программное обеспечение и методология проведения квантово-химических расчетов	10		9	10	ПК-3
3	Учет взаимной корреляции движения электронов	10		9	15	ПК-6
4	Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов	10		9	15	ПК-7
5	Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии	4		9	15	ПК-7

##### 4.2. 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	2	Лекция-беседа
2	<b>Программное обеспечение и методология проведения квантово-химических расчетов</b> 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	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 мульт-	10	Лекция-беседа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	конфигурационного самосогласованного поля и активное пространство. Методы связанных кластеров. Методы теории функционала плотности. Обменная и корреляционная составляющие. Гибридные функционалы		
4	<b>Прогнозирование спектральных характеристик нанообъектов</b> Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов методами квантовой химии. 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	10	Лекция-беседа
5	<b>Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии</b> Термодинамический анализ химических процессов между активными центрами на поверхности твердофазных подложек с газофазными реагентами, априорный выбор оптимальной температуры синтеза	10	Лекция-беседа

#### 4.3. Занятия семинарского типа.

##### 4.3.1. Семинары, практические занятия.

Учебным планом не предусмотрены

##### 4.3.2. Лабораторные занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<b>Программное обеспечение и методология проведения квантово-химических расчетов</b> Подготовка расчетных заданий и выполнение квантово-химических расчетов для низкомолекулярных систем: выбор базисного набора АО и уровня теории.	9	
3	<b>Методология и алгоритмы анализа результатов квантово-химических расчетов</b> Расчетный анализ химического и электронного строения низкоразмерных систем: межатомные расстояния, порядок химических связей, электронные энергетические уровни. Полная энергия системы.	9	Компьютерное моделирование и практический анализ результатов
4	<b>Прогнозирование спектральных характеристик нанообъектов</b> Прогноз колебательных спектров для низкоразмерных структур на поверхности твердой подложки. Оценка способов спектральной идентификации поверхностных центров	9	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
5	<b>Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии</b> Термодинамический анализ химических процессов между активными центрами на поверхности твердофазных подложек с газофазными реагентами, априорный выбор оптимальной температуры синтеза	9	Разбор конкретных ситуаций

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
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.	10	компьютерная симуляция (2)
3	<b>Методология и алгоритмы анализа результатов квантово-химических расчетов</b> Визуализация квантово-химических моделей.	15	устный опрос (2)
4	<b>Прогнозирование спектральных характеристик нанообъектов</b> Квантово-химический прогноз спектров ядерного магнитного и квадрупольного резонанса. Оценка константы экранирования ядра.	15	научный диспут (2)
5	<b>Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии</b> Молекулярная динамика. Силовое поле. Анализ динамики сложных систем. Оценка термодинамических характеристик. Прогнозирование фазовых переходов.	15	устный опрос (2)

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

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов по химическим спец. / В.И.Барановский. - М.: Academia, 2008. - 383 с.
2. 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.
3. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков. - М.: Юрайт, 2010. – 555 с.
4. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и Gauss View / Е.В.Бутырская. - М.: СОЛОН-Пресс, 2011. - 218 с.

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 виде экзамена в устной форме (7 семестр). К экзамену допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Экзамены предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и включает по 2 вопроса из различных тем пройденного материала. Время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Результаты экзамена включаются в приложение к диплому.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

Примеры вопросов, предлагаемых на экзамене:

1. Атомный базис (слэтеровский и гауссовский). Размер базиса. Валентное расщепление. Поляризационные и диффузные функции. Хартри-Фоковский предел.
2. Прогнозирование колебательных спектров. Гармоническое приближение, ангармонические поправки. Расчет вероятности поглощения и комбинационного рассеяния

## **7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.**

### **Основная литература.**

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
2. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков. - М. : Юрайт, 2010. – 555 с.
3. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие для вузов по химико-технологическим направлениям и спец. / В.Г. Цирельсон. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с. :
4. Чернышев, С.Л. Моделирование и классификация наноструктур / С.Л.Чернышев. - М.: Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2011. - 210 с.
5. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и Gauss View / Е.В.Бутырская. - М.: СОЛОН-Пресс, 2011. - 218 с.

### **Дополнительная литература.**

1. Грибов, Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул : Учебное пособие / Л.А Грибов. - Долгопрудный: Интеллект, 2010. - 310 с.
2. Мартинсон, Л.К. Квантовая физика: Учебное пособие для вузов по техническим направлениям и спец. / Л.К.Мартинсон, Е.В.Смирнов. - 3-е изд. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2009. - 527 с.
3. Шиврин, Г.Н. Прикладная квантовая химия / Г.Н.Шиврин - Рязань: Голос губернии, 2009. - 313 с.

### **Вспомогательная литература.**

1. Банкер, Ф. Симметрия молекул и спектроскопия / Ф. Банкер, П. Йенсен; Пер. с англ. Ю. Н. Панченко и др., Под ред. Н.Ф.Степанова. - 2-е изд., перераб. - М.: Мир ; М. : Науч. мир, 2004. - 763 с.
2. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов по химическим спец. / В. И. Барановский. - М. : Academia, 2008. - 383 с.
3. Грибов, Л.А. Квантовая химия: учебник для химических и биологических спец. вузов / Л. А. Грибов, С. П. Муштакова. - М. : Гардарики, 1999. - 389 с.

4. Грибов, Л.А. Теория и методы расчета молекулярных процессов. Спектры, химические превращения и молекулярная логика: монография / Л. А. Грибов, В. И. Баранов ; РАН. Ин-т геохимии и аналит. химии им. В. И. Вернадского. - М. : КомКнига, 2006. - 476 с. :
5. Степанов, Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : учебник для химических фак. ун-тов / Н. Ф. Степанов. - М. : Мир ; М. : Изд-во Моск. ун-та, 2001. - 519 с.

#### **8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

1. ЭБ "Библиотех" СПбГТИ(ТУ) (доступ к сайту библиотеки);
2. Информационно-справочные поисковые системы и БД в сети Интернет;
3. Программный пакет MathCAD
4. Программный пакет MS EXCEL
5. Программный пакет GAMESS
6. Программный пакет GAUSSIAN

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

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

1. СТО СПбГТИ(ТУ) 026-2016. Положение о бакалавриате./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2016.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2016.- 38 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) 020-2011. Виды учебных занятий. Лабораторные работы. Общие требования к организации и проведению занятий./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.07.2011.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011.- 21 с.
4. 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.
5. 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 студенту 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 студентов 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.

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 виде экзамена в устной форме (7 семестр). Экзамен предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и включает по 2 вопроса из различных тем пройденного материала. Время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин. Результаты экзамена включаются в приложение к диплому.

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

### 10.1. Информационные технологии.

Чтение лекций с использованием слайд-презентаций, видеоматериалов, виртуальных лабораторий и баз данных.

### 10.2. Программное обеспечение.

Представление лекционного материала:

ОС – не ниже MS Windows XP SP3

MS PowerPoint 97 и выше

Проведение лабораторного практикума:

ОС – не ниже MS Windows XP SP3

Программные пакеты MathCAD, MS EXCEL, GAMESS, GAUSSIAN

### 10.3. Информационные справочные системы.

Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU <http://elibrary.ru>

## **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 25 и более мест
2. Персональный компьютер.
3. Мультимедиа-проектор (разрешение не хуже 1024×758).
4. Стационарный или переносной проекционный экран.
5. Комплект презентаций и видеофильмов по дисциплине.

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

1. Компьютерный класс на 25 и более мест, включающий не менее 6 персональных компьютеров с подключением к сети Internet
2. Персональный компьютер преподавателя.
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 22.03.01 Материаловедение и технологии материалов, 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 СПбГТИ(ТУ)", утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине  
«Квантовая химия наноструктурированных материалов»**

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

<b>Компетенция</b>		
<b>Индекс</b>	<b>Формулировка</b>	<b>Этап формирования</b>
<b>ПК-3</b>	Готовность использовать методы моделирования при прогнозировании и оптимизации технологических процессов и свойств материалов, стандартизации и сертификации материалов и процессов	промежуточный
<b>ПК-6</b>	Способность использовать на практике современные представления о влиянии микро- и нано-структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями, частицами и излучениями	промежуточный
<b>ПК-7</b>	Способность выбирать и применять соответствующие методы моделирования физических, химических и технологических процессов	промежуточный

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

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 1	Знает основные законы квантовой механики и квантовой химии	Правильные ответы на вопросы №№ 1-13	ПК-3
Освоение раздела № 2	Знает основные приближения квантовой химии и области их применения	Правильные ответы на вопросы № 14, 15	ПК-3
Освоение раздела № 3	Умеет строить квантово-химические модели веществ и материалов и проводить квантово-химические расчеты	Правильные ответы на вопросы №№ 16-22	ПК-6
Освоение раздела № 4	Владеет вычислительным аппаратом квантовой химии и оценкой необходимых вычислительных ресурсов	Правильные ответы на вопросы №№ 23-29	ПК-7
Освоение раздела № 5	Умеет интерпретировать расчетные результаты и прогнозировать свойства веществ и материалов	Правильные ответы на вопросы №№ 30-32	ПК-7

Успешность усвоения дисциплины характеризуется качественной оценкой на основании таблицы оценки сформированности компетенций, включающего совокупность критериев их освоения и выражается оценкой по пятибалльной шкале.

Качество освоения дисциплины	Уровень освоения дисциплины	Отметка в 5-балльной системе	Критерии
81-100 %	высокий	отлично	Теоретическое содержание дисциплины освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы, все предусмотренные рабочей программой дисциплины учебные задания выполнены.
66-80 %	средний	хорошо	Теоретическое содержание дисциплины освоено полностью, без пробелов, некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно, все предусмотренные рабочей программой дисциплины учебные задания выполнены, некоторые виды заданий выполнены с ошибками
51-65 %	средний	удовлетворительно	Теоретическое содержание дисциплины освоено частично, но пробелы не носят существенного характера, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы, большинство предусмотренных рабочей программой дисциплины учебных заданий выполнено, некоторые из выполненных заданий, возможно, содержат ошибки.
0-50 %	ниже среднего	неудовлетворительно	Теоретическое содержание дисциплины освоено частично, необходимые практические навыки работы не сформированы, большинство предусмотренных рабочей программой дисциплины учебных заданий не выполнено, не может объяснить результаты лабораторных работ, при дополнительной самостоятельной работе над материалом курса возможно повышение качества выполнения учебных заданий

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

#### а) Вопросы для оценки сформированности элементов 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. Полуэмпирические и неэмпирические квантовые расчеты. Связь размерности электронной подсистемы с необходимой вычислительной мощностью

9. Особенности реализации метода ХФ для систем с открытыми оболочками (ограниченный, неограниченный и ограниченный по спине методы ХФ). Роль межэлектронного отталкивания и вырождения по энергии.
10. Атомный базис (слэтеровский и гауссовский). Размер базиса. Валентное расщепление. Поляризация и диффузные функции. Хартри-Фоковский предел.
11. Методы неитерационного учета электронной корреляции (поправки Меллера-Плессе (МП) различного порядка).
12. Конфигурационное взаимодействие. Методы мультikonфигурационного самосогласованного поля и активное пространство.
13. Методы теории функционала плотности. Обменная и корреляционная составляющие. Гибридные функционалы
14. Основные принципы аппаратной реализации квантово-химических расчетов, их ограничения и пределы. Способы повышения производительности. Клиент-серверный подход. Кластерные вычисления.
15. Программное обеспечение для квантовой химии. Основные программные пакеты. Файл-ориентированный интерфейс. Принципы подготовки задания для расчета.

#### **б) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-6:**

16. Одномерные, двумерные и трехмерные кристаллы. Периодические условия. Волновые функции Блоха. Образование зон в кристаллах. Зона Бриллюэна.
17. Метод псевдопотенциала для описания кристаллов. Форма псевдопотенциала для основных уровней.
18. Кластерное описание твердых тел. Псевдоатомы. Сходимость по размеру кластера.
19. Квазимолекулярные модели наноструктурированных материалов. Оценки размерных эффектов методами квантовой химии.
20. Моделирование поверхности раздела твердых тел. Вакуумные слои. Двумерные кристаллы
21. Моделирование точечных дефектов в кристаллах. Сверхячейка.
22. Методы прогнозирования состава, строения и свойств химических объектов с помощью квантовой химии.

#### **в) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-7:**

23. Перечень основных задач квантово-химических расчетов. Прогнозируемые свойства и характеристики.
24. Принципы анализа результатов квантово-химических расчетов. Программное обеспечение для анализа и визуализации квантово-химических данных.
25. Построение прогноза структуры веществ и материалов. Алгоритмы оптимизации. Зависимость строения от уровня теории. Понятие расчетной релаксации.
26. Анализ зарядовых состояний и распределения электронной плотности. Оценка порядка химической связи. Топология электронной плотности и способы оценки степени ионности.
27. Прогнозирование колебательных спектров. Гармоническое приближение, ангармонические поправки. Расчет вероятности поглощения и комбинационного рассеяния
28. Прогнозирование спектров оптического поглощения, многодетерминантное приближение CIS и TDDFT, расчет характеристической энергии и вероятности поглощения.
29. Прогнозирование спектров ЯМР. Расчет постоянной экранирования, изотропного химического сдвига и параметров анизотропии.
30. Оценка химических равновесий с помощью квантово-химического моделирования. Расчет и анализ термодинамических потенциалов при различной температуре
31. Особенности алгоритмов оптимизации для поиска переходных состояний. Оценка энергии переходного комплекса и констант скорости химических реакций.
32. Маршруты и пути реакции. Основные принципы квантово-химического анализа и прогноза механизмов химических реакций.

К экзамену допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Каждый экзамен включает 2 вопроса из различных тем пройденного материала. 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(ТУ) 026-2016. Положение о бакалавриате./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2016.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2016.- 38 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.