

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой общей
физики



Турищев С.Ю.
22.05.2024

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.09 Квантовые основы моделирования в нанотехнологиях

1. Код и наименование направления подготовки: **28.04.02 Нанотехнологии**
2. Профиль подготовки/специализации: *Физическая нанодиагностика и синхротронные технологии*
3. Квалификация (степень) выпускника: *магистр*
4. Форма образования: *очная*
5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: *кафедра общей физики*
6. Составители программы: *Меремьянин Алексей Васильевич*
к.ф.-м.н., доцент
7. Рекомендована: *НМС физического факультета протокол №5 от 22.05.2024*
8. Учебный год: *2026-2027* Семестр: *3*

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Формирование знаний в области системообразующей роли наноинженерии в формировании технологических укладов индустриального и постиндустриального общества. Изучение закономерности развития наукоёмких технологий в наноинженерии на базе генезиса фундаментальных знаний.

Задачи учебной дисциплины:

- получение у обучающихся представлений о физических идеях и принципах современной наноинженерии, формирование комплекса теоретических знаний о физических свойствах низкоразмерных электронных систем, важнейших физических процессах и явлениях, составляющих фундаментальную основу наноинженерии;
- знакомство с существующими моделями, теориями различных физических явлений и основными областями применения нанoeлектронных структур;
- изучение явлений и процессов в наноструктурах, использующихся при разработке элементов и приборов наноинженерии;
- формирование навыков применения теоретических знания о физических свойствах нанoeлектронных систем для исследования важнейших физических процессов и явлений, составляющих фундаментальную основу наноинженерии;
- овладение навыками расчета параметров и характеристик приборов и устройств нанoeлектроники, выбора экспериментальных методов исследования, соответствующих поставленным задачам.

10. Место учебной дисциплины в структуре ОПОП: Учебная дисциплина «Квантовые основы моделирования в наноинженерии» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений обязательной части блока Б1.

В результате прохождения данной дисциплины обучающийся должен приобрести знания, умения, навыки общепрофессиональных и профессиональных компетенций, необходимых для обеспечения трудовых функций:

D/01.7 «Формирование новых направлений научных исследований и опытно-конструкторских разработок», D/04.7 «Определение сферы применения результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ», В/02.6 «Проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований» профессионального стандарта 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»;

В/01.7 «Развитие, сохранение и рациональное использование инфраструктуры материаловедческого подразделения в части, касающейся отдельной операции контроля, измерения свойств и испытания основных, вспомогательных и расходных материалов», В/05.7 «Рациональное использование, обслуживание, модернизация и настройка оборудования, обеспечивающего выполнение операций контроля, измерения свойств», С/07.7 «Освоение нового оборудования, обеспечивающего выполнение операций контроля, измерения свойств (инженерных, технологических, эксплуатационных) и испытания материалов» профессионального стандарта 40.005

«Специалист в области материаловедческого обеспечения технологического цикла производства объемных нанометаллов, сплавов, композитов на их основе и изделий из них».

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Компетенции		Индикаторы		Планируемые результаты обучения
Код	Наименование компетенции	Код(ы)	Наименование индикатора(ов)	
ПК-3	Готов обоснованно выбирать сочетания способов решения научно-технических и технологических задач, и делать на основе полученных данных обобщенные выводы, направленные на создание новых и усовершенствование имеющихся процессов нанотехнологии, включая подготовку научных публикаций и их апробацию	ПК-3.1	Обоснованно использует теоретические и экспериментальные подходы в области нанотехнологии	<i>Знать:</i> - основы квантовой теории для применения при моделировании наноматериалов, наноструктур и процессов в нанотехнологии; <i>Уметь:</i> - использовать квантовые основы моделирования в области нанотехнологии; <i>Владеть:</i> - методикой квантовых основ моделирования для решения задач в области нанотехнологии
ПК-4	Готов проводить на современном мировом уровне все составные части фундаментальных, поисковых и прикладных работ в области нанотехнологии и смежных направлений, в том числе с использованием синхротронных технологий	ПК-4.2	Эффективно комбинирует результаты профессиональной деятельности в области нанотехнологии с задачами смежных отраслей науки, техники и технологий	<i>Знать:</i> - математические методы решения задач оптимизации параметров сложных объектов; - программные и технические средства компьютерного моделирования <i>Уметь:</i> - формулировать задачи исследования и оптимизации параметров сложных объектов с помощью квантовых основ моделирования <i>Владеть:</i> - квантовых основ моделирования для повышения эффективности научной и образовательной сфер деятельности
ПК-5	Способен определять и обоснованно прогнозировать	ПК-5.1	Определяет и обоснованно прогнозирует направления научно-	<i>Знать:</i> - подходы решения задач и оптимизации процессов в нанотехнологии с помощью

	основные направления нацнотехнологического развития основных отраслей региона в масштабе связного территориального развития страны на пересечении отраслей, использующих научные, технические и технологические результаты нанотехнологий		технологического развития основных отраслей региона	квантовых основ моделирования; <i>Уметь:</i> - выявлять необходимость использования процессов моделирования, с использованием квантовых основ, для решения задач в различных отраслях нанотехнологий <i>Владеть:</i> - методологией использования квантовых основ в моделировании для решения задач в различных отраслях нанотехнологий
--	---	--	---	--

12 Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 3/108

Форма промежуточной аттестации - экзамен

13 Трудоёмкость по видам учебной работы:

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)	
	Всего	По семестрам
		3 сем.
Аудиторные занятия	36	36
в том числе: лекции	18	18
практические занятия	18	18
Самостоятельная работа	36	36
Форма промежуточной аттестации - экзамен	36	36
Итого:	108	108

13.1. Содержание разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Методы квантовой механики в задаче многих тел	1. Уравнение Шрёдингера в задаче многих тел. Адиабатическое приближение. 2. Метод молекулярных орбиталей
1.2	Методы самосогласованного поля	3. Уравнение Шрёдингера в приближении самосогласованного поля. Метод Хартри. 4. Метод Хартри-Фока.
1.3	Учёт корреляций в методах самосогласованного поля	5. Метод конфигурационного взаимодействия. 6. Полуэмпирические методы.
1.4	Метод псевдопотенциала и теория функционала плотности	7. Электронная плотность. Модель Томаса-Ферми-Дирака. 8. Уравнения Кона-Шэма. 9. Реализации метода теории функционала плотности.
2. Практические занятия		

2.1	Методы квантовой механики в задаче многих тел	1. Уравнение Шрёдингера для двухатомной молекулы. 2. Приближение Борна-Оппенгеймера. 3. Классификация молекулярных термов.
2.2	Методы самосогласованного поля	4. Обменное взаимодействие. 5. Приближение Хартри-Фока для молекулы водорода.
2.3	Учёт корреляций в методах самосогласованного поля	6. Базис конфигурационных состояний. 7. Учёт корреляций в молекуле водорода.
2.4	Метод псевдопотенциала и теория функционала плотности	8. Метод Томаса-Ферми для атомов. 9. Базис плоских волн.

13.2. Разделы дисциплины и виды занятий:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)			
		Лекции	Практические занятия	Самостоятельная работа	Всего
1	Методы квантовой механики в задаче многих тел	4	6	10	20
2	Методы самосогласованного поля	4	4	8	16
3	Учёт корреляций в методах самосогласованного поля	4	4	8	16
4	Метод псевдопотенциала и теория функционала плотности	6	4	10	20
	Экзамен				36
	Итого:	18	18	36	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:

Изучение дисциплины «Квантовые основы моделирования в нанотехнологиях» предусматривает осуществление учебной деятельности состоящей из двух частей: обучения студентов преподавателем (лекции и практические занятия) и самостоятельной учебной деятельности студентов по изучению дисциплины.

Основной, наиболее экономичной формой получения и усвоения информации, теоретических знаний в вузе является лекция, позволяющая воспринять значительную сумму знаний и потому способствующая повышению продуктивности всех других форм учебного труда. Наличие собственного конспекта лекций позволяет еще раз ознакомиться, продумать, разобраться в новом материале, так как недостаточно хорошо понятое во время лекции положение может быть восстановлено в памяти, сопоставлено с другими, додумано, дополнено, уяснено и расширено с помощью учебной литературы.

Лекционная часть курса органически взаимосвязана с иными видами работ: подбором, изучением, анализом и конспектированием рекомендованной литературы, подготовкой и сдачей экзамена по дисциплине, в структуре которых также большое значение имеет самостоятельная работа студента-магистра. Приступая к изучению нового материала, необходимо сосредоточиться, т.е. сконцентрировать внимание и не отвлекаться от выполняемой работы, помня, что желание запомнить является гарантией успешной работы, отсутствие же воли к запоминанию снижает эффект восприятия.

Практические занятия направлены на более глубокое освоение материала, изложенного на лекциях. Занятия проводятся в режиме диалога и обсуждения наиболее сложных вопросов в аудитории.

Самостоятельная работа студентов наряду с аудиторной представляет одну из форм учебного процесса и является существенной ее частью, что наиболее ярко

представлено в процессе подготовки магистров. Последнее обусловлено тем, что самостоятельная работа предназначена для формирования навыков самостоятельной работы в учебной, научной деятельности, формирование и развитие способности принимать на себя ответственность, самостоятельно решать проблему, находить конструктивные решения, выход из кризисной ситуации. Самостоятельная работа - это планируемая работа студентов, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия.

Подготовка к лекциям является одним из видов самостоятельной работы студентов-магистров. Студентам, чтобы хорошо овладеть учебным материалом, необходимо выработать навыки правильной и планомерной работы.

Самостоятельная работа обучающихся при изучении «Квантовые основы моделирования в нанотехнологиях» включает в себя: подготовку и участие в изучении теоретической части курса, подготовку к практическим занятиям, подготовку к экзамену.

Самостоятельная работа студента при изучении «Квантовые основы моделирования в нанотехнологиях» включает в себя:

изучение теоретической части курса	- 20 часов
подготовка к практическим занятиям	- 16 часов
итого - 36 часов	

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов Интернет, необходимых для освоения дисциплины:

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Кук, Дэвид. Квантовая теория молекулярных систем. Единый подход = Quantum chemistry. A unified approach : [учебное пособие] / Д. Кук ; пер. с англ. Б.К. Новосадова. Долгопрудный : Интеллект, 2012. 254, [1] с. : ил., табл. ISBN 978-5-91559-096-9.
2	Дегтяренко Н.Н. Специальные разделы квантово-механических методов расчетов свойств кластеров и наноматериалов / Н. Н. Дегтяренко ; учебное пособие. М.: МИФИ, 2008. – 156 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Филиппов, Владимир Владимирович. Квантовохимическое моделирование и проектирование полупроводниковых наноструктур : учебное пособие для студ. высш. учеб. заведений / В.В. Филиппов, А.Н. Власов ; Липец. гос. пед. ун-т. Липецк : ЛГПУ, 2011. 112 с. : ил., табл. ISBN 978-5-88526-535-5.
4	Папулов, Юрий Григорьевич. Расчетные методы в атом-атомном представлении : Монография / Ю.Г. Папулов, М.Г. Виноградова ; Твер. гос. ун-т, Твер. гос. техн. ун-т. Тверь, 2002. 231 с. : ил., табл. ISBN 5-7609-0151-6.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
5	http://www.lib.vsu.ru – ЗНБ ВГУ
6	https://edu.vsu.ru – Образовательный портал "Электронный университет ВГУ"
7	Федеральный портал «Российское образование» http://www.edu.ru

16. Учебно-методическое обеспечение для организации самостоятельной работы:

№ п/п	Источник
8	Новосадов Б.К. Методы математической физики молекулярных систем: Квантовая теория молекулярных систем. Решение волновых уравнений Шредингера в нерелятивистской и релятивистской квантовой механике молекул / Б.К. Новосадов ; URSS. 2018. 384 с. ISBN 978-5-397-06074-5.
9	Минкин В.И. Теория строения молекул / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев ; Серия «Учебники и учебные пособия». Ростов-на-Дону: «Феникс», 1997. 560 с.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины:

В учебном процессе используются следующие образовательные технологии по образовательным формам: лекции; лабораторные работы, индивидуальные занятия. По преобладающим методам и приемам обучения: объяснительно-иллюстративные (объяснение, показ–демонстрация учебного материала и др.); активные (анализ учебной и научной литературы, составление схем и др.) и интерактивные, в том числе и групповые (взаимное обучение в форме подготовки и обсуждения докладов); информационные; компьютерные; мультимедийные (работа с сайтами академических структур, научно-исследовательских организаций, электронных библиотек и др., разработка презентаций, сообщений и докладов, работа с электронными обучающими программами и т.п.).

Дисциплина может реализовываться с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Учебная аудитория (мультимедийный кабинет) (ауд. 135): специализированная мебель, компьютеры, ноутбуки, проектор, мультимедийное демонстрационное оборудование. Microsoft Windows 7, Windows 10, Microsoft office 2019, Corel Draw 2021.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся (ауд. 135): специализированная мебель, компьютеры, ноутбуки с возможностью подключения к сети Интернет и с обеспечением доступа к электронной информационно-образовательной среде ВГУ. WinPro 8 RUS. Программная система для обнаружения текстовых заимствований в учебных и научных работах «Антиплагиат.ВУЗ», Office Standard 2019, Microsoft Windows 7, Windows 10, Microsoft office 2019, Corel Draw 2021, Среда ORIGIN PRO 2022b SR1.

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий может осуществляться через образовательный портал "Электронный университет ВГУ".

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Компет енция	Индикаторы достижения компетенции	Оценочные средства
1	Методы квантовой механики в задаче многих тел	ПК-3, ПК-4, ПК-5	ПК-3.1, ПК-4.2, ПК-5.1	Практические занятия 1,2,3. Опрос
2	Методы самосогласованного поля	ПК-3, ПК-4, ПК-5	ПК-3.1, ПК-4.2, ПК-5.1	Практические занятия 4,5. Опрос

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции	Оценочные средства
3	Учёт корреляций в методах самосогласованного поля	ПК-3, ПК-4, ПК-5	ПК-3.1, ПК-4.2, ПК-5.1	Практические занятия 6,7. Опрос
4	Метод псевдопотенциала и теория функционала плотности	ПК-3, ПК-4, ПК-5	ПК-3.1, ПК-4.2, ПК-5.1	Практические занятия 8,9. Опрос Текущая аттестация
Промежуточная аттестация: форма контроля – экзамен				Комплект КИМ

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Текущий контроль успеваемости по дисциплине осуществляется путем работы на практических занятиях, опроса на занятиях, текущей аттестации.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета.

Текущая аттестация проводится в формате тестирования с использованием банка заданий фонда оценочных средств. Задание из фонда оценочных средств выбираются в соответствии с уровнем подготовки студентов. Используется задания закрытого типа (тестовые задания) и задания открытого типа (ситуационные задачи)

Банк заданий текущей аттестации (Фонд оценочных средств): Перечень заданий для оценки уровня освоения дисциплины:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

1.1. Что такое электронная корреляция в контексте квантовой механики?

- a) Взаимодействие электронов с внешним полем.
- b) Влияние движения одного электрона на движение других электронов в системе.**
- c) Вклад в энергию системы, связанный с обменом электронами между различными орбиталями.
- d) Энергия кулоновского притяжения между электронами и ядрами.

1.2. Какой метод является основным методом учёта корреляционных эффектов в рамках подхода самосогласованного поля?

- a) Метод Хартри.
- b) Метод конфигурационного взаимодействия (CI).**
- c) Метод функционала плотности (DFT).
- d) Метод Монте-Карло.

1.3. Каким образом учитываются корреляции в методе конфигурационного взаимодействия?

- a) Путём суммирования вкладов от различных конфигураций электронов.**
- b) Путём решения уравнений Хартри-Фока итеративным методом.

- c) Путём замены многоэлектронной задачи на задачу о распределении электронной плотности.
- d) Путём введения поправок к потенциалу взаимодействия.

1.4. Почему метод Хартри-Фока не учитывает корреляционные эффекты?

- a) Потому что он предполагает независимость движений электронов.**
- b) Потому что в нём используется классическая теория возмущений.
- c) Потому что этот метод основывается на упрощённых моделях взаимодействия частиц.
- d) Потому что учет корреляции требует дополнительных вычислений.

1.5. Каково основное уравнение квантовой теории, описывающее поведение системы многих тел?

- a) Уравнение Шредингера.**
- b) Уравнение Дирака.
- c) Уравнение Клейна-Гордона.
- d) Уравнение Гамильтона-Якоби.

1.6. Какие частицы подчиняются статистике Ферми-Дирака?

- a) Фотоны.
- b) Фермионы.**
- c) Бозоны.
- d) Лептоны.

1.7. Чему равен спин фермионов?

- a) Целому числу.
- b) Половине целого числа.**
- c) Любому рациональному числу.
- d) Любому иррациональному числу.

1.8. Что из перечисленного можно отнести к наноматериалам?

- a) Углеродные нанотрубки, металлические нанопроволоки, керамические наноструктуры.
- b) Полимерные нановолокна, графены, фуллерены.
- c) Карбоновые наноточки, квантовые точки, квантовые ямы.
- d) Все вышеперечисленные варианты.

1.9. Что такое поверхностные эффекты?

- a) Влияние границы раздела на свойства материала.
- b) Изменение свойств материала вблизи поверхности.
- c) Влияние внешней среды на свойства поверхности материала.
- d) Поверхностные эффекты означают изменение свойств материала вблизи поверхности.

1.10. Какой из перечисленных объектов является источником синхротронного излучения?

- a) Синхротрон**
- b) Лазер
- c) Рентгеновская трубка
- d) Радиоактивный изотоп

1.11. Какой физический процесс лежит в основе генерации синхротронного излучения?

- a) **Отклонение заряженных частиц в магнитном поле**
- b) Ядерный распад
- c) Термоядерный синтез
- d) Фотоэффект

1.12. Какая из перечисленных характеристик синхротронного излучения является уникальной?

- a) Монохроматичность
- b) Поляризация
- c) **Высокая интенсивность**
- d) Коллимация

1.13. Какие волновыми свойствами обладает электромагнитное излучение рентгеновского диапазона?

- a) Преломление и отражение
- b) полное внутреннее отражение
- c) полное внешнее отражение
- d) **все перечисленное**

1.14. Какой прибор используется для получения рентгеновских дифракционных данных?

- a) Электронный микроскоп
- b) **Дифрактометр**
- c) Спектроскоп

1.15. Какой из параметров не влияет на рентгеновский дифракционный спектр?

- a) Толщина образца
- b) **Цвет образца**
- c) Угол падения излучения

1.16. Какие элементы относятся к ферромагнитным металлам переходной группы?

- a) Натрий, калий, кальций
- b) **Железо, кобальт, никель**
- c) Медь, серебро, золото
- d) Углерод, кремний, германий

1.17. Какие типы спектров существуют?

- a) Линейчатые, полосатые и непрерывные.
- b) Оптические, рентгеновские и гамма-спектры.
- c) Ультрафиолетовые, инфракрасные и видимые.
- d) **Все вышеперечисленные варианты верны.**

1.18. Какое излучение используется в ультрафиолетовой спектроскопии?

- a) Инфракрасное излучение.
- b) Видимое излучение.
- c) Рентгеновское излучение.
- d) **Ультрафиолетовое излучение.**

1.19. В чем заключается принцип действия масс-спектрометрического метода?

- a) **В разделении частиц по их массе при помощи электрического поля.**

- b) В измерении интенсивности поглощения света веществом.
- c) В исследовании магнитных свойств ядер атомов.
- d) В изучении электронных переходов в молекулах.

1.20. Чем характеризуется флуоресцентная спектроскопия?

- a) **Поглощением фотонов и последующим испусканием квантов света меньшей энергии.**
- b) Измерением времени жизни возбужденных состояний атомов и молекул.
- c) Исследованием колебаний молекул под действием внешних полей.
- d) Анализом распределения зарядов внутри атомов и молекул.

1.21. Что такое комбинационное рассеяние света (эффект Рамана)?

- a) **Изменение частоты падающего света при взаимодействии с веществом за счет передачи энергии от молекулы к световому кванту.**
- b) Явление отражения света от поверхности вещества.
- c) Процесс изменения поляризации света при прохождении через вещество.
- d) Рассеяние света на микроскопических неоднородностях среды.

1.22. Какой тип спектральных линий характерен для атома водорода?

- a) Полосатый спектр.
- b) **Линейчатый спектр.**
- c) Непрерывный спектр.
- d) Гамма-спектр.

1.23. Какие частицы являются источником синхротронного излучения в современных источниках?

- a) Протоны.
- b) **Электроны.**
- c) Позитроны.
- d) Нейтроны.

1.24. Что такое ондулятор?

- a) **Устройство для создания переменного магнитного поля, используемое для генерации синхротронного излучения.**
- b) Тип ускорителя частиц, основанный на использовании электромагнитных полей.
- c) Детектор для регистрации синхротронного излучения.
- d) Источник питания для управления работой синхротрона.

1.25. Сканирующая электронная микроскопия позволяет исследовать объекты диапазон размеров структурных элементов которых находится в пределах ...

- a) от 1 нм до 1 ангстрема
- b) от 0,1 нм до 1 мкм
- c) **от 0,01 мкм до 1000 мкм**
- d) от 1 мкм до 1000 мкм

1.26. Просвечивающая электронная микроскопия позволяет исследовать объекты диапазон размеров структурных элементов которых находится в пределах ...

- a) от 1 нм до 1 ангстрема
- b) **от 0,1 нм до 1 мкм**
- c) от 0,01 мкм до 1000 мкм
- d) от 1 мкм до 1000 мкм

1.27. Оптическая микроскопия позволяет исследовать объекты диапазон размеров структурных элементов которых находится в пределах ...

- a) от 1 нм до 1 ангстрема
- b) от 0,1 нм до 1 мкм
- c) от 0,01 мкм до 1000 мкм
- d) от 1 мкм до 1000 мкм**

1.28. От каких факторов зависит яркость и контрастность изображения, получаемого методом РЭМ

- a) «формы» пучка электронов, падающих на образец и характера взаимодействия электронов с образцом;
- b) типа используемого детектора и физических процессов, происходящих в нем;
- c) локального состава в области сканирования и топографии поверхности образца в исследуемой области.
- d) все из вышеперечисленного.**

1.29. При помощи каких инструментов возможно Наноманипулирование (управление отдельными атомами или молекулами).

- a) Магнитный пинцет,
- b) оптический пинцет
- c) АСМ
- d) все вышеперечисленное**

1.30. Размерный эффект – это

- a) зависимость свойств тела от его размера.**
- b) влияние размера тела на его проводимость
- c) влияние внешних факторов на размер тела

1.31. Зоной Бриллюэна называется:

- a) Длина волны электрона, движущегося в кристаллической структуре, определяемая отношением постоянной Планка к произведению эффективной массы электрона и его скорости
- b) Области значений волнового вектора, k в пределах которых энергия электрона $E(k)$ являющаяся периодической функцией, k испытывает полный цикл своего изменения.**
- c) энергетический уровень изолированного атома в кристалле

1.32. Какой тип нанобиогибридов используется для доставки лекарственных средств?

- a) Наночастицы с лекарственной нагрузкой**
- b) Имобилизованные ферменты
- c) Биосенсоры
- d) Нанонити

1.33. Какой метод позволяет оценить биосовместимость нанобиогибридов?

- a) Цитотоксичность**
- b) Электронная микроскопия
- c) Спектроскопия
- d) Электрохимия

1.34. Какой из перечисленных объектов НЕ является нанобиогибридным?

- a) Нанокристаллы**

- b) Липосомы
- c) ДНК-оригами
- d) Нанопровода из белка

1.35. Что является источником рентгеновского излучения в рентгеновской трубке?

- a) Электронная пушка
- b) **Анодная мишень**
- c) Лазер
- d) Радиоактивный источник

1.36. Какое из следующих применений рентгеновской спектроскопии является наиболее распространенным?

- a) Анализ элементного состава материалов
- b) **Анализ структуры материалов**
- c) Анализ химического состава материалов
- d) Анализ толщины материалов

1.37. Какой метод моделирования наиболее часто используется для проектирования микро- и наносистем?

- a) **Метод конечных элементов**
- b) Метод конечных разностей
- c) Метод граничных элементов
- d) Метод молекулярной динамики

1.38. Какая из перечисленных ниже программ САПР наиболее широко используется в нанотехнологиях?

- a) **COMSOL**
- b) AutoCAD
- c) SolidWorks
- d) ANSYS

1.39. Какой тип сетки наиболее подходит для моделирования микро- и наносистем?

- a) **Структурированная сетка**
- b) Неструктурированная сетка
- c) Гибридная сетка
- d) Адаптивная сетка

1.40. Какой параметр сетки является наиболее важным для обеспечения точности моделирования?

- a) **Размер элемента**
- b) Форма элемента
- c) Ориентация элемента
- d) Количество элементов

1.41. Какая из перечисленных ниже граничных условий наиболее часто используется в моделировании микро- и наносистем?

- a) **Граничное условие Дирихле**
- b) Граничное условие Неймана
- c) Граничное условие Коши
- d) Граничное условие периодичности

1.42. Какой из перечисленных ниже методов контроля наиболее часто используется для измерения толщины нанопленки?

- a) **Эллипсометрия**
- b) Атомно-силовая микроскопия
- c) Рентгеновская дифракция
- d) Просвечивающая электронная микроскопия

1.43. Какая из перечисленных ниже характеристик является преимуществом атомно-силовой микроскопии?

- a) **Возможность визуализации топографии поверхности**
- b) Высокое разрешение
- c) Возможность измерения механических свойств
- d) Неразрушающий характер

1.44. Какой метод контроля наиболее подходит для измерения электрических свойств наноструктур?

- a) **Измерение проводимости**
- b) Измерение емкости
- c) Измерение индуктивности
- d) Измерение импеданса

1.45. Какая из перечисленных ниже характеристик является недостатком просвечивающей электронной микроскопии?

- a) **Необходимость подготовки тонких образцов**
- b) Высокое разрешение
- c) Возможность химического анализа
- d) Возможность трехмерной визуализации

1.46. Какой метод контроля наиболее подходит для измерения механических свойств наноструктур?

- a) **Наноиндентирование**
- b) Измерение твердости
- c) Измерение модуля упругости
- d) Измерение прочности на разрыв

1.47. Какая из перечисленных ниже характеристик является преимуществом рамановской спектроскопии?

- a) **Возможность идентификации химических связей**
- b) Высокая чувствительность
- c) Неразрушающий характер
- d) Возможность измерения толщины пленки

1.48. Какой метод контроля наиболее подходит для измерения магнитных свойств наноструктур?

- a) **Магнитно-силовая микроскопия**
- b) Измерение намагниченности
- c) Измерение магнитной восприимчивости
- d) Измерение коэрцитивной силы

1.49. Какая из перечисленных ниже характеристик является недостатком сканирующей зондовой микроскопии?

- a) **Низкая скорость**
- b) Высокое разрешение
- c) Возможность измерения различных свойств

d) Неразрушающий характер

1.50. Какой метод контроля наиболее подходит для измерения оптических свойств наноструктур?

- a) **Спектроскопия пропускания**
- b) Спектроскопия отражения
- c) Спектроскопия поглощения
- d) Спектроскопия люминесценции

1.51. Какая из перечисленных ниже характеристик является преимуществом рентгеновской дифракции?

- a) **Возможность измерения кристаллической структуры**
- b) Высокое разрешение
- c) Неразрушающий характер
- d) Возможность измерения толщины пленки

2) задания с коротким ответом (ответ на задание состоит из числа, слова или словосочетания, повышенный уровень сложности):

2.1. Что такое Самосборка?

Ответ: процесс конструирования наноматериалов по принципу «снизу-вверх», основанный на самоорганизованном формировании различных нанообъектов.

2.2. Дайте определение термину «Автосборка»

Ответ: процесс конструирования наноматериалов по принципу «снизу-вверх», основанный на механосинтезе и выполняемый с использованием некоторой автоматизированной системы по заданной программе.

2.3. Суть подхода «сверху-вниз» к созданию планируемых изделий.

Ответ: подход «сверху-вниз» основан на уменьшении размеров физических тел механической или ионной обработкой, вплоть до получения объектов с ультрамикроскопическими, нанометровыми параметрами.

2.4. В чем преимущества метода прямой лазерной наплавки?

Ответ: в сравнении с технологиями селективного лазерного спекания и сплавления, а также традиционными технологиями заключаются в отсутствии необходимости дополнительного изостатического прессования или термической обработки изделий, изготовленных методом наплавки, что существенно сокращает время их изготовления.

2.5. Перечислите основания для классификации лазеров?

Ответ: 1) агрегатное состояние их активной среды (газовые, твердотельные, жидкостные, полупроводниковые); 2) метод накачки (газоразрядные, газодинамические химические, инжекционные); 3) временной режим генерации (непрерывные, импульсные, импульсно–периодические); 4) частотный режим генерации (одночастотные, одно и многомодовые); 5) уровень выходной мощности (энергии) излучения; 6) эксплуатационные характеристики (КПД, уровень потребляемой мощности, массогабаритные параметры)

2.6. Тип лазера получил наибольшее применение в промышленных масштабах?

Ответ: Наибольшее применение в промышленных масштабах получили углекислотные лазеры (CO₂), а также твердотельные дисковые, волоконные,

диодные и Nd:YAG лазеры.

2.7. Что является основным фактором, влияющим на ширину газопорошковой струи после выхода из сопла?

Ответ: Основным фактором, влияющим на ширину газопорошковой струи после выхода из сопла, является ширина щели сопла. Во время движения по каналу сопла порошинки испытывают соударения со стенками канала, при которых теряют часть нормальной по отношению к стенке скорости.

2.8. Дайте определение термину «функциональные материалы»

Ответ: материалы, обладающие определённым уровнем физико-химических и механических свойств, которые в совокупности обеспечивают использование этих материалов в качестве рабочего элемента или детали в определённом устройстве, приборе или конструкции, материалы, обладающие функцией.

2.9. Перечислите методы контроля наноматериалов и диагностики их функциональных свойств

Ответ: Оптический контроль, Контроль физических свойств (измерение сопротивления, магнитных свойств), Аналитические методы, Сканирующая электронная микроскопия, Сканирующая туннельная микроскопия, Рентгеновская дифракция, Методы электронной спектроскопии.

2.10. Что такое миниатюризация?

Ответ: уменьшение размеров и массы элементов, приборов, устройств в результате усовершенствования их конструкции, технологий изготовления.

2.11. Дайте определение термину «Эксперимент»

Ответ: метод исследования, при помощи которого происходит активное и целенаправленное восприятие определенного объекта в контролируемых и управляемых условиях.

2.12. Дайте определение термину «Идеализация»

Ответ: метод исследования, состоящий в мысленном конструировании представления об объекте путем исключения условий, необходимых для его реального существования. По сути, идеализация представляет собой разновидность процедуры абстрагирования, конкретизированной с учетом потребностей теоретического исследования. Результатами такого конструирования являются идеализированные объекты.

2.13. Чему равен диапазон длин волн рентгеновского излучения?

Ответ: $10^{-2} - 10^2$ ангстрем или $10^{-3} - 10$ нм

2.14. Сформулируйте условие Вульфа-Брегга.

Ответ: $n\lambda = 2d\sin\theta$, где n – целое число, описывающее порядок дифракционного отражения, λ – длина волны, d – межплоскостное расстояние между отражающими плоскостями, θ – угол, который составляет падающий или дифрагированный луч с отражающей плоскостью.

2.15. В чем состоит особенность применения методов исследования для наноматериалов?

Ответ: однако у наноматериалов существует особая специфика, которая заключается в предъявлении повышенных требований к разрешающей способности

методов, а именно возможность исследовать участки поверхности образцов с размерами менее 100-200 нм

2.16. Куда отправляется пучок электронов после попадания в стигматор в случае электронной микроскопии?

Ответ: на образец

2.17. В общем случае зоны, образованные отдельными уровнями, могут перекрываться, образуя...

Ответ: гибридную зону.

2.18. Какой спектроскопический метод используется для определения химического состава нанобиогибридных материалов?

Ответ: Инфракрасная спектроскопия

2.19. Примесные полупроводники, это полупроводники проводимость которых обусловлена...

Ответ: электронами атомов примеси

2.20. При низких температурах энергия тепловых колебаний решетки значительно меньше ширины ...

Ответ: запрещенной зоны

2.21. Неупругим типом рассеяния электромагнитного излучения с изменением длины волны называется

Ответ: Комптоновским

2.22. Упругим типом рассеяния электромагнитного излучения условием которого является малость рассеивателей называется

Ответ: Релеевское (или Релеевским)

2.23. Упругим типом рассеяния электромагнитного излучения, теория которая в том числе может быть применима к видимому спектру излучению, называется

Ответ: Томпсоновским (или Томпсона)

2.24. Что измеряется при рентгеноструктурном анализе?

Ответ: Углы дифракции.

2.25. Как называется инструмент, который используется в рентгеноструктурном анализе?

Ответ: Рентгеновский дифрактометр

2.26. Какой тип магнитной анизотропии характерен для тонких пленок?

Ответ: Формационная анизотропия

2.27. Среди множества особенностей синхротронного излучения, для изучения быстропротекающих процессов используют ее структурированность во

Ответ: времени

2.28. Эммитансом называется

Ответ: расходимость пучка электронов (или расходимость пучка)

2.29. Среди вставных магнитных устройств для синхротронов принято выделять ...

Ответ: ондуляторы, вигглеры, шифтеры

2.30. В синхротронах первого поколения, синхротронное излучение являлось

Ответ: паразитным.

3) открытые задания (ситуационные задачи, средний уровень сложности):

3.1. Что такое электронный газ?

3.2. Что такое магнитная постоянная наночастицы?

3.3. Какие факторы влияют на магнитную силу нанонити (нанопроволоки)?

3.4. Чем отличается ферромагнетизм от антиферромагнетизма?

Ответ: Направлением магнитных моментов соседних атомов

3.5. Что такое синхротронное излучение

Ответ: магнитотормозное электромагнитное излучение, испускаемое релятивистскими заряженными частицами при изменении траектории движения

3.6. Перечислите от каких факторов зависит яркость и контрастность изображения, получаемого методом РЭМ

Ответ: «формы» пучка электронов, падающих на образец и характера взаимодействия электронов с образцом; типа используемого детектора и физических процессов, происходящих в нем; локального состава в области сканирования и топографии поверхности образца в исследуемой области.

3.7. Что такое конденсорная линза в РЭМ

Ответ: устройство необходимое для фокусировки электронного пучка, оно состоит из электромагнитов с сердечниками специальной формы, которые создают на пути электронного пучка неоднородное магнитное поле. При этом силы Лоренца, действующие на летящие электроны, смещают их к геометрической оси пучка.

3.8. Что такое Стигматор

Ответ: это устройство, являющееся частью электронного микроскопа, которое содержит несколько электромагнитов с сердечниками специальной формы. Неоднородное магнитное поле стигматора имеет такую конфигурацию, что соответствующие силы Лоренца превращают овальное сечение пучка в круговое.

3.9. Что называется Коэффициентом увеличения?

Ответ: отношение длины какого-либо отрезка на фотографии (на изображении) к истинной длине этого же отрезка на образце.

3.10. Какие факторы влияют на проявление поверхностных явлений в наночастицах?

Ответ: На проявление поверхностного эффекта в наночастице влияют её размер, форма и окружающая среда, например, температура.

Критерии и шкалы оценивания:

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1 балл – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ, в том числе частично.

2) задания с коротким ответом (ответ на задание состоит из числа, слова или словосочетания, повышенный уровень сложности):

- 2 балла – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ, в том числе частично.

3) открытые задания (ситуационные задачи, средний уровень сложности):

- 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) характер принятого решения);
- 2 балла – задание выполнено с незначительными ошибками, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование характера принятого решения, или задание выполнено не полностью, но получены промежуточные результаты, отражающие правильность хода выполнения задания, или, в случае если задание состоит из выполнения нескольких подзаданий, 50% которых выполнено верно;
- 0 баллов – задание не выполнено, или ответ содержательно не соотнесен с заданием, или выполнено неверно (ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки, значительно влияющие на дальнейшее его изучение).

Тестирование предусматривает выполнение 10 заданий закрытого типа (максимальное количество баллов - 10) и 8 заданий открытого типа (5 с коротким ответом и 2 ситуационных задачи) (максимальное количество баллов - 20). Если студент набрал менее 15 баллов, то ставится оценка – «не-удовлетворительно», менее 18 баллов - «удовлетворительно», менее 25 – «хорошо». Если в результате тестирования студент набирает более 25 баллов, то ставится отметка «отлично»

Перечень тем практических занятий

1. Уравнение Шрёдингера в задаче многих тел. Адиабатическое приближение.
2. Адиабатическое приближение. Метод Борна-Оппенгеймера.
3. Классификация молекулярных термов.
4. Самосогласованное поле, обменное взаимодействие.
5. Метод Хартри-Фока для молекулы водорода.
6. Многоконфигурационный метод Хартри-Фока.
7. Электронные корреляции в молекуле водорода.
8. Метод Томаса-Ферми.
9. Метод функционала плотности.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования. Промежуточная аттестация в форме экзамена по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств – КИМ.

Комплект вопросов к КИМ.

1. Уравнение Шрёдингера для кулоновской задачи многих тел.
2. Двухатомная молекула.
3. Приближение Борна-Оппенгеймера.
4. Поверхности потенциальной энергии.
5. Метод молекулярных орбиталей.

6. Самосогласованное поле.
7. Метод Хартри-Фока. Детерминанты Слэтера.
8. Учёт корреляций. Многоконфигурационный метод Хартри-Фока.
9. Методы расчёта возбуждённых электронных состояний.
10. Полуэмпирические методы расчёта электронной структуры.
11. Метод псевдопотенциала.
12. Модель Томаса-Ферми-Дирака.
13. Уравнения Кона-Шэма.
14. Аппроксимации оператора обменных корреляций.
15. Гибридные функционалы.
16. Учёт спина в теории функционала плотности.

Комплект КИМ

Контрольно-измерительный материал № 1

1. Уравнение Шрёдингера для кулоновской задачи многих тел.
2. Гибридные функционалы.

Контрольно-измерительный материал № 2

1. Уравнения Кона-Шэма.
2. Метод молекулярных орбиталей.

Контрольно-измерительный материал № 3

1. Двухатомная молекула.
2. Полуэмпирические методы расчёта электронной структуры.

Контрольно-измерительный материал № 4

1. Поверхности потенциальной энергии.
2. Гибридные функционалы плотности.

Контрольно-измерительный материал № 5

1. Метод молекулярных орбиталей.
2. Аппроксимации оператора обменных корреляций.

Контрольно-измерительный материал № 6

1. Самосогласованное поле.
2. Учёт спина в методе функционала плотности.

Контрольно-измерительный материал № 7

1. Методы расчёта возбуждённых электронных состояний.
2. Метод псевдопотенциала.

Контрольно-измерительный материал № 8

1. Модель Томаса-Ферми-Дирака.
2. Поверхности потенциальной энергии.

Контрольно-измерительный материал № 9

1. Уравнения Кона-Шэма.
2. Приближение Борна-Оппенгеймера

Контрольно-измерительный материал № 10

1. Двухатомная молекула.
2. Учёт электронных корреляций в многоатомных системах.

Контрольно-измерительный материал № 11

1. Метод псевдопотенциала.
2. Уравнение Шрёдингера для многоатомных систем.

Контрольно-измерительный материал № 12

1. Метод Хартри-Фока.
2. Полуэмпирические методы расчёта электронной структуры.

Описание технологии проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине – экзамен. В приложение к диплому вносится оценка *отлично/хорошо/удовлетворительно*.

Оценка уровня освоения дисциплины «Квантовые основы моделирования в наноинженерии» осуществляется по следующим показателям:

- качество ответов при опросе на занятиях;
- полнота ответов на вопросы контрольно-измерительного материала;
- полнота ответов на дополнительные вопросы.

Критерии оценки освоения дисциплины «Квантовые основы моделирования в наноинженерии»:

– оценка *отлично* выставляется при полном соответствии работы студента всем вышеуказанным показателям. Соответствует высокому (углубленному) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы полностью, проявляются и используются систематически, в полном объеме. Данный уровень превосходит, по крайней мере, по одному из перечисленных выше показателей повышенный (продвинутый) уровень;

– оценка *хорошо* выставляется в случае, если работа студента при освоении дисциплины не соответствует одному из перечисленных показателей. Соответствует повышенному (продвинутому) уровню сформированности компетенций: компетенции в целом сформированы, но проявляются и используются фрагментарно, не в полном объеме. Данный уровень превосходит, по крайней мере, по одному из перечисленных выше показателей пороговый (базовый) уровень;

– оценка *удовлетворительно* выставляется в случае, если работа студента при освоении дисциплины не соответствует любым двум из перечисленных показателей. Соответствует пороговому (базовому) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы в общих чертах, проявляются и используются ситуативно, частично. Данный уровень обязателен для всех осваивающих основную образовательную программу;

– оценка *неудовлетворительно* выставляется в случае несоответствия работы студента всем показателям, его неорганизованности, безответственности и низкого качества работы при работе на практических занятиях, предусмотренных программой дисциплины.

Факт невыполнения требований, предъявляемых к студенту при освоении дисциплины «Квантовые основы моделирования в нанотехнологиях» и отраженных в вышеперечисленных критериях, фиксируется в ведомости оценкой *неудовлетворительно*.

Если обучающийся не осваивает дисциплину в установленном программой объеме и в сроки, определенные графиком учебного процесса, он не допускается к промежуточной аттестации по данному виду учебной работы.

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний.

При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.