



КГЭУ

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «КГЭУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Директор

Института теплоэнергетики

С.О. Гапоненко

«23» января 2024 г.

### РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДЭ.01.01.03 Компьютерный инжиниринг и физикохимия материалов

Направление подготовки

22.03.01 Материаловедение и технологии  
материалов

Профиль

Компьютерный инжиниринг в материаловедении

Квалификация

Бакалавр

г. Казань, 2024

Программу разработал(и):

Наименование кафедры	Должность, уч.степень, уч.звание	ФИО разработчика
МВТМ	к.т.н.	Бунтин А.Е.

Согласование	Наименование подразделения	Дата	№ протокола	Подпись
Одобрена	МВТМ	16.01.2024	6	_____ Зав.каф., д.х.н., доц. Давлетбаев Р. С.
Согласована	Учебно-методический совет ИТЭ	23.01.2024	4	_____ Директор, к.т.н., доц. Гапоненко С.О.
Одобрена	Ученый совет ИТЭ	23.01.2024	5	_____ Директор, к.т.н., доц. Гапоненко С.О.

## 1. Цель, задачи и планируемые результаты обучения по дисциплине

Целью освоения дисциплины «Компьютерный инжиниринг и физикохимия материалов» является формирование теоретических основ цифрового проектирования и моделирования структуры и свойств металлических и неметаллических веществ и материалов с опорой на их многоуровневую структурную организацию.

Задачами дисциплины являются:

- формирование знаний и представлений о базовом уровне структуры различных материалов — электронно-ядерном (химическом) — и роли различных уровней структуры в определении свойств материалов;
- формирование знаний и представлений о многоуровневой структурной организации вещества и возможности универсальной классификации строения для различных материалов;
- установление физико-химических закономерностей изменения строения и свойств материалов под действием физических, химических, биологических и других факторов;
- формирование знаний о современных методах и инструментах компьютерного моделирования и анализа материалов.

Компетенции и индикаторы, формируемые у обучающихся:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора
ПК-3. Способен использовать компьютерный инжиниринг для оптимизации технических свойств материалов	ПК-3.1. Осуществляет рациональный выбор, контроль качества сырья, материалов и их технологий исходя из заданных условий эксплуатации при подготовке и реализации проектных решений

## 2. Место дисциплины в структуре ОП

Предшествующие дисциплины (модули), практики, НИР, др. Химическое строение материалов и их свойства, Методы исследования и испытания материалов, Материаловедение, Химия и технологии высокомолекулярных соединений

Последующие дисциплины (модули), практики, НИР, др. Технологии переработки, обработки материалов и нанесения защитных покрытий, Производственная практика (преддипломная)

## 3. Структура и содержание дисциплины

### 3.1. Структура дисциплины

Для очной формы обучения

Вид учебной работы	Всего ЗЕ	Всего часов	Семестр	
			7	8
ОБЩАЯ ТРУДОЕМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ	13	468	252	216

КОНТАКТНАЯ РАБОТА*	5,8	209	98	111
АУДИТОРНАЯ РАБОТА	3,8	136	76	60
Лекции	1,5	54	30	24
Практические (семинарские) занятия	1,1	40	16	24
Лабораторные работы	1,1	42	30	12
САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА ОБУЧАЮЩЕГОСЯ	7,2	260	130	130
Проработка учебного материала	3,2	116	94	94
Курсовой проект		72	-	72
Курсовая работа			-	-
Подготовка к промежуточной аттестации		72	36	36
Промежуточная аттестация:			Э	Э
			-	-

### 3.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам и видам занятий

Разделы дисциплины	Всего часов	Распределение трудоемкости по видам учебной работы				Формы и вид контроля	Индексы индикаторов формируемых компетенций
		лекции	лаб. раб.	пр. зан.	сам. раб.		
Раздел 1	52	10	8	4	30	ТК1	ПК-3.1; ПК-3.3
Раздел 2	56	10	10	6	30	ТК2	ПК-3.1; ПК-3.3,У
Раздел 3	62	10	12	6	34	ТК3	ПК-3.1; ПК-3.3,У,Н
Экзамен	36				36	ОМ 1	ПК-3.1; ПК-3.3,У,Н
<b>ИТОГО за 7 семестр</b>	<b>206</b>	<b>30</b>	<b>30</b>	<b>16</b>	<b>130</b>		
Раздел 4	24	6	4	8	30	ТК4	ПК-3.1; ПК-3.3,У
Раздел 5	28	8	4	8	30	ТК5	ПК-3.1; ПК-3.3,У,Н
Раздел 6	30	10	4	8	34	ТК6	ПК-3.1; ПК-3.3,У,Н
Экзамен	36				36	ОМ 2	ПК-3.1; ПК-3.3,У,Н
Курсовой проект	72				72	КП	ПК-3.1; ПК-3.3,У,Н
<b>ИТОГО за 8 семестр</b>	<b>262</b>	<b>24</b>	<b>12</b>	<b>24</b>	<b>202</b>		
<b>ИТОГО</b>	<b>468</b>	<b>54</b>	<b>42</b>	<b>40</b>	<b>260</b>		

### 3.3. Содержание дисциплины

#### Раздел 1. Уровни структурной организации материалов

Тема 1.1. Характеристика уровней структурной организации материалов

Место материаловедения в рамках парадигмы многоуровневой организации материи и классификации естественных наук в целом.

Основные практически значимые виды веществ и материалов и принципы их классификации.

Общая характеристика традиционных подходов и проблем в классификации и моделировании уровней структурной организации материалов, их достоинства и недостатки.

Единая иерархия уровней структурной организации различных материалов. Единство природы и различие в структуре металлических и полимерных материалов в рамках единой модели их структурной организации.

Общая характеристика отличий микро-, мезо- и макроструктурных уровней и подуровней строения металлических и полимерных материалов по составу и типу взаимодействий (связей) элементов их составляющих.

## **Раздел 2. Теория связи элементов микроструктуры химических веществ и материалов на их основе.**

Тема 2.1. Особенности связи элементов электронно-ядерной (химической) микроструктуры веществ и материалов.

Тема 2.2. Теория химической связи.

Факторы, определяющие реальный смешанный тип химической связи. Единая универсальная модель химической связи.

Влияние структуры веществ и материалов на их свойства

## **Раздел 3. Методы компьютерного моделирования химических соединений и наносистем. Квантовое описание структуры атомного мира**

Тема 3.1. Общие принципы компьютерного моделирования

Тема 3.2. Свойства одноэлектронных атомов. Электронная теория строения атомов

Тема 3.3. Квантово-химические подходы и методы

Метод Хартри-Фока. Атомные орбитали. Теория функционала плотности

## **Раздел 4. Моделирование молекулярных систем**

Тема 4.1. Физико-химические закономерности строения молекул. Метод валентных схем, молекулярных орбиталей.

Тема 4.2. Межмолекулярные взаимодействия.

Межмолекулярные силы. Молекулярная механика и динамика. Метод Монте-Карло

## **Раздел 5. Механизмы образования наноструктур**

Тема 5.1. Супрамолекулярные системы. Модели нанокластеров. Молекулярная самосборка

## **Раздел 6. Компьютерное моделирование материалов и процессов**

Тема 6.1. Концепция многомасштабного моделирования

Тема 6.2. Моделирование наноструктур и макроскопических систем

Тема 6.3. Моделирование и анализ объектов с контролируемой микроструктурой композитных конструкционных материалов

## **3.4. Тематический план практических занятий**

1-2. Основные компоненты химической связи, размерные и энергетические характеристики, межмолекулярная связь, оценка свойств полимеров по их химическому строению и методы их оценки

3-4. Квантово-химические методы и подходы

5-6. Моделирование строения и физико-химических свойств соединений

7-8. Программное обеспечение для моделирования наносистем

9. Компьютерная реализация моделирования наносистем и

нанотехнологий

10. Моделирование строения многоэлектронных атомов
11. Метод молекулярной динамики
12. Моделирование механизма образования наноструктур
13. Расчет поверхности потенциальной энергии
14. Фуллерен C<sub>60</sub> и его изомеры
15. Квантово-химическое моделирование свойств наночастиц золота в кластерном подходе
- 16-17. Химические базы данных
- 18-19. Методы молекулярного компьютерного дизайна в создании современных материалов
20. Компьютерный анализ строения молекул. Компьютерное представление и визуализация кристаллов

### **3.5. Тематический план лабораторных работ**

1. Структурные и энергетические свойства модели металлов
2. Электронные спектры поглощения молекулярных кластеров
- 3-4. Квантово-химическое моделирование строения и свойств соединений
5. Визуализационное моделирование наноструктур
6. Подготовка сеточной модели оболочки сложной формы
- 7-8. Создание многослойной оболочки из композитных материалов
9. Статистически и динамически прочностной анализ изделий композиционных материалов
10. Тепловой анализ изделий из композиционных материалов

### **3.6. Курсовой проект /курсовая работа**

1. Моделирование и анализ объектов с контролируемой микроструктурой композитных конструкционных материалов
2. Химическое и электронное строение кристалла SiO<sub>2</sub> α-кристобалит
3. Химические вещества и роль их превращений в производстве основных типов материалов (металлов, полимеров, керамики и т.д.).
5. Математическое моделирование процессов в материаловедении с использованием MS EXCEL
6. Сравнительный анализ квантово-химического программного обеспечения для молекулярно-кластерных и периодических расчетов.
7. Моделирование результатов дифракционных исследований как средство производства химической информации.
8. Химические базы данных. Библиографические базы химических данных. Универсальные базы физико-химических и структурных данных. Специализированные базы данных по свойствам химических соединений. Особенности формирования запросов к химическим базам данных.
9. Структурное моделирование и анализ кристаллических твердых тел. Модели поверхности кристалла и кристаллографических сечений объемной структуры.
10. Моделирование структуры и свойств наносистем

11. Расчет равновесного параметра решетки кристаллических структур и их электронных свойств

12. Оценка влияния параметров химической связи на структуру и свойства карбидов и нитридов

#### 4. Оценивание результатов обучения

Оценивание результатов обучения по дисциплине осуществляется в рамках текущего контроля и промежуточной аттестации, проводимых по балльно-рейтинговой системе (БРС).

Шкала оценки результатов обучения по дисциплине:

Код компетенции	Код индикатора компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине	Уровень сформированности индикатора компетенции			
			Высокий	Средний	Ниже среднего	Низкий
			от 85 до 100	от 70 до 84	от 55 до 69	от 0 до 54
			Шкала оценивания			
			отлично	хорошо	удовлетворительно	неудовлетворительно
			зачтено		не зачтено	
ПК-3	ОПК-3.1	знать:				
		основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических, химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов	В полном объеме знает основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических, химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов	С ошибками знает основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических, химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов	Частично знает основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических, химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов	Не знает основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических, химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов
		уметь:				
		определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и материала на его основе, и его основными химическими, физическими,	Свободно и без ошибок умеет определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и материала на его основе, и его основными	С ошибками умеет определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и материала на	С рядом грубых ошибок умеет определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и	Не умеет определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и материала на его основе, и

	технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства	химическими, физическими, технологическими и свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства	его основе, и его основными химическими, физическими, технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства	материала на его основе, и его основными химическими, физическими, технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства	его основными химическими, физическими, технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства
владеть:					
	методами и инструментами компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе	Продемонстрированы все основные навыки владения методами и инструментами компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе	Имеют место ошибки и недочеты в навыках владения методами и инструментами и компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе	Имеет минимальный набор навыков владения методами и инструментами и компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе	Не владеет методами и инструментами и компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе

Оценочные материалы для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации приведены в Приложении к рабочей программе дисциплины.

Полный комплект заданий и материалов, необходимых для оценивания результатов обучения по дисциплине, хранится на кафедре разработчика.

## 5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 5.1. Учебно-методическое обеспечение

#### 5.1.1. Основная литература

1. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург: Лань, 2022. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL:



<https://e.lanbook.com/book/210257>

2. Романова, К. А. Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств химических соединений : учебное пособие / К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов. — Казань : КНИТУ, 2021. — 84 с. — ISBN 978-5-7882-3054-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/330935>

3. Сироткин, О.С. Химия : учебник / О. С. Сироткин, Р. О. Сироткин. - Москва : Кнорус, 2023. - 363 с. - URL: <https://book.ru/books/949868>. - ISBN 978-5-406-11854-2. - Текст : электронный.

### 5.1.2. Дополнительная литература

1. Сироткин, О.С. Основы материаловедения : учебное пособие / О. С. Сироткин. - Москва : Кнорус, 2023. - 259 с. - URL: <https://book.ru/books/949198>. - ISBN 978-5-406-11407-0 : ~Б. ц. - Текст : электронный.

2. Калашников, А. М. Калашников, А. М. Моделирование и анализ объектов с контролируемой мик-роструктурой композитных конструкционных материалов : практикум : учебное пособие : в 2 частях / А. М. Калашников. — Омск : ОмГТУ, 2022 – Часть 2 : Инженерный анализ – 2022. – 163 с. – ISBN 978-5-8149-3371-3. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/343622>

3. Звонарев, С. В. Моделирование структуры и свойств наносистем : учебно-методическое пособие / С. В. Звонарев, В. С. Кортков, Т. В. Штанг ; научный редактор Б. В. Шульгин. – Екатеринбург : УрФУ, 2014. – 120 с. – ISBN 978-5-7996-1203-0. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/98317>

## 5.2. Информационное обеспечение

### 5.2.1. Электронные и интернет-ресурсы

1	Электронно-библиотечная система «Лань»	<a href="https://e.lanbook.com/">https://e.lanbook.com/</a>
2	Электронно-библиотечная система «ibooks.ru»	<a href="https://ibooks.ru/">https://ibooks.ru/</a>
3	Электронно-библиотечная система «lib.kgeu.ru»	<a href="http://lib.kgeu.ru">http://lib.kgeu.ru</a>
4	Интернет-ресурс публикаций	<a href="https://www.researchgate.net">https://www.researchgate.net</a>

### 5.2.2. Профессиональные базы данных / Информационно-справочные системы

1	Nano	<a href="http://nano.nature.com">nano.nature.com</a>
2	Nist	<a href="https://www.nist.gov/">https://www.nist.gov/</a>
3	Платформа SpringerLink	<a href="http://www.link.springer.com">www.link.springer.com</a>
4	SpringerMaterials	<a href="http://www.materials.springer.com">www.materials.springer.com</a>
5	КиберЛенинка	<a href="https://cyberleninka.ru/">https://cyberleninka.ru/</a>
6	Materials Studio	<a href="http://Accelrys.com">Accelrys.com</a>

7	Chemical Abstracts, Belstein	<a href="https://chempedia.info/info/beilstein_abstracts">https://chempedia.info/info/beilstein_abstracts</a>
8	Gmelin Reaxys	<a href="https://www.reaxys.com">https://www.reaxys.com</a>

### 5.2.3. Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение дисциплины

№ п/п	Наименование программного обеспечения	Описание	Реквизиты подтверждающих документов
1	Браузер Chrome	Система поиска информации в сети интернет (включая русскоязычный интернет).	<a href="https://www.google.com/intl/ru/chrome/">https://www.google.com/intl/ru/chrome/</a>
2	Adobe Acrobat	Пакет программ	<a href="https://get.adobe.com/ru/reader/">https://get.adobe.com/ru/reader/</a>
3	LMS Moodle	ПО для эффективного онлайн-взаимодействия преподавателя и студента	Свободная лицензия Неискл. право. Бессрочно
4	ADF	Программа расчета молекулярных систем на основе теории функционала плотности	<a href="http://www.scm.com">www.scm.com</a>
5	ELCUT	Компьютерная программа для проведения инженерного анализа и двумерного моделирования методом конечных элементов.	(профессиональная версия): договор №122/2020 от 11.08.2020, лицензиар - ООО "Лабстэнд", тип (вид) лицензи - неискл. право, срок действия лицензии - бессрочно.

## 6. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Наименование вида учебной работы	Наименование учебной аудитории, специализированной лаборатории	Перечень необходимого оборудования и технических средств обучения
Лекции	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа	Специализированная учебная мебель, технические средства обучения, служащие для представления учебной информации большой аудитории (мультимедийный проектор, компьютер (ноутбук), экран), демонстрационное оборудование, учебно-наглядные пособия

Лабораторные работы	Учебная лаборатория «Металловедения», А-217	Специализированное лабораторное оборудование по профилю лаборатории: Доска аудиторная; мультимедийный экран; проектор; моноблок (15 шт.); бинокулярный микроскоп; микроскринер; камера цифровая к бинокулярному микроскопу; набор металлографических образцов, комплект плакатов: правила концентраций и отрезков, испытания на ударный изгиб, испытания на растяжение (3 шт.), диаграмма условных напряжений, измерение твердости по Роквеллу, измерение твердости по Бринеллю
	Учебная лаборатория «Материаловедения», А-210	Специализированное лабораторное оборудование по профилю лаборатории: Лабораторный стол; электронагреватель СНОЛ-1; печь лабораторная ЭКПС; проектор, экран; комплекс «Мобильный менеджер»; металлографический микроскоп МИМ-7; микроскоп бинакулярный (5 шт.); отрезной станок; микроскоп металлографический; шлифовально-полировальный станок двухдисковый с прижимными кольцами; комплекты для выполнения лабораторных работ (2 шт.); стационарный твердомер по Роквеллу (2 шт.); комплект образцов (6 шт.)

	Учебная лаборатория «Электротехнические материалы», А-202	Доска аудиторная; экран; проектор; автоматизированный лабораторный стенд для исследования свойств магнитных материалов; автоматизированный лабораторный стенд для исследования свойств полупроводниковых материалов; автоматизированный лабораторный стенд для исследования свойств проводниковых материалов; автоматизированный лабораторный стенд для исследования сегнетоэлектриков; мост переменного тока, осциллограф С1-1, генератор ГЗ-18 ("исследование диэлектрической проницаемости"); барометр БАММ; вискозиметр ВЗ-4; типовой комплект учебного оборудования "Электротехнические материалы" компьютерная версия; компьютеры в комплекте с монитором для типового комплекса учебного оборудования "Электротехнические материалы" (4 шт.); комплект плакатов: твёрдые диэлектрики, проводниковые материалы, магнитомягкие материалы, магнитотвёрдые материалы, жидкие диэлектрики, газообразные диэлектрики, классификация диэлектрических материалов, периодическая система гомоядерных химических связей элементов микроструктуры вещества
Самостоятельная работа	Компьютерный класс с выходом в Интернет В-600а	Специализированная учебная мебель на 30 посадочных мест, 30 компьютеров, технические средства обучения (мультимедийный проектор, компьютер (ноутбук), экран), видеокамеры, программное обеспечение
	Читальный зал библиотеки	Специализированная мебель, компьютерная техника с возможностью выхода в Интернет и обеспечением доступа в ЭИОС, экран, мультимедийный проектор, программное обеспечение

## 7. Особенности организации образовательной деятельности для лиц с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Лица с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) и инвалиды имеют возможность беспрепятственно перемещаться из одного учебно-лабораторного корпуса в другой, подняться на все этажи учебно-лабораторных корпусов, заниматься в учебных и иных помещениях с учетом особенностей психофизического развития и состояния здоровья.

Для обучения лиц с ОВЗ и инвалидов, имеющих нарушения опорно-

двигательного аппарата, обеспечены условия беспрепятственного доступа во все учебные помещения. Информация о специальных условиях, созданных для обучающихся с ОВЗ и инвалидов, размещена на сайте университета [www//kgeu.ru](http://www//kgeu.ru). Имеется возможность оказания технической помощи ассистентом, а также услуг сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков.

Для адаптации к восприятию лицами с ОВЗ и инвалидами с нарушенным слухом справочного, учебного материала по дисциплине обеспечиваются следующие условия:

- для лучшей ориентации в аудитории, применяются сигналы оповещения о начале и конце занятия (слово «звонок» пишется на доске);
- внимание слабослышащего обучающегося привлекается педагогом жестом (на плечо кладется рука, осуществляется нерезкое похлопывание);
- разговаривая с обучающимся, педагогический работник смотрит на него, говорит ясно, короткими предложениями, обеспечивая возможность чтения по губам.

Компенсация затруднений речевого и интеллектуального развития слабослышащих обучающихся проводится путем:

- использования схем, диаграмм, рисунков, компьютерных презентаций с гиперссылками, комментирующими отдельные компоненты изображения;
- регулярного применения упражнений на графическое выделение существенных признаков предметов и явлений;
- обеспечения возможности для обучающегося получить адресную консультацию по электронной почте по мере необходимости.

Для адаптации к восприятию лицами с ОВЗ и инвалидами с нарушениями зрения справочного, учебного, просветительского материала, предусмотренного образовательной программой по выбранному направлению подготовки, обеспечиваются следующие условия:

- ведется адаптация официального сайта в сети Интернет с учетом особых потребностей инвалидов по зрению, обеспечивается наличие крупношрифтовой справочной информации о расписании учебных занятий;
- педагогический работник, его собеседник (при необходимости), присутствующие на занятии, представляются обучающимся, при этом каждый раз называется тот, к кому педагогический работник обращается;
- действия, жесты, перемещения педагогического работника коротко и ясно комментируются;
- печатная информация предоставляется крупным шрифтом (от 18 пунктов), тотально озвучивается;
- обеспечивается необходимый уровень освещенности помещений;
- предоставляется возможность использовать компьютеры во время занятий и право записи объяснений на диктофон (по желанию обучающихся).

Форма проведения текущей и промежуточной аттестации для обучающихся с ОВЗ и инвалидов определяется педагогическим работником в соответствии с учебным планом. При необходимости обучающемуся с ОВЗ, инвалиду с учетом их индивидуальных психофизических особенностей дается возможность пройти промежуточную аттестацию устно, письменно на бумаге,

письменно на компьютере, в форме тестирования и т.п., либо предоставляется дополнительное время для подготовки ответа.

## **8. Методические рекомендации для преподавателей по организации воспитательной работы с обучающимися.**

Методическое обеспечение процесса воспитания обучающихся выступает одним из определяющих факторов высокого качества образования. Преподаватель вуза, демонстрируя высокий профессионализм, эрудицию, четкую гражданскую позицию, самодисциплину, творческий подход в решении профессиональных задач, в ходе образовательного процесса способствует формированию гармоничной личности.

При реализации дисциплины преподаватель может использовать следующие методы воспитательной работы:

- методы формирования сознания личности (беседа, диспут, внушение, инструктаж, контроль, объяснение, пример, самоконтроль, рассказ, совет, убеждение и др.);

- методы организации деятельности и формирования опыта поведения (задание, общественное мнение, педагогическое требование, поручение, приучение, создание воспитывающих ситуаций, тренинг, упражнение, и др.);

- методы мотивации деятельности и поведения (одобрение, поощрение социальной активности, порицание, создание ситуаций успеха, создание ситуаций для эмоционально-нравственных переживаний, соревнование и др.)

При реализации дисциплины преподаватель должен учитывать следующие направления воспитательной деятельности:

*Гражданское и патриотическое воспитание:*

- формирование у обучающихся целостного мировоззрения, российской идентичности, уважения к своей семье, обществу, государству, принятым в семье и обществе духовно-нравственным и социокультурным ценностям, к национальному, культурному и историческому наследию, формирование стремления к его сохранению и развитию;

- формирование у обучающихся активной гражданской позиции, основанной на традиционных культурных, духовных и нравственных ценностях российского общества, для повышения способности ответственно реализовывать свои конституционные права и обязанности;

- развитие правовой и политической культуры обучающихся, расширение конструктивного участия в принятии решений, затрагивающих их права и интересы, в том числе в различных формах самоорганизации, самоуправления, общественно-значимой деятельности;

- формирование мотивов, нравственных и смысловых установок личности, позволяющих противостоять экстремизму, ксенофобии, дискриминации по социальным, религиозным, расовым, национальным признакам, межэтнической и межконфессиональной нетерпимости, другим негативным социальным явлениям.

*Духовно-нравственное воспитание:*

- воспитание чувства достоинства, чести и честности, совестливости,

уважения к родителям, учителям, людям старшего поколения;

- формирование принципов коллективизма и солидарности, духа милосердия и сострадания, привычки заботиться о людях, находящихся в трудной жизненной ситуации;

- формирование солидарности и чувства социальной ответственности по отношению к людям с ограниченными возможностями здоровья, преодоление психологических барьеров по отношению к людям с ограниченными возможностями;

- формирование эмоционально насыщенного и духовно возвышенного отношения к миру, способности и умения передавать другим свой эстетический опыт.

*Культурно-просветительское воспитание:*

- формирование эстетической картины мира;

- формирование уважения к культурным ценностям родного города, края, страны;

- повышение познавательной активности обучающихся.

*Научно-образовательное воспитание:*

- формирование у обучающихся научного мировоззрения;

- формирование умения получать знания;

- формирование навыков анализа и синтеза информации, в том числе в профессиональной области.

**Вносимые изменения и утверждения на новый учебный год**

№ П/П	№ раздела внесения изменений	Дата внесения изменений	Содержание изменений	«Согласовано» Зав. каф. реализующей дисциплину	«Согласовано» председатель УМК института (факультета), в состав которого входит выпускающая
1	2	3	4	5	6
1					
2					
3					



*Приложение к рабочей  
программе дисциплины*



**КГЭУ**

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «КГЭУ»)**

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
по дисциплине**

Б1.В.ДЭ.01.01.03 Компьютерный инжиниринг и физикохимия материалов

г. Казань, 2024

Оценочные материалы по дисциплине, предназначены для оценивания результатов обучения на соответствие индикаторам достижения компетенций.

Оценивание результатов обучения по дисциплине осуществляется в рамках текущего контроля (ТК) и промежуточной аттестации, проводимых по балльно-рейтинговой системе (БРС).

### 1. Технологическая карта

#### Семестр 7

Наименование раздела	Формы и вид контроля	Рейтинговые показатели							
		I текущий контроль	Дополнительные баллы к ТК1	II текущий контроль	Дополнительные баллы к ТК2	III текущий контроль	Дополнительные баллы к ТК3	Итого	Промежуточная аттестация
<b>Раздел 1. Уровни структурной организации материалов</b>	<b>ТК1</b>	<b>15</b>	<b>0-15</b>					<b>15-30</b>	<b>15-30</b>
Тест или письменный опрос			15						
Защита лабораторной работы		15							
<b>Раздел 2. Теория связи элементов микроструктуры химических веществ и материалов на их основе.</b>	<b>ТК2</b>			<b>25</b>	<b>0-15</b>			<b>25-40</b>	<b>25-40</b>
Тест или письменный опрос					15				
Защита лабораторной работы				25					
<b>Раздел 3. Методы компьютерного моделирования химических соединений и наносистем. Квантовое описание структуры атомного мира</b>	<b>ТК3</b>					<b>15</b>	<b>0-15</b>	<b>15-30</b>	<b>15-30</b>
Тест или письменный опрос							15		
Защита лабораторной работы						15			
<b>Промежуточная аттестация (экзамен)</b>	<b>ОМ 1</b>								<b>0-45</b>
В письменной форме по билетам									0-45

#### Семестр 8

Наименование раздела	Формы и вид контроля	Рейтинговые показатели
----------------------	----------------------	------------------------

		I текущий контроль	Дополнительные баллы к ТК1	II текущий контроль	Дополнительные баллы к ТК2	III текущий контроль	Дополнительные баллы к ТК3	Итого	Промежуточная аттестация
<b>Раздел 4. Моделирование молекулярных систем</b>	<b>ТК4</b>	<b>15</b>	<b>0-15</b>					<b>15-30</b>	<b>15-30</b>
Тест или письменный опрос			15						
Защита лабораторной работы		15							
<b>Раздел 5. Механизмы образования наноструктур</b>	<b>ТК5</b>			<b>25</b>	<b>0-15</b>			<b>25-40</b>	<b>25-40</b>
Тест или письменный опрос					15				
Защита лабораторной работы				15					
Собеседование (Сбс)				10					
<b>Раздел 6. Компьютерное моделирование материалов и процессов</b>	<b>ТК6</b>					<b>15</b>	<b>0-15</b>	<b>15-30</b>	<b>15-30</b>
Тест или письменный опрос							10		
Защита лабораторной работы						5	5		
Коллоквиум (К)						10			
<b>Промежуточная аттестация (экзамен)</b>	<b>ОМ 2</b>								<b>0-45</b>
Курсовой проект									0-45

## 2. Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации

Шкала оценки результатов обучения по дисциплине:

Код компетенции	Код индикатора компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине	Уровень сформированности индикатора компетенции			
			Высокий	Средний	Ниже среднего	Низкий
			от 85 до 100	от 70 до 84	от 55 до 69	от 0 до 54
			Шкала оценивания			
			отлично	хорошо	удовлетворительно	неудовлетворительно
			зачтено			не зачтено
ПК-3	ОПК-3.1	знать:				
		основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических, химических и	В полном объеме знает основные методы моделирования структуры, свойств	С ошибками знает основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических,	Частично знает основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических,	Не знает основные методы моделирования структуры, свойств материалов, физических,

	технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов	материалов, физических, химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов	химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов	химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов	химических и технологических процессов; теорию химической связи в рамках квантово-химических подходов
	уметь:				
	определять соответствие между характеристиками и химической связи, вещества и материала на его основе, и его основными химическими, физическими, технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства	Свободно и без ошибок умеет определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и материала на его основе, и его основными химическими, физическими, технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства	С ошибками умеет определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и материала на его основе, и его основными химическими, физическими, технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства	С рядом грубых ошибок умеет определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и материала на его основе, и его основными химическими, физическими, технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства	Не умеет определять соответствие между характеристиками химической связи, вещества и материала на его основе, и его основными химическими, физическими, технологическими свойствами; идентифицировать уровни структурной организации в различных материалах и соответствующие им свойства
	владеть:				
	методами и инструментами компьютерного	Продемонстрированы все основные	Имеют место ошибки и недочеты в	Имеет минимальный набор навыков	Не владеет методами и инструментами

		моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе	навыки владения методами и инструментами компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе	навыках владения методами и инструментами компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе	владения методами и инструментами и компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе	компьютерного моделирования и анализа химических веществ и материалов на их основе
--	--	--	---	--	--	--

Оценка **«отлично»** выставляется за выполнение тестовых заданий, курсового проекта, защиту лабораторных в устно-письменной форме, коллоквиума, прохождения собеседования, ответы на вопросы экзаменационного билета. При ответе на вопрос билета должно быть продемонстрировано прочное знание основных процессов изучаемой предметной области, глубина и полнота раскрытия темы (вопроса), владение терминологическим аппаратом, умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; свободное владение монологической речью, логичность и последовательность ответа.

Оценка **«хорошо»** выставляется за выполнение тестовых заданий, курсового проекта, защиту лабораторных в устно-письменной форме, коллоквиума, прохождения собеседования и ответы на вопросы экзаменационного билета. Оценивается ответ, обнаруживающий прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; свободное владение монологической речью, логичность и последовательность ответа. Допускается одна – две неточности в ответе.

Оценка **«удовлетворительно»** выставляется за выполнение тестовых заданий, курсового проекта, коллоквиума, защиту лабораторных в устно-письменной форме и ответы на вопросы экзаменационного билета. Оценивается ответ, свидетельствующий, в основном, о знании процессов изучаемой предметной области, отличающийся недостаточной глубиной и полнотой раскрытия темы; знанием основных вопросов теории; слабо сформированными навыками анализа явлений, процессов, недостаточным умением давать аргументированные ответы и приводить примеры;

недостаточно свободным владением монологической речью, логичностью и последовательностью ответа. Допускается несколько ошибок в содержании ответа.

Оценка «**неудовлетворительно**» выставляется за слабое и неполное выполнение тестовых заданий; курсового проекта и защиту лабораторных в устно-письменной форме, отсутствие ответа на вопросы экзаменационного билета.

### 3. Перечень оценочных средств

Краткая характеристика оценочных средств, используемых при текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации обучающегося по дисциплине:

Наименование оценочного средства	Краткая характеристика оценочного средства	Описание оценочного средства
Отчет по лабораторной работе (ОЛР)	Выполнение лабораторной работы, обработка результатов испытаний, измерений, эксперимента. Оформление отчета, защита результатов лабораторной работы по отчету	Перечень заданий и вопросов для защиты лабораторной работы, перечень требований к отчету
Тест (Тест)	Система стандартизированных заданий, позволяющая автоматизировать процедуру измерения уровня знаний и умений обучающегося	Комплект тестовых заданий
Собеседование (Сбс)	Средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.	Вопросы по разделам дисциплины
Коллоквиум (К)	Средство контроля усвоения учебного материала темы, раздела или разделов дисциплины, организованное как учебное занятие в виде собеседования преподавателя с обучающимися	Вопросы по темам / разделам дисциплины
Курсовой проект (КП)	Конечный продукт, получаемый в результате планирования и выполнения комплекса учебных и исследовательских заданий. Позволяет оценить умения обучающихся самостоятельно конструировать свои знания в процессе решения практических задач и проблем, ориентироваться в информационном пространстве и уровень сформированности аналитических, исследовательских навыков, навыков практического и творческого мышления. Может выполняться в индивидуальном порядке или группой обучающихся	Темы проектов

**4. Перечень контрольных заданий или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений и навыков, характеризующих**

## этапы формирования компетенций в процессе освоения дисциплины

*Пример заданий:*

### Для текущего контроля ТК1:

Проверяемая компетенция: ПК-3.1 – Осуществляет рациональный выбор, контроль качества сырья, материалов и их технологий исходя из заданных условий эксплуатации при подготовке и реализации проектных решений

### Отчет по лабораторной работе (ОЛР) Контрольные вопросы к лабораторной работе № 1

1. Что такое молекулярная орбиталь? Какую роль выполняют базисные наборы при проведении расчетов?
2. Дайте определение энергии связи МК. Отличается ли она от энергии ионизации МК?
3. В чем физический смысл кривой потенциальной энергии? Что такое равновесное межъядерное расстояние димера?
4. Какие существуют экспериментальные методы определения структуры энергетических уровней МК?
5. В чем особенности компьютерного моделирования относительно экспериментальных методов анализа энергетических свойств МК?
6. В чем смысл геометрической оптимизации? Какие параметры МК могут изменяться при геометрической оптимизации?
7. Почему структура уровней энергии атомов и молекул (или МК) так сильно отличается?
8. Для чего определять энергию связи МК?
9. Какие факторы могут влиять на величину энергии связи МК?

### Содержание отчета

1. Расчетные и экспериментальные значения длины связи  $r_e$  и энергии связи  $E_{св}$ :

	Расчет	Эксперимент
$r_e, \text{Å}$		
$E_{св}, \text{эВ}$		

2. Диаграмма энергетических уровней от LUMO+2 до HOMO–2 с указанием неприводимых представлений.
3. Изоповерхности граничных орбиталей HOMO и LUMO.
4. Кривая потенциальной энергии.

### Контрольные вопросы к лабораторной работе № 2

1. Какие особенности оптических свойств наблюдаются у МК благородных металлов?
2. Какие процессы внутри атома или МК отражаются на электронном спектре поглощения?





7. Истинные утверждения для метода Хартри (приближения независимых частиц):

гамильтониан можно представить как сумму одно- и двухэлектронных операторов

не учитывается взаимодействие между электронами\*

не учитывается взаимодействие между ядром и электронами

не учитывается кинетическая энергия электронов

не учитываются спины электронов

8. Выполнение принципа Паули приводит к тому, что волновая функция симметрична при перестановке двух электронов

волновая функция антисимметрична при перестановке двух электронов\*

два электрона не могут находиться вблизи одной точки пространства

все орбитали в атоме имеют разную энергию

в атоме не может быть двух электронов с одинаковой энергией

9. Основой для введения приближения Борна – Оппенгеймера служит

большая величина кинетической энергии электронов

слабая зависимость электронной функции от ядерных координат\*

малая величина кинетической энергии ядер

слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами атомов второго периода

10. Сколько членов в гамильтониане электронного уравнения Шредингера для многоатомной молекулы в отсутствии внешних полей?

1

2\*

3

4

5

### **Для текущего контроля ТК2:**

Проверяемая компетенция: ПК-3.1 – Осуществляет рациональный выбор, контроль качества сырья, материалов и их технологий исходя из заданных условий эксплуатации при подготовке и реализации проектных решений

### **Контрольные вопросы к лабораторной работе № 3-4**

1. Каким способом были заданы геометрические параметры молекулы в расчете?

2. Какие параметры молекулы необходимо задать для проведения квантово-химического расчета?

3. Какие базисные наборы были использованы при выполнении расчетов? В чем их отличие?

4. Сколько и какие функции содержат базисные наборы STO-3G и 6-31G\*

для данной молекулы?

5. Что определяет символ \* в обозначении базисного набора 6-31G\*?
6. Что определяет цифра 6 в обозначении базисного набора 6-31G\*?
7. Что определяют цифры 31 в обозначении базисного набора 6-31G\*?
8. Обязательно ли задавать базисный набор при проведении квантово-химического расчета?
9. Какой оптимальный базисный набор следует выбрать для расчета геометрического строения данного соединения? Ответ поясните.
10. Какой метод расчета был использован для оптимизации геометрических параметров молекулы? В чем его особенность?
11. В чем отличие методов расчета ОХФ и НХФ?
12. Почему электронная волновая функция представляется в виде детерминанта Слейтера?
13. Какие ограничения на волновую функцию накладываются в методе Хартри – Фока. Какие существуют способы обхода этих ограничений?
14. Какие основные приближения используются при проведении неэмпирического квантово-химического расчета?
15. Как узнать порядковый номер ВЗМО молекулы?
16. Какую информацию о дипольном моменте молекулы можно получить только с помощью квантово-химического расчета?

### Тестовые задания для ТК2:

1. Выполнение принципа Паули приводит к тому, что волновая функция симметрична при перестановке двух электронов...

\*волновая функция антисимметрична при перестановке двух электронов  
два электрона не могут находиться вблизи одной точки пространства  
все орбитали в атоме имеют разную энергию  
в атоме не может быть двух электронов с одинаковой энергией

2. Сколько членов в нерелятивистском молекулярном гамильтониане?

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5\*

3. Основой для введения приближения Борна – Оппенгеймера служит большая величина кинетической энергии электронов

\* слабая зависимость электронной функции от ядерных координат  
малая величина кинетической энергии ядер  
слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами  
отсутствие спина у большинства атомов второго периода

4. Сколько членов в гамильтониане электронного уравнения Шредингера для

многоатомной молекулы в отсутствии внешних полей?

- 1
- 2
- 3
- 4\*
- 5

5. Сколько членов в гамильтониане ядерного уравнения Шредингера для многоатомной молекулы?

- 1
- 2\*
- 3
- 4
- 5

6. Понятие поверхности потенциальной энергии (ППЭ) появляется из-за использования приближения центрального поля  
использования метода самосогласованного поля

- \* использования приближения Борна – Оппенгеймера
- использования метода МО ЛКАО
- использование детерминанта Слэтера

7. Какова размерность ППЭ линейной молекулы, состоящей из  $M$  атомов?

- $3M-2$
- $3M-3$
- $3M-4$
- $3M-5^*$
- $3M-6$

8. Какова размерность ППЭ нелинейной молекулы, состоящей из  $M$  атомов?

- $3M-2$
- $3M-3$
- $3M-4$
- $3M-5$
- $3M-6^*$

9. Адиабатическое приближение плохо выполняется...

- в нежестких молекулах
- в электронно-возбужденных молекулах
- в системах с замкнутой электронной оболочкой
- в радикалах

\* в случае близкого по энергии расположения электронных состояний

10. В гамильтониан электронного уравнения не входит следующий член  
оператор кинетической энергии электронов

- \* оператор кинетической энергии ядер
- оператор потенциальной энергии отталкивания электронов
- оператор электростатического взаимодействия электронов с ядрами
- оператор межъядерного отталкивания

### **Для текущего контроля ТКЗ:**

Проверяемая компетенция: ПК-3.1 – Осуществляет рациональный выбор, контроль качества сырья, материалов и их технологий исходя из заданных условий эксплуатации при подготовке и реализации проектных решений

### **Контрольные вопросы к лабораторной работе № 5**

1. Что такое SolidWorks?
2. Особенности поверхностного моделирования.
3. Основные инструменты для создания эскиза детали.
4. Основные инструменты для работы с поверхностями.
5. Как создать спиральную поверхность?
6. С помощью какого инструмента несколько поверхностей преобразуется в одну?
7. Что такое ANSYS?
8. Краткая характеристика CAE-систем. Примеры.
9. Какие инструменты есть в блоке Geometry?
10. Для чего нужен Material Designer?
11. Какие виды объемных элементов модифицированной микроструктуры есть в Material Designer?
12. Основные этапы выполнения работы.

### **Контрольные вопросы к лабораторной работе №6**

1. Что такое сеточная модель?
2. Краткая характеристика CAE-систем. Примеры.
3. Как импортировать геометрию в проект ANSYS?
4. В каком блоке происходит настройка сеточной модели?
5. Основные инструменты для создания сетки в ANSYS.
6. Основные этапы выполнения работы.

### **Тестовые задания для ТКЗ**

1. Какова размерность ППЭ молекулы  $H_2O$ ?  
1  
3\*  
5  
7  
9
2. Какова размерность ППЭ молекулы  $C_2H_2$ ?  
1  
3  
6\*  
7  
9

3. Какова размерность ППЭ молекулы HF?

1\*

3

5

7

9

4. Процесс изомеризации в квантово-химическом описании это переход системы на соседнюю ППЭ

переход системы из одного электронного состояния в другое

\*переход системы из одного минимума на ППЭ в другой

изменение формы ППЭ

изменение мультиплетности системы

5. Конформации молекулы

\* различаются по положению изображающей точки молекулярной системы на ППЭ

имеют разные химические свойства

имеют разный состав

имеют разный заряд

имеют разную мультиплетность

6. Волновая функция молекулы в методе Хартри – Фока представляется как

линейная комбинация атомных орбиталей

произведение всех атомных орбиталей

сумма всех атомных орбиталей

\* детерминант Слетера, составленный из молекулярных орбиталей

сумма всех молекулярных орбиталей

7. Ограниченный метод Хартри – Фока обозначается как

UHF

RHF \*

MP2

AM1

MNDO

8. Учет электронной корреляции

изменяет заряд молекулы

изменяет мультиплетность молекулы

не изменяет полную энергию молекулы

увеличивает электронную энергию молекулы

\* понижает полную энергию молекулы

9. В каком полуэмпирическом методе явно учитывается электронная корреляция?

MNDO

CNDO/2

AM1  
INDO/S\*  
INDO

10. Каким полуэмпирическим методом можно рассчитывать системы с водородными связями?

MNDO  
CNDO/2  
AM1\*  
PPP  
INDO

#### **Для текущего контроля ТК4:**

Проверяемая компетенция: ПК-3.1 – Осуществляет рациональный выбор, контроль качества сырья, материалов и их технологий исходя из заданных условий эксплуатации при подготовке и реализации проектных решений

#### **Контрольные вопросы к лабораторной работе №7-8**

1. Для чего нужен Material Designer?
2. Как импортировать геометрию в проект ANSYS?
3. В каком блоке происходит настройка сеточной модели?
4. Как создавать связь между модулями?
5. Основные инструменты для создания сетки в ANSYS.
6. Основные этапы выполнения работы.

#### **Содержание отчета по лабораторной работе:**

1. Титульный лист.
2. Цель работы.
3. Описание работы (с исходной схемой и таблицей для своего варианта).
4. Этапы построения (со скриншотами этапов).
5. Результаты работы (финальные скриншоты окон ANSYS Workbench, Material Designer, Geometry, Model и Setup).
6. Вывод.

#### **Тестовые задания для ТК4**

1. Каким полуэмпирическим методом можно рассчитывать электронные спектры молекул?

MNDO  
CNDO/S \*  
AM1

CNDO/2

INDO

2. В каком полуэмпирическом методе нет процедуры самосогласования?

MNDO

CNDO/2

AM1

PPP \*

INDO

3. Какой полуэмпирический метод хорошо рассчитывает энтальпии образования?

MNDO \*

CNDO/2

CNDO/S

PPP

INDO

4. Увеличение числа базисных функций в квантово-химическом расчете

\* понижает полную энергию системы

не изменяет полную энергию системы

повышает полную энергию системы

изменяет заряд системы

изменяет мультиплетность системы

5. Число базисных функций у атома второго периода в минимальном базисном наборе в расчете методом Хартри – Фока?

3

4

5 \*

6

7

6. Число базисных функций у атома водорода в минимальном базисном наборе в расчете методом Хартри – Фока?

1 \*

2

3

4

5

7. Минимальный базисный набор обозначают как

6-31+G\*\*

DZ

4-31G\*

SZ \*

TZ

8. Включение в расчет диффузных функций необходимо для описания:

дипольного момента

первого потенциала ионизации

\* водородных связей

межатомных взаимодействий и химической связи в молекуле  
энтальпии образования

9. Включение в расчет поляризационных функций необходимо для описания:

дипольного момента

первого потенциала ионизации

водородных связей

\* межатомных взаимодействий и химической связи

энтальпии образования

10. Проблемы с учетом электронной корреляции в методе Хартри – Фока вызваны:

использованием приближения центрального поля

\* использованием приближения независимых частиц

использованием приближения Борна – Оппенгеймера

использованием метода МО ЛКАО

использованием детерминанта Слэтера

#### **Для текущего контроля ТК5:**

Проверяемая компетенция: ПК-3.1 – Осуществляет рациональный выбор, контроль качества сырья, материалов и их технологий исходя из заданных условий эксплуатации при подготовке и реализации проектных решений

#### **Контрольные вопросы к лабораторной работе №9**

1. Что такое сеточная модель?
2. Приведите краткую характеристику CAE систем и примеры
3. Какой функционал несет Material Desinger?
4. Каким образом можно импортировать геометрию изделия проект в Ansys?
5. Как приложить силу к ребру и поверхности?
6. Перечислите основные этапы выполнения лабораторной работы

#### **Тестовые задания для ТК5:**

1. Существенно более точный учет электронной корреляции может быть достигнут...

путем повышения точности процедуры согласования

путем использования более широких базисных наборов

путем использования вариационного принципа

путем перехода от численного к аналитическому способу решения

электронного уравнения Шредингера

\* путем использования метода, дающего более точную волновую функцию

2. Многоконфигурационное приближение используется в методе

RHF (ОХФ)

\* МКССП

MNDO

MP2



AM1

3. Полный учет электронной корреляции возможен в методе RHF (ОХФ)

MNDO

MP2

AM1

\* FCI (полное КВ)

4. Поляризационные функции включены в следующие базисные наборы:

TZ

\* 6-31G\*

STO-3G

4-31G

DZ

5. Диффузные функции включены в следующие базисные наборы:

TZ

6-31G\*

STO-3G

4-31G

\* 6-31+G\*

6. Расчетные свойства молекул, не измеряемые в эксперименте геометрическое строение

\* направление дипольного момента

теплота образования

величина дипольного момента

частоты колебаний

7. Расчетные свойства молекул, не измеряемые в эксперименте геометрическое строение

теплота образования

величина дипольного момента

частоты колебаний

\* заряды на атомах

8. Номер низшей вакантной (свободной) МО (НВМО) молекулы H<sub>2</sub>O, рассчитанной в приближении MNDO

3

4

5\*

6

7

9. Какие единицы измерения частот и энергий переходов используются в колебательной спектроскопии?

Гц

см<sup>-1</sup> \*

нм

эВ

м.д.

10. Какие единицы измерения частот и энергий переходов используются во вращательной спектроскопии?

Гц\*  
см<sup>-1</sup>  
нм  
эВ  
м.д.

### **Собеседование (Сбс)**

#### **Перечень вопросов:**

1. Какова роль компьютерного моделирования при разработке наноструктур?
2. Какие два основных подхода наметились к решению задач молекулярного моделирования?
3. Какие группы численных методов используется при моделировании наносистем?
4. Проведите сравнительную характеристику методов расчетов наносистем.
5. В чем заключается «многомасштабное моделирование материалов и процессов»?
6. Какое специализированное программное обеспечение в настоящее время используется при моделировании наносистем?
7. Что означает «виртуальная среда совместного решения задач»?
8. Заключается ли сущность одноэлектронного приближения?
9. Объясните, почему невозможно решение уравнения Шрёдингера для неводородоподобных систем?
10. Какой потенциал называется эффективным?

#### **Для текущего контроля ТК6:**

Проверяемая компетенция: ПК-3.1 – Осуществляет рациональный выбор, контроль качества сырья, материалов и их технологий исходя из заданных условий эксплуатации при подготовке и реализации проектных решений

### **Контрольные вопросы к лабораторной работе №10**

1. Какой формат модели импортировался в проект?
2. Как приложить температуру к ребру или поверхности?
3. В каком блоке происходит настройка сеточной модели?
4. Как создавать связь между модулями?
5. Для каких целей нужна операция Fixed Support?
6. Для чего используется инструмент Parametrs?
7. Перечислите основные этапы выполнения работы

#### **Тестовые задания для ТК6:**

1. Какие единицы измерения используются в спектроскопии ЯМР?

Гц

см<sup>-1</sup>

нм

эВ

м.д.\*

2. Включение в расчет поляризационных функций необходимо для описания:  
дипольного момента

первого потенциала ионизации

водородных связей

\* межатомных взаимодействий и химической связи

энтальпии образования

3. Проблемы с учетом электронной корреляции в методе Хартри – Фока вызваны:

использованием приближения центрального поля

\* использованием приближения независимых частиц

использованием приближения Борна – Оппенгеймера

использованием метода МО ЛКАО

использованием детерминанта Слэтера

4. В каком полуэмпирическом методе нет процедуры самосогласования?

MNDO

CNDO/2

AM1

PPP \*

INDO

5. Какой полуэмпирический метод хорошо рассчитывает энтальпии образования?

MNDO \*

CNDO/2

CNDO/S

PPP

INDO

6. Увеличение числа базисных функций в квантово-химическом расчете

\* понижает полную энергию системы

не изменяет полную энергию системы

повышает полную энергию системы

изменяет заряд системы

изменяет мультиплетность системы

7. Выполнение принципа Паули приводит к тому, что

волновая функция симметрична при перестановке двух электронов

\* волновая функция антисимметрична при перестановке двух электронов

два электрона не могут находиться вблизи одной точки пространства

все орбитали в атоме имеют разную энергию

в атоме не может быть двух электронов с одинаковой энергией

8. Сколько членов в нерелятивистском молекулярном гамильтониане?

1

2

3

4

5 \*

9. Основой для введения приближения Борна – Оппенгеймера служит большая величина кинетической энергии электронов

\* слабая зависимость электронной функции от ядерных координат

малая величина кинетической энергии ядер

слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами

отсутствие спина у большинства атомов второго периода

10. Каким полуэмпирическим методом можно рассчитывать системы с водородными связями?

MNDO

CNDO/2

AM1\*

PPP

INDO

### Коллоквиум

1. Опишите модель механизма образования кластера.
2. Опишите результаты молекулярно-динамических исследований.
3. Проведите аналогию между метастабильными состояниями кластеров и возбужденными состояниями атомов.
4. Что лежит в понятии о поверхности потенциальной энергии?
5. В каких теориях используется понятие о поверхности потенциальной энергии?
6. Как можно определить поверхность потенциальной энергии?
7. В виде каких функции задается поверхность потенциальной энергии?
8. Что из себя представляет потенциальная энергия двухатомной системы?
9. Как происходит поиск седловых точек потенциальной энергии?
10. Приведите примеры моделей кластерных систем.
11. Что такое «фрактальные кластеры» и какие модели их формирования вы знаете?
12. •Методы моделирования квантовомеханические «из первых принципов»:
  - метод Хартри - Фока;
  - теория функционала плотности;
  - метод валентных схем;
  - метод молекулярных орбиталей;
  - модель поверхности потенциальной энергии;
  - молекулярные:
    - молекулярная механика;
    - молекулярная динамика;
    - методы Монте-Карло.

Курсовой проект /курсовая работа

1. Моделирование и анализ объектов с контролируемой микроструктурой композитных конструкционных материалов
2. Химическое и электронное строение кристалла  $\text{SiO}_2$   $\alpha$ -квартц
3. Химические вещества и роль их превращений в производстве основных типов материалов (металлов, полимеров, керамики и т.д.).
5. Математическое моделирование процессов в материаловедении с использованием MS Excel
6. Сравнительный анализ квантово-химического программного обеспечения для молекулярно-кластерных и периодических расчетов.
7. Моделирование результатов дифракционных исследований как средство производства химической информации.
8. Химические базы данных. Библиографические базы химических данных. Универсальные базы физико-химических и структурных данных. Специализированные базы данных по свойствам химических соединений. Особенности формирования запросов к химическим базам данных.
9. Структурное моделирование и анализ кристаллических твердых тел. Модели поверхности кристалла и кристаллографических сечений объемной структуры.
10. Моделирование структуры и свойств наносистем и композиций
11. Расчет равновесного параметра решетки кристаллических структур и их электронных свойств
12. Оценка влияния параметров химической связи на структуру и свойства карбидов и нитридов
13. Разработка программы для моделирования движения электрона в слоистых гетероструктурах при приложении постоянного электрического поля в направлении, перпендикулярном плоскостям слоёв
14. Квантово-химическое моделирование нанореакторов и процессов получения в них наноструктур
15. Моделирование процессов структурообразования при введении наносистем
16. Обоснование выбора программного комплекса для моделирования процессов модификации наноструктурами
17. Моделирование композитной структуры в программном комплексе ansys workbench
18. Методы компьютерного моделирования наноструктур
19. Моделирование и анализ прочности сэндвич панели в Ansys
20. Моделирование и анализ физических свойств изделий в Ansys
21. Анализ усталостной долговечности композитов в Ansys nCode DesignLife
22. Моделирование упругих свойств однонаправленных композиционных материалов с помощью Ansys Material Designer
23. Моделирование композитов в среде Ansys с помощью пространственного слоистого конечного элемента
24. Анализ применения армирующих элементов в ANSYS Mechanical
25. Разработка программного обеспечения по расчету параметров

химической связи в гомо-и гетеро ядерных соединениях

26. Компьютерный анализ влияния температуры на параметры химической связи в гомо-и гетеро соединениях

27. Керамика на основе наномодифицированных силикатов

28. Оценка влияния параметров химической связи на структуру и свойства веществ и материалов на их основе

### Для промежуточной аттестации:

#### Вопросы к экзамену

12. Дайте общую характеристику структуры и свойств различных типов молекулярных веществ и материалов.

13. Дайте общую характеристику структуры и характеристических свойств немолекулярных металлических веществ и материалов.

14. Дайте общую характеристику структуры и характеристических свойств немолекулярных ионных веществ и материалов.

15. Приведите основные уровни структурной организации металлических и полимерных материалов. Приведите примеры.

16. Химические вещества и роль их превращений в производстве основных типов материалов (металлов, полимеров, керамики и т.д.).

17. Перечислите основные виды связи элементов структуры различных материалов.

18. Раскройте смысл понятий электроотрицательности, потенциала ионизации и сродства к электрону и их практическую значимость для характеристики связей элементов, структуры и свойств веществ и материалов.

19. Какие по преобладающему типу химической связи вещества связываются межмолекулярным взаимодействием и почему?

20. Чем химическая связь отличается от физической – ван-дер-ваальсовой?

21. Перечислите виды межмолекулярных взаимодействий.

22. Перечислите три разновидности ван-дер-ваальсового взаимодействия и назовите их специфику.

23. Охарактеризуйте ориентационные взаимодействия (силы Кизома, дипольные, электростатические силы).

24. Охарактеризуйте индукционные взаимодействия (силы Дебая).

25. Охарактеризуйте дисперсионные взаимодействия (силы Лондона).

26. Какова роль компьютерного моделирования при разработке наноструктур?

27. Какие два основных подхода наметились к решению задач молекулярного моделирования?

28. Какие группы численных методов используется при моделировании наносистем?

29. Проведите сравнительную характеристику методов расчетов наносистем.

30. В чем заключается «многомасштабное моделирование материалов и процессов»?

31. Какое специализированное программное обеспечение в настоящее время

используется при моделировании наносистем?

32. Что означает «виртуальная среда совместного решения задач»?
33. Заключается ли сущность одноэлектронного приближения?
34. Объясните, почему невозможно решение уравнения Шрёдингера для неводородоподобных систем?
35. Какой потенциал называется эффективным?
36. Запишите уравнение Хартри и поясните физический смысл составляющих уравнения.
37. Объясните физический смысл обменной энергии.
38. Чем отличается уравнение Хартри от уравнения Хартри-Фока?
39. В чем заключена основная возможность метода молекулярной динамики?
40. При изучении каких вопросов используется метод молекулярной динамики в квантовой химии и физике твердого тела?
41. Какие основные классические законы используются в методе молекулярной динамики?
42. Составьте уравнение движения многочастичной системы.
43. Составьте уравнения движения используя формализм Лагранжа.
44. В чем заключена идея алгоритма Верле и опишите его
45. Опишите метод неэмпирической молекулярной динамики.
46. Какую информацию дают нам модели атомной подвижности?
47. Какие математические методы можно отнести к квантовомеханическим расчетам «из первых принципов»?
48. В чем суть квантово-теоретического подхода расчетов «из первых принципов»?
49. В чем сходство и различия метода самосогласованного поля и теории функционала плотности?
50. Перечислите наиболее широко используемые потенциалы взаимодействий частиц.
51. Опишите методы моделирования молекулярных систем.
52. Какие многочастичные потенциалы вам известны?
53. Какие полуэмпирические методы вы знаете?
54. В чем отличие метода молекулярной механики от квантовомеханических расчетов «из первых принципов»?
55. В чем суть метода молекулярной динамики?
56. Для каких целей может применяться моделирование методом молекулярной динамики?
57. Опишите основные этапы кинетического метода Монте-Карло.
58. Какие моменты необходимо рассмотреть при микроскопическом подходе в исследовании нанокластеров?
59. В чем заключается основная проблема при изучении нанокластеров?
60. Опишите термодинамическую модель кластера.
61. Опишите модель механизма образования кластера.
62. Опишите результаты молекулярно-динамических исследований.
63. Проведите аналогию между метастабильными состояниями кластеров и

возбужденными состояниями атомов.

64. Что лежит в понятии о поверхности потенциальной энергии?

65. В каких теориях используется понятие о поверхности потенциальной энергии?

66. Как можно определить поверхность потенциальной энергии?

67. В виде каких функции задается поверхность потенциальной энергии?

68. Что из себя представляет потенциальная энергия двухатомной системы?

69. Как происходит поиск седловых точек потенциальной энергии?

70. Приведите примеры моделей кластерных систем.

71. Что такое «фрактальные кластеры» и какие модели их формирования вы знаете?

Полный комплект заданий и материалов, необходимых для оценивания результатов обучения по дисциплине, хранится на кафедре разработчика.