

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 03.10.2023 16:25:58
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
«25» марта 2019 г.

Рабочая программа дисциплины
ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА И СВОЙСТВ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Направление подготовки

22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

Направленность программы бакалавриата

Высокотемпературные наноструктурированные композиционные материалы

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Очная

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **химической нанотехнологии и материалов электронной техники**

Санкт-Петербург

2019

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

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

Рабочая программа дисциплины «Оптимизация состава и свойств конструкционных материалов» обсуждена на заседании кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной техники

протокол от «23» 01 2019 № 3

Заведующий кафедрой

профессор А.А. Малыгин

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов
протокол от «21» марта 2019 № 6

Председатель

доцент С.Г. Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель ООП «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	06
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий	06
4.2. Занятия лекционного типа.....	06
4.3. Занятия семинарского типа	08
4.3.1. Семинары, практические занятия	08
4.3.2. Лабораторные занятия.....	11
4.4. Самостоятельная работа	11
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	11
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	12
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины	12
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	13
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	13
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	14
10.2. Программное обеспечение.....	14
10.3. Базы данных и информационные справочные системы	14
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы	14
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	14

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

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

В результате 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>ПК-2 Способен осуществлять рациональный выбор материалов и оптимизировать их расходование на основе анализа заданных условий эксплуатации материалов, оценки их надежности, экономичности и экологических последствий применения</p>	<p>ПК-2.2 Моделирование материалов на молекулярном уровне, прогнозирование и оптимизация их свойств методами квантовой химии и квантовой механики</p>	<p>Знать: Теоретические основы квантовой химии (ЗН-1) Уметь: осуществлять выбор программных средств для моделирования материалов, прогнозирования и оптимизации их свойств, а также анализировать и интерпретировать результаты квантово-химических расчетов (У-1) Владеть: навыками подготовки исходных данных для проведения квантово-химических расчетов, анализа и интерпретации полученных результатов (Н-1)</p>
<p>ПК-4 Способен моделировать процессы обработок и прогнозировать результаты их осуществления при различных режимах, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования</p>	<p>ПК-4.2 Использование теоретических и практических возможностей квантовой химии для выбора оптимальных технологических процессов синтеза низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц с использованием программных средств</p>	<p>Знать: основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов (ЗН-2) Уметь: осуществлять анализ и интерпретацию результатов квантово-химического расчета низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц (У-2) Владеть: навыками проведения квантово-химических расчетов (Н-2)</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам по выбору части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы магистратуры (Б1.В.03) и изучается на 1 курсе во 2 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплины «Аттестация свойств наноструктурированных материалов». Полученные в процессе изучения дисциплины «Оптимизация состава и свойств конструкционных материалов» знания, умения и навыки могут быть использованы магистрантами при прохождении преддипломной практики, при подготовке, выполнении и защите магистерских диссертаций по тематике, связанной с разработкой и внедрением инновационных наукоемких процессов, материалов и технологий, созданием функциональных или конструкционных наноматериалов и разработкой нанотехнологических процессов, а также при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских, производственно-технологических и организационно-управленческих задач в будущей профессиональной деятельности.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	6/216
Контактная работа с преподавателем:	96
занятия лекционного типа	32
занятия семинарского типа, в т.ч.	48
семинары, практические занятия	48
лабораторные работы	—
курсовое проектирование (КР или КП)	16
КСР	—
другие виды контактной работы	—
Самостоятельная работа	120
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	—
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	КП, Зачет

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	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1	Общие принципы моделирования материалов и процессов	4	4		24	ПК-2	ПК-2.2
2	Квантово-химическое моделирование молекулярных объектов	6	10		24	ПК-2 ПК-4	ПК-2.2 ПК-4.2
3	Квантово-химическое моделирование периодических систем	6	10		24	ПК-2 ПК-4	ПК-2.2 ПК-4.2
4	Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов	8	12		24	ПК-4	ПК-4.2
5	Моделирование процессов химических превращений материалов	8	12		24	ПК-4	ПК-4.2

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
1	Общие принципы моделирования материалов и процессов Феноменологические модели: химическая термодинамика и химическая кинетика. Термодинамические базы данных. Фундаментальные модели: молекулярная динамика и квантовая химия. Структурные базы данных.	4	Лекция-беседа
2	Теоретические основы квантовой химии Метод МО ЛКАО. Метод самосогласованного поля. Приближение Хартри-Фока (ХФ). Базисный набор атомных орбиталей (слэтеровский и гауссовский). Размер базиса. Валентное расщепление. Поляризационные и диффузные функции.	2	Лекция-беседа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	Учет взаимной корреляции движения электронов Методы учета электронной корреляции Методы теории функционала плотности. Обменная и корреляционная составляющие. Гибридные функционалы	2	
	Анализ характеристик электронного строения молекул. Заселенность МО, дискретные уровни энергии МО, пространственные характеристики МО и электронной плотности. Анализ зарядов на атомах, дипольных моментов, порядков связей и валентности атомов. Структурный анализ молекул на основании квантово-химических расчетов	2	Лекция-беседа
3	Квантово-химическое моделирование периодических систем Одномерные, двумерные и трехмерные кристаллы. Периодические условия. Волновые функции Блоха. Псевдопотенциал. Метод плоских волн. Расчет зонных диаграмм. Расчет фононных состояний и оптического поглощения кристаллов. Моделирование поверхности раздела твердых тел	4	
	Квазимолекулярные модели. Оценки размерных эффектов методами квантовой химии. Релаксация и реконструкция поверхности кристалла. Двумерные и одномерные кристаллы. Кластерные модели поверхности твердых тел	2	
4	Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов методами квантовой химии. Колебательные спектры. Гармоническое приближение, ангармонические поправки.	2	Лекция-беседа
	Спектры оптического поглощения Расчет характеристической энергии и вероятности поглощения.	3	
	Прогнозирование спектров ЯМР и ЯКР Теоретические основы спектроскопии ЯМР. Прецессия магнитного дипольного момента ядра. Ларморова частота. Регистрация и форма спектров. Химический сдвиг. Особенности моделирования спектров ЯМР твердофазных материалов.	3	
5	Моделирование процессов химических превращений материалов Термодинамическое моделирование химических превращений. Оценка химических потенциалов с помощью квантово-химического моделирования. Расчет и анализ термодинамических потенциалов при различной температуре.	4	Лекция-беседа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	Моделирование кинетики химических процессов с участием различных материалов Квантово-химические расчеты переходных состояний. Оценка констант скорости. Пути и механизмы реакции. Моделирование динамики сложных химических реакций	4	

4.3. Занятия семинарского типа

4.3.1. Семинары, практические занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Основные постулаты квантовой химии Уравнение Шредингера. Квантовые числа. Электронные орбитали. Атом водорода. Атом гелия, межэлектронное отталкивание, кулоновское и обменное взаимодействие Корпускулярно-волновой дуализм. Принцип Гейзенберга Жесткий ротатор, гармонический осциллятор. Квантовая частица в потенциальной яме, туннелирование.	4	Групповая научная дискуссия
2	Основные приближения квантовой химии Одноэлектронное и адиабатическое приближения. Анализ влияния базисного набора АО на результаты моделирования молекулярных систем. Особенности реализации метода ХФ для систем с открытыми оболочками (ограниченный, неограниченный и ограниченный по спине методы ХФ). Проблема сходимости ХФ. Полуэмпирические и неэмпирические квантовые расчеты. Связь размерности электронной подсистемы с необходимой вычислительной мощностью	2	
	Учет взаимной корреляции движения электронов Методы учета электронной корреляции	2	Разбор конкретных ситуаций

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	(поправки Меллера-Плессе (МП) различного порядка). Конфигурационное взаимодействие. Методы мультikonфигурационного самосогласованного поля и активное пространство.		
	Программное обеспечение и методология проведения квантово-химических расчетов Квантово-химические программные пакеты. Принципиальные возможности прогнозирования состава, строения и свойств химических объектов с помощью квантовой химии. Аппаратные ограничения и пределы	4	Групповая научная дискуссия
	Методология и алгоритмы анализа результатов квантово-химических расчетов Методы анализа выходного файла квантово-химического расчета. Ключевые слова и заголовки для поиска данных. Оценка корректности завершения расчета	2	
3	Квантово-химическое моделирование периодических систем Квазимолекулярные модели. Оценки размерных эффектов методами квантовой химии. Моделирование поверхности раздела твердых тел. Вакуумные слои. Двумерные кристаллы.	2	
	Релаксация и реконструкция поверхности кристалла. Моделирование эпитаксиальных пленок. Тонкопленочные структуры и гетероструктуры.	4	
	Моделирование точечных дефектов. Метод сверхячейки.	4	Групповая научная дискуссия
4	Прогнозирование колебательных спектров. Расчет спектров ИК и комбинационного рассеяния. Расчет тензоров поляризации и поляризуемости. Учет	4	Разбор конкретных ситуаций

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	ангармонических эффектов.		
	Спектры оптического поглощения. Расчет спектров поглощения в видимой и ближней УФ области. Многодетерминантное приближение CIS и TDDFT, расчет энергии, вероятности поглощения и времени жизни возбужденных состояний.	4	
	Моделирование спектров ЯМР и ЯКР Расчет констант экранирования, химических сдвигов и сверхтонкого расщепления. Влияние квадрупольного момента ядра. Расчет спектров ЯКР.	4	
5	Термодинамический прогноз превращений веществ и материалов в равновесных гетерофазных системах Термодинамические базы данных. Оценка величин термодинамических потенциалов и их зависимости от температуры на основе данных квантово-химического моделирования. Метод констант равновесия химических реакций в открытых системах. Построение невырожденной матрицы уравнений реакции. Численный прогноз равновесного состава и его устойчивость	4	Разбор конкретных ситуаций
	Прогноз равновесного состава в закрытых системах Метод минимума характеристических функций (МЭХФ). Атомный базис термодинамических потенциалов и снижение размерности системы. Алгоритм расчета и его устойчивость.	4	
	Моделирование динамики процессов химических превращений материалов Теория переходного комплекса. Прогнозирование кинетики	4	Групповая научная дискуссия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	химических реакций методами квантовой химии. Вычисление энергии активационного барьера. Туннелирование и путь реакции. Прогноз величины константы скорости. Расчет динамики параллельно-последовательных реакций на основе жесткой системы дифференциальных уравнений.		

4.3.2. Лабораторные работы

Учебным планом не предусмотрены

4.4. Самостоятельная работа обучающихся

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Типы программ для квантово-химического моделирования и их характеристики	24	зачет
2	Сравнительные характеристики базисных наборов атомных орбиталей	24	зачет
3	Алгоритмы многоконfigurационного приближения для описание электронного строения химических объектов	24	зачет
4	Основные способы квантово-химического описания твердых тел.	24	зачет
5	Принципы и алгоритмы квантово-химического моделирования возбужденных электронных состояний	24	зачет

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. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и Gauss View / Е.В. Бутырская. - М. : СОЛОН-Пресс, 2011. - 218 с.
3. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков. - М. : Юрайт, 2010. – 555 с.
4. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов по химико-технологическим направлениям и спец. / В. Г. Цирельсон. - 4-е изд. - М. : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. (ЭБ)
5. Чернышев, С.Л. Моделирование и классификация наноструктур / С.Л. Чернышев.- М. : Кн.

дом "ЛИБРОКОМ", 2011. - 210 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: <https://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 проводится в форме защиты курсового проекта и зачета в устной форме. Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и включает 2-3 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.

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

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.
3. Чернышев, С.Л. Моделирование и классификация наноструктур / С. Л. Чернышев. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2011. - 210 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.
5. Грибов, Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул : Учебное пособие / Л. А. Грибов. - Долгопрудный : Интеллект, 2010. - 310 с.
6. 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.
7. 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.

б) электронные учебные издания:

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. Начальный курс квантовой механики и квантовой химии: Учебное пособие для вузов / А. И. Ермаков. - М. : Юрайт, 2010. - 555 с. (ЭБ)

3. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : Учебное пособие / В. И. Барановский. - 3-е изд., стер. - СПб. ; М. ; Краснодар : Лань, 2019. - 428 с. (ЭБС)

4. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов по химико-технологическим направлениям и спец. / В. Г. Цирельсон. - 4-е изд. - М. : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. (ЭБС)

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

1. Учебный план, РПД и учебно-методические материалы - media.technolog.edu.ru
2. ЭБ "Библиотех" СПбГТИ(ТУ) (доступ к сайту библиотеки);
3. Информационно-справочные поисковые системы и БД в сети Интернет; ЭБС «Лань»;
4. www.metodolog.ru
5. www.gaussian.com

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Оптимизация состава и свойств конструкционных материалов» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

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

СТО СПбГТИ 039-2013. КС УКДВ. Магистратура. Общие требования;

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ(ТУ) 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению;

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению;

СТО СПбГТИ 044-2012. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Курсовой проект. Курсовая работа. Общие требования;

СТО СПбГТИ 016-2015. КС УКДВ. Порядок организации и проведения зачётов и экзаменов.

В ходе лекционных занятий магистранту необходимо готовить конспект лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; помечать 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.

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 2 семестра в виде курсового проекта и зачета в устной форме (включает 2-3 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;
взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение

Представление лекционного материала:

ОС – не ниже MS Windows XP SP3

MS PowerPoint 97 и выше

MathCAD 14, GAMESS, Gaussian, QuantumExpresso

10.3. Базы данных и информационные справочные системы

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU <http://elibrary.ru>;
2. ЭБ "Библиотех" СПбГТИ(ТУ) (доступ к сайту библиотеки);
3. Информационно-справочные поисковые системы и БД в сети Интернет; ЭБС «Лань».

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы

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 видеофильмов 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

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Оптимизация состава и свойств конструкционных материалов»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-2	Способен осуществлять рациональный выбор материалов и оптимизировать их расходование на основе анализа заданных условий эксплуатации материалов, оценки их надежности, экономичности и экологических последствий применения	промежуточный
ПК-4	Способен моделировать процессы обработок и прогнозировать результаты их осуществления при различных режимах, 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»
ПК-2.2 Моделирование материалов на молекулярном уровне, прогнозирование и оптимизация их свойств методами квантовой химии и квантовой механики	Описывает теоретические основы квантовой химии	Правильные ответы на вопросы № 1-11 к зачету	Не способен описать теоретические основы квантовой химии	Описывает теоретические основы квантовой химии
	Умеет осуществлять выбор программных средств для моделирования материалов, прогнозирования и оптимизации их свойств, а также анализировать и интерпретировать результаты квантово-химических расчетов	Правильные ответы на вопросы № 12-20 к зачету	Не умеет осуществлять выбор программных средств для моделирования материалов, прогнозирования и оптимизации их свойств, а также анализировать и интерпретировать результаты квантово-химических расчетов	Умеет осуществлять выбор программных средств для моделирования материалов, прогнозирования и оптимизации их свойств, а также анализировать и интерпретировать результаты квантово-химических расчетов
	Владеет навыками подготовки исходных данных для проведения квантово-химических расчетов, анализа и интерпретации полученных результатов	Правильные ответы на вопросы № 21-26 к зачету	Не владеет навыками подготовки исходных данных для проведения квантово-химических расчетов, анализа и интерпретации полученных результатов	Владеет навыками подготовки исходных данных для проведения квантово-химических расчетов, анализа и интерпретации полученных результатов

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)	
			«не зачтено»	«зачтено»
ПК-4.2 Использование теоретических и практических возможностей квантовой химии для выбора оптимальных технологических процессов синтеза низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц с использованием программных средств	Формулирует основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов	Правильные ответы на вопросы № 27-33 к зачету	Не способен сформулировать основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов	Формулирует основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов
	Умеет осуществлять анализ и интерпретацию результатов квантово-химического расчета низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц	Правильные ответы на вопросы № 34-40 к зачету	Не умеет осуществлять анализ и интерпретацию результатов квантово-химического расчета низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц	Умеет осуществлять анализ и интерпретацию результатов квантово-химического расчета низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц
	Владеет навыками проведения квантово-химических расчетов	Правильные ответы на вопросы № 41-46 к зачету	Не владеет навыками проведения квантово-химических расчетов	Владеет навыками проведения квантово-химических расчетов

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

а) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-2:

1. Феноменологические модели: химическая термодинамика и химическая кинетика.
2. Термодинамические базы данных. Фундаментальные модели: молекулярная динамика и квантовая химия. Структурные базы данных.
3. Основные принципы аппаратной реализации квантово-химических расчетов, их ограничения и пределы. Способы повышения производительности. Клиент-серверный подход. Кластерные вычисления.
4. Программное обеспечение для квантовой химии. Основные программные пакеты. Файл-ориентированный интерфейс. Принципы подготовки задания для расчета.
5. Перечень основных задач квантово-химических расчетов. Прогнозируемые свойства и характеристики.
6. Принципы анализа результатов квантово-химических расчетов. Программное обеспечение для анализа и визуализации квантово-химических данных.
7. Основы квантовой механики. Теория Планка. Корпускулярно-волновой дуализм. Принцип Гейзенберга.
8. Уравнение Шредингера. Квантовые числа. Жесткий ротатор, гармонический осциллятор.
9. Решение уравнения Шредингера для квантовой частицы в потенциальной яме, туннелирование.
10. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Электронные орбитали, набор квантовых чисел. Вырождение по энергии.
11. Решение уравнения Шредингера для атома гелия, межэлектронное отталкивание, кулоновское и обменное взаимодействие
12. Квантово-механическое описание многоэлектронных систем. Метод ЛКАО. Метод самосогласованного поля.
13. Приближение Хартри-Фока (ХФ). Проблема сходимости ХФ.
14. Полуэмпирические и неэмпирические квантовые расчеты. Связь размерности электронной подсистемы с необходимой вычислительной мощностью
15. Особенности реализации метода ХФ для систем с открытыми оболочками (ограниченный, неограниченный и ограниченный по спину методы ХФ). Роль межэлектронного отталкивания и вырождения по энергии.
16. Атомный базис (слэтеровский и гауссовский). Размер базиса. Валентное расщепление. Поляризационные и диффузные функции. Хартри-Фоковский предел.
17. Методы неитерационного учета электронной корреляции (поправки Меллера-Плессе (МП) различного порядка).
18. Конфигурационное взаимодействие. Методы мультikonфигурационного самосогласованного поля и активное пространство.
19. Методы теории функционала плотности. Обменная и корреляционная составляющие. Гибридные функционалы
20. Анализ зарядовых состояний и распределения электронной плотности. Оценка порядка химической связи. Топология электронной плотности и способы оценки степени ионности.
21. Одномерные, двумерные и трехмерные кристаллы. Периодические условия. Волновые функции Блоха. Образование зон в кристаллах. Зона Бриллюэна.
22. Метод псевдопотенциала для описания кристаллов. Форма псевдопотенциала для основных уровней.
23. Кластерное описание твердых тел. Псевдоатомы. Сходимость по размеру кластера.
24. Квазимолекулярные модели наноструктурированных материалов. Оценки размерных эффектов методами квантовой химии.
25. Моделирование поверхности раздела твердых тел. Вакуумные слои. Двумерные кристаллы
26. Моделирование точечных дефектов в кристаллах. Сверхячейка.

в) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-4:

27. Прогнозирование колебательных спектров. Силовое поле второго порядка. Двойное гармоническое приближение. Расчет вероятности поглощения и комбинационного рассеяния
28. Ангармонические эффекты колебательных спектров. Силовое поле четвертого порядка. Расчет матриц ангармонических коэффициентов. Прогноз обертонов и составных колебаний.
29. Прогнозирование спектров оптического поглощения молекулярных соединений, многодетерминантные приближения CIS и TDDFT, расчет характеристической энергии
30. Расчет вероятности поглощения и эмиссии в оптических спектрах, количественные характеристики поглощения и связь между ними.
31. Прогнозирование характеристик оптической активности и кругового дихроизма для молекулярных систем.
32. Расчет оптического поглощения в кристаллах. Прямые и непрямые межзонные переходы. Запрещенные и разрешенные переходы.
33. Эмуляция проявлений экситонов Ванье-Мотта и Френкеля в оптических спектрах кристаллов. Оценка механизмов поглощения света по графикам Урбаха.
34. Теоретические основы спектроскопии ЯМР. Ларморова частота прецессии дипольного момента ядра. Регистрация и форма спектров. Химический сдвиг.
35. Моделирование спектров ЯМР. Расчет констант экранирования, химических сдвигов.
36. Особенности моделирования спектров ЯМР твердофазных материалов. Вращение под магическим углом. Сверхтонкое расщепление.
37. Расчет спектров ЯКР. Влияние квадрупольного момента ядра на спектры ЯМР.
38. Термодинамический прогноз превращений веществ и материалов в равновесных гетерофазных системах. Оценка величин термодинамических потенциалов и их зависимости от температуры на основе данных квантово-химического моделирования.
39. Метод констант равновесия химических реакций в открытых системах. Построение невырожденной матрицы уравнений реакции. Численный прогноз равновесного состава.
40. Прогноз равновесного состава в закрытых химических системах Метод минимума характеристических функций (МЭХФ). Атомный базис термодинамических потенциалов и снижение размерности системы. Алгоритмы расчета и условия устойчивости.
41. Расчет изотерм сорбции низкомолекулярных на поверхности твердофазных подложек
42. Основные принципы квантово-химического анализа и прогноза механизмов химических реакций. Маршруты реакции.
43. Прогнозирование кинетики химических реакций методами квантовой химии. Теория переходного комплекса. Вычисление энергии активационного барьера.
44. Туннелирование и путь реакции. Прогноз величины константы скорости.
45. Особенности алгоритмов оптимизации для поиска переходных состояний. Оценка энергии переходного комплекса и констант скорости химических реакций.
46. Расчет динамики параллельно-последовательных реакций на основе жесткой системы дифференциальных уравнений.

К зачету допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше и задание на освоение методов решения инженерных задач.

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

4. Темы курсовых проектов:

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. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб ГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме защиты курсового проекта и зачёта.

Шкала оценивания на зачёте — «зачёт», «незачет». При этом «зачёт» соотносится с пороговым уровнем сформированности компетенции; для курсового проекта шкала оценки балльная.