

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 26.09.2023 17:14:11  
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  
«24» мая 2021 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ И  
ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

Направление подготовки

**22.04.01 Материаловедение и технология материалов**

Направленность программы магистратуры

**Функциональные наноматериалы и покрытия для твердотельной электроники**

Квалификация

**Магистр**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **Химии веществ и материалов**

Кафедра **Химической нанотехнологии и материалов электронной техники**

Санкт-Петербург

2021

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

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

Рабочая программа дисциплины «Квантово-химическое моделирование материалов и химических процессов на поверхности твердых тел» обсуждена на заседании кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной техники  
протокол от 15.04.2021 № 9

Заведующий кафедрой ХНиМЭТ

профессор А.А. Малыгин

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов  
протокол от 20.05.2021 № 8

Председатель

доцент С.Г. Изотова

### СОГЛАСОВАНО

Руководитель ООП «Материаловедение и технологии материалов»		доцент Н.В. Захарова
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 .....	08
4.5. Самостоятельная работа.....	09
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	09
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации .....	09
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины .....	10
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	11
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины .....	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине .....	12
10.1. Информационные технологии .....	12
10.2. Программное обеспечение.....	12
10.3. Базы данных и информационные справочные системы .....	12
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине .....	12
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья .....	13
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации .....	14

**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-2</b> 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><b>ПК-2.2</b> Моделирование материалов на молекулярном уровне, прогнозирование и оптимизация их свойств методами квантовой химии и квантовой механики</p>	<p><b>Знать:</b> - теоретические основы квантовой химии (ЗН-1). <b>Уметь:</b> - осуществлять системный анализ моделируемого процесса (У-1); - пользоваться методами и алгоритмами математического моделирования. (У-2). <b>Владеть:</b> - программным обеспечением для построения и анализа моделей (Н-1); - методами выбора и построения алгоритмов моделирования (Н-2); - математическим аппаратом обработки и анализа экспериментальных данных (Н-3).</p>
<p><b>ПК-4</b> 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><b>ПК-4.2</b> 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><b>Знать:</b> - основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов (ЗН-2). <b>Уметь:</b> - осуществлять анализ и интерпретацию результатов квантово-химического расчета низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц (У-3). <b>Владеть:</b> - навыками проведения квантово-химических расчетов (Н-4).</p>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Квантово-химическое моделирование материалов и химических процессов на поверхности твердых тел» относится к части Блока 1 дисциплин (модулей) по выбору 2 образовательной программы магистратуры, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.03) и изучается на 1 году обучения во 2 семестре.

Изучение дисциплины базируется на знаниях и умениях, полученных при изучении курса «Физико-химические методы исследования твердых веществ в наноразмерном состоянии». Полученные в процессе освоения дисциплины «Квантово-химическое моделирование материалов и химических процессов на поверхности твердых тел» 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, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц / академических часов)	<b>6 / 216</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>112</b>
занятия лекционного типа	32
занятия семинарского типа, в т.ч.	64
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	—
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	64 (10)
курсовое проектирование (КР или КП)	—
КСР	16
другие виды контактной работы	—
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>104</b>
<b>Формы текущего контроля</b>	—
<b>Форма промежуточной аттестации</b>	<b>Зачет, КП</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	2				ПК-2
2	Программное обеспечение и методология проведения квантово-химических расчетов	8		16	26	ПК-2
3	Учет взаимной корреляции движения электронов	8		16	26	ПК-4
4	Прогнозирование спектральных характеристик молекулярных и твердофазных объектов	10		16	26	ПК-4
5	Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии	4		16	26	ПК-4
<b>ИТОГО</b>		<b>32</b>		<b>64</b>	<b>104</b>	

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

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ПК-2.2	Общие принципы квантово-химических расчетов Программное обеспечение и методология проведения квантово-химических расчетов
2	ПК-4.2	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	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	8	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	8	Лекция-беседа
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	4	Лекция-беседа

#### 4.4. Занятия семинарского типа

##### 4.4.1. Семинары, практические занятия

Учебным планом не предусмотрены.

##### 4.4.2. Лабораторные занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Примечания
		всего	в т.ч. на практическую подготовку	
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.	16	2	
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.	16	2	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	16	4	
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	16	2	Разбор конкретных ситуаций

#### 4.5. 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.	26	—
3	<b>Методология и алгоритмы анализа результатов квантово-химических расчетов</b> Визуализация квантово-химических моделей.	26	—
4	<b>Прогнозирование спектральных характеристик нанообъектов</b> Квантово-химический прогноз спектров ядерного магнитного и квадрупольного резонанса. Оценка константы экранирования ядра.	26	—
5	<b>Прогнозирование химических превращений методами квантовой химии</b> Молекулярная динамика. Силовое поле. Анализ динамики сложных систем. Оценка термодинамических характеристик. Прогнозирование фазовых переходов.	26	—

#### 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 («удовлетворительно») 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 2 семестра в виде защиты курсового проекта и зачета в устной форме. К сдаче зачета допускаются студенты,

выполнившие все формы текущего контроля. Зачет предусматривает 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 экзамене:

1. Атомный базис (слэтеровский и гауссовский). Размер базиса. Валентное расщепление. Поляризация и диффузные функции. Хартри-Фоковский предел.

2. Прогнозирование колебательных спектров. Гармоническое приближение, ангармонические поправки. Расчет вероятности поглощения и комбинационного рассеяния

## **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: 15.03.2021). - 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: 15.03.2021). - 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: 15.03.2021). - 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);
3. Информационно-справочные поисковые системы и БД в сети Интернет;
4. Электронная библиотека - <http://elibrary.ru>.
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) 039-2013. Магистратура. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2013.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2013.- 25 с.
2. СТП СПбГТИ(ТУ) 040-02. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.07.2002.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2002.- 7 с.
3. СТП 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(ТУ) 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.
6. СТО СПбГТИ(ТУ) 044-2012. Виды учебных занятий. Курсовой проект. Курсовая работа. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.06.2012. - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2012.- 44 с

В ходе лекционных занятий студенту 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 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 выполнения лабораторных работ необходимы: проработка рабочей программы с уделением особого внимания 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 защиты курсового проекта и зачета в устной форме. К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Зачет предусматривает 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.

## **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, виртуальных лабораторий и баз данных;

- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

### **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

MS EXCEL 97 и выше

Программный пакет MathCAD

Программные пакеты MathCAD, MS EXCEL, GAMESS, GAUSSIAN

### **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»
3. 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 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.

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 22.04.01 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  
«Квантово-химическое моделирование материалов и химических процессов на  
поверхности твердых тел»**

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

<b>Индекс компетенции</b>	<b>Содержание</b>	<b>Этап формирования</b>
<b>ПК-2</b>	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
<b>ПК-4</b>	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»
<b>ПК-2.2</b> Моделирование материалов на молекулярном уровне, прогнозирование и оптимизация их свойств методами квантовой химии и квантовой механики	Знает теоретические основы квантовой химии (ЗН-1).	Правильные ответы на вопросы №№ 1-3 к зачету, защита КП	Не знает теоретические основы квантовой химии	Знает теоретические основы квантовой химии
	Умеет осуществлять системный анализ моделируемого процесса (У-1)	Правильные ответы на вопросы №№ 4-6 к зачету	Не умеет осуществлять системный анализ моделируемого процесса	Умеет осуществлять системный анализ моделируемого процесса
	Умеет пользоваться методами и алгоритмами математического моделирования (У-2).	Правильные ответы на вопросы №№ 7-8 к зачету	Не умеет пользоваться методами и алгоритмами математического моделирования	Умеет пользоваться методами и алгоритмами математического моделирования
	Владеет программным обеспечением для построения и анализа моделей (Н-1).	Правильные ответы на вопросы №№ 9-11 к зачету, защита КП	Не владеет программным обеспечением для построения и анализа моделей	Владеет программным обеспечением для построения и анализа моделей
	Владеет методами выбора и построения алгоритмов моделирования (Н-2)	Правильные ответы на вопросы №№ 12-13 к зачету	Не владеет методами выбора и построения алгоритмов моделирования	Владеет методами выбора и построения алгоритмов моделирования
	Владеет математическим аппаратом обработки и анализа экспериментальных данных (Н-3).	Правильные ответы на вопросы №№ 14-15 к зачету	Не владеет математическим аппаратом обработки и анализа экспериментальных данных	Владеет математическим аппаратом обработки и анализа экспериментальных данных

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)	
			«не зачтено»	«зачтено»
<b>ПК-4.2</b> Использование теоретических и практических возможностей квантовой химии для выбора оптимальных технологических процессов синтеза низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц с использованием программных средств	Знает основные особенности аппаратного и программного обеспечения для реализации квантово-химических расчетов (ЗН-2).	Правильные ответы на вопросы №№ 16-22 к зачету, защита КП	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
	Умеет осуществлять анализ и интерпретацию результатов квантово-химического расчета низкоразмерных систем на поверхности твердофазных матриц (У-3)	Правильные ответы на вопросы №№ 23-28 к зачету, защита КП	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 (Н-4)	Правильные ответы на вопросы №№ 29-32 к зачету	Владеет навыками проведения квантово-химических расчетов	Владеет навыками проведения квантово-химических расчетов

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ (ТУ): промежуточная аттестация проводится в форме **зачета и защиты курсового проекта**. Критерии оценивания – «зачтено», «не зачтено» приведены в таблице 2, при защите курсового проекта — шкала балльная.

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-2**

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 спину методы ХФ). Роль межэлектронного отталкивания и вырождения по энергии.

10. Атомный базис (слэтеровский и гауссовский). Размер базиса. Валентное расщепление. Поляризационные 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 знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-4**

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.
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 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(ТУ) 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.