

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 13.09.2023 17:26:24
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
«_____» _____ 2021 г.

Рабочая программа дисциплины
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
НА ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОФАЗНЫХ МАТРИЦ

Направление подготовки
18.04.01 Химическая технология
Программа магистратуры
Химическая технология материалов и изделий электронной техники

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Очная

Факультет **Химии веществ и материалов**

Кафедра **Химической нанотехнологии и материалов электронной техники**

Санкт-Петербург

2020

ФТД.01

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Доцент		Е.О. Дроздов

Рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование химических процессов на поверхности твердофазных матриц» обсуждена на заседании кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной техники

протокол от ____ . ____ . 2020 № ____

Заведующий кафедрой

профессор А.А. Малыгин

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов

протокол от ____ . ____ . 2020 № ____

Председатель

доцент С.Г. Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель ООП «Химическая технология»		доцент М.В. Рутто
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	05
3. Объем дисциплины	05
4. Содержание дисциплины	06
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины	06
4.3. Занятия лекционного типа	06
4.4. Занятия семинарского типа.....	07
4.4.1. Семинары, практические занятия	07
4.4.2. Лабораторные занятия	08
4.5. Самостоятельная работа.....	08
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	08
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	08
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины	09
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	10
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	11
10.1. Информационные технологии	11
10.2. Программное обеспечение.....	11
10.3. Базы данных и информационные справочные системы	11
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	11
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	12
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	13

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

Для освоения образовательной программы магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ПК-3 Способен строить и использовать модели для описания и прогнозирования характеристик материалов, осуществлять их качественный и количественный анализ, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования</p>	<p>ПК-3.3 Способность к использованию методов квантового химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов</p>	<p>Знать: - особенности химических превращений в рассматриваемых процессах синтеза материалов различного функционального назначения, основные факторы, влияющие на протекание этих процессов (ЗН-1). - современные подходы к решению задач математического моделирования технологических процессов синтеза материалов различного функционального назначения (ЗН-2). - математические методы, позволяющие анализировать процессы, протекающие при синтезе материалов (ЗН-3).</p> <p>Уметь: - применять современные прикладные программные пакеты для моделирования различных явлений и процессов (У-1). - осуществлять количественный и качественный анализ влияния различных факторов на протекание рассматриваемых процессов (У-2). - на основании сочетания результатов математического моделирования, экспериментальных данных и/или сведений из литературных источников оценивать адекватность предлагаемых моделей (У-3).</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к факультативным дисциплинам (ФТД.01) и изучается на 1 курсе в 1 семестре.

Изучение дисциплины базируется на знаниях и умениях, полученных в ходе обучения по программам бакалавриата по направлению подготовки 18.03.01 при изучении курсов «Физическая химия», «Общая и неорганическая химия», «Физическая химия твердого тела», «Химические основы нанотехнологий», «Информационные технологии в твердотельном материаловедении».

Полученные в процессе освоения дисциплины знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе магистранта, а также при выполнении магистерских диссертаций по тематике, связанной с разработкой и инновационным внедрением наукоемких процессов, материалов и технологий, созданием функциональных или конструкционных наноматериалов и разработкой нанотехнологических процессов.

3. Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц / академических часов)	1 / 36
Контактная работа с преподавателем:	27
занятия лекционного типа	9
занятия семинарского типа, в т.ч.	18
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	18 (8)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	—
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	9
Формы текущего контроля	-
Форма промежуточной аттестации	зачет

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1	Общие принципы моделирования материалов и процессов	2	4		2	ПК-3
2	Термодинамическое моделирование процессов синтеза материалов электронной техники	7	14		7	ПК-3
ИТОГО		9	18		9	

4.2 Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ПК-3.3	Общие принципы моделирования материалов и процессов Термодинамическое моделирование процессов синтеза материалов электронной техники

4.3. Занятия лекционного типа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Общие принципы моделирования материалов и процессов Феноменологические модели: химическая термодинамика и химическая кинетика. Термодинамические базы данных. Структурные базы данных. Программное обеспечение для моделирования химических процессов.	2	Лекция-беседа
2	Элементы химической термодинамики Энергетика химических реакций. Внутренняя энергия. Энтальпия. Теплота и работа. Тепловые эффекты. Методы расчета тепловых эффектов химических реакций. Влияние температуры на тепловой эффект. II и III законы термодинамики. Энтропия. Изменение энтропии в некоторых процессах. Применение энтропии для решения физико-химических задач. Термодинамика химического равновесия. Закон действующих масс. Влияние внешних факторов на смещение химического равновесия. Уравнение изотермы и изобары и их использование для определения количественных характеристик, указывающих на смещение равновесия.	5	Лекция-беседа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	Термодинамический подход к анализу возможности протекания различных процессов. Энергетический фактор. Энтропийный фактор. Энергия Гиббса. Расчет изменения энергии Гиббса. Критерии возможности и направления протекания самопроизвольных процессов		
	Термодинамическое моделирование процессов синтеза материалов электронной техники Основные методы получения материалов электронной техники: кремний, германий, карбиды, нитриды, фосфиды. Термодинамическое моделирование химических превращений. Расчет и анализ термодинамических потенциалов при различной температуре и давлении в системе.	2	Лекция-беседа

4.4. Занятия семинарского типа

4.4.1. Семинары, практические занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в т.ч. на практическую подготовку	
1	Использование термодинамических баз данных для прогнозирования превращения веществ и материалов в равновесных гетерофазных системах Термодинамические базы данных. Оценка величин термодинамических потенциалов и их зависимости от температуры на основе данных моделирования. Численный прогноз равновесного состава и его устойчивость.	4	2	Разбор конкретных ситуаций
2	Расчетная оценка влияния условий синтеза на равновесный состав в закрытых системах Метод минимума характеристических функций (МЭХФ). Расчет влияния температуры и давления в системе на равновесный состав.	4	2	Разбор конкретных ситуаций
	Выбор оптимальных условий синтеза материалов электронной техники на основе термодинамического моделирования Моделирование различных процессов синтеза материалов электронной техники с использованием баз данных FACT и CEA. Подбор оптимальной температуры и давления в системе для обеспечения полноты протекания требуемых химических превращений.	10	4	Групповая научная дискуссия

4.4.2. Лабораторные занятия

Учебным планом не предусмотрены

4.5. Самостоятельная работа обучающихся

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Современные принципы моделирования материалов и процессов	2	зачет
2	Методы моделирования процессов синтеза материалов электронной техники	7	зачет

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

1. Беляков, А.Б. Химические основы нанотехнологии твердофазных материалов различного назначения: учебное пособие / А.Б.Беляков, Е.В.Жариков, А.А.Малыгин. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2006. - 102 с.
2. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 57 с. (ЭБ)
3. Ежовский, Ю.К. Физико-химические основы технологии материалов электронной техники: учебное пособие / Ю.К.Ежовский. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2007. – 127 с. (ЭБ)
4. Ежовский, Ю.К. Введение в технологию материалов электронной техники: учебное пособие / Ю.К.Ежовский. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2012. – 108 с. (ЭБ)
5. Малыгин, А.А. Свойства и применение функциональных наноматериалов: текст лекций / А.А.Малыгин, А.А.Малков. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2013. - 71 с. (ЭБ)

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («зачтено») освоения предусмотренных элементов компетенций. Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине – в конце 1 семестра в виде зачета в устной форме. К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и включает 2 вопроса из различных тем пройденного материала. Время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Результаты зачета включаются в приложение к диплому.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

Примеры вопросов, предлагаемых на зачете:

1. Компоненты термодинамической модели.
2. Оценка направленности химической реакции. Самопроизвольно протекающие процессы.
3. Основные задачи, решаемые в химической технологии при выборе технологического режима на основании законов химической термодинамики.
4. Основные параметры термодинамических систем.
5. Способы смещения равновесия термодинамической системы, принцип Ле-Шателье.

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Беляков, А.Б. Химические основы нанотехнологии твердофазных материалов различного назначения: учебное пособие / А.Б.Беляков, Е.В.Жариков, А.А.Мальгин; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии материалов и изделий электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2006. - 102 с.
2. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 57 с.
3. Ежовский, Ю.К. Физико-химические основы технологии материалов электронной техники: учебное пособие / Ю.К.Ежовский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии материалов и изделий электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2007. – 127 с.
4. Ежовский, Ю.К. Введение в технологию материалов электронной техники: учебное пособие / Ю.К. Ежовский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2012. – 108 с.
5. Мальгин, А.А. Свойства и применение функциональных наноматериалов: текст лекций / А.А.Мальгин, А.А.Малков; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2013. - 71 с.
6. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций: учебное пособие для вузов / А.Г.Морачевский, Е.Г.Фирсова. – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар: Лань, 2015. - 112 с.- ISBN978-5-8114-1858-9

б) электронные издания:

1. Бажин, Н.М. Термодинамика для химиков: учебник / Н.М.Бажин, В.Н.Пармон. - Санкт-Петербург; Москва; Краснодар: Лань, 2019. - 612 с. - ISBN978-5-8114-3917-1 // Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: по подписке.
2. Гамбург, Ю.Д. Химическая термодинамика: учебное пособие / Ю.Д.Гамбург. - Москва: Лаборатория знаний, 2020. - 240 с. – ISBN 978-5-00101-920-6 // Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: по подписке.
3. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 57 с. // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.
4. Ежовский, Ю.К. Физико-химические основы технологии материалов электронной техники: учебное пособие / Ю.К.Ежовский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2007. – 127 с.

- Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии материалов и изделий электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2007. – 127 с. // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.
- Ежовский, Ю.К. Введение в технологию материалов электронной техники: учебное пособие / Ю.К. Ежовский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2012. – 108 с. // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.
 - Малыгин, А.А. Свойства и применение функциональных наноматериалов: текст лекций / А.А.Малыгин, А.А.Малков; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2013. - 71 с. / СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.
 - Морачевский, А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций: учебное пособие для вузов / А.Г.Морачевский, Е.Г.Фирсова. – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар: Лань, 2015. - 112 с. – ISBN 978-5-8114-1858-9 // Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: по подписке.

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины

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

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

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

- СТО СПбГТИ(ТУ) 039-2013. Магистратура. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2013.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2013.- 25 с.
- СТП СПбГТИ 040-02. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.07.2002.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2002.- 7 с.
- СТО СПбГТИ(ТУ) 018-2014. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2014.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2014.- 16 с.
- СТП СПбГТИ 048-2009. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2010.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2009.- 6 с.
- СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. Порядок организации и проведения зачётов и экзаменов./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.06.2015. - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2015.- 45 с.

В ходе лекционных занятий магистранту необходимо готовить конспект лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; пометать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Провести проверку терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь.

Аудиторная часть курса должна сопровождаться интенсивной самостоятельной работой магистрантов с рекомендованными преподавателями литературными источниками и информационными ресурсами сети Интернет по всем разделам дисциплины. Планирование времени для изучения дисциплины необходимо осуществлять на весь период обучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо в рамках внеаудиторной самостоятельной работы регулярно дополнять сведениями из литературных источников, приведенных в разделе 7 настоящей программы. При этом на основе изучения рекомендованной литературы целесообразно составить конспект основных положений, терминов и определений, требующих запоминания и необходимых для освоения следующих разделов учебной дисциплины. Для расширения и углубления знаний по учебной дисциплине необходимо активно использовать информационные ресурсы сети Интернет.

Для работы на практических занятиях необходимы: проработка рабочей программы, уделив особое внимание целям и задачам структуре и содержанию дисциплины, и конспектирование источников, а также изучение конспекта лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам и просмотр рекомендуемой литературы.

Промежуточная аттестация по дисциплине – в конце 1 семестра в виде зачета в устной форме (включает 2 вопроса из различных тем пройденного материала). Результаты экзамена включаются в приложение к диплому.

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

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций, видеоматериалов, виртуальных лабораторий и баз данных;
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

Представление лекционного материала:

ОС – не ниже MS Windows XP SP3

MS PowerPoint 97 и выше

MathCAD 14, СЕА

10.3. Базы данных и информационные справочные системы

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

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Реализация программы учебной дисциплины не предполагает наличия специализированного учебного кабинета при условии соответствия учебных кабинетов санитарным нормам, а его оборудования – изложенным ниже требованиям:

1. Учебная аудитория на 10 и более мест
2. Персональный компьютер.
3. Мультимедиа-проектор (разрешение не хуже 1024×758).
4. Стационарный или переносной проекционный экран.
5. Комплект презентаций и видеофильмов по дисциплине.

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

1. Учебная аудитория на 10 и более мест
2. Персональный компьютер.
3. Мультимедиа-проектор (разрешение не хуже 1024×758).
4. Стационарный или переносной проекционный экран.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, допущенные по медицинским показаниям к обучению по направлениям подготовки 18.04.01 Химическая технология, изучают дисциплину в полном объеме. Учебный процесс осуществляется в соответствии с "Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья ФГБОУ ВПО СПбГТИ(ТУ)", утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине
"Компьютерное моделирование химических процессов на поверхности твердофазных
матриц"**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-3	Способен строить и использовать модели для описания и прогнозирования характеристик материалов, осуществлять их качественный и количественный анализ, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	промежуточный

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)	
			«не зачтено»	«зачтено»
ПК-3.3 Способность к использованию методов квантово-химического моделирования молекулярных, твердофазных и наноразмерных объектов	Знает особенности химических превращений в рассматриваемых процессах синтеза материалов различного функционального назначения, основные факторы, влияющие на протекание этих процессов (ЗН-1) Знает современные подходы к решению задач математического моделирования технологических процессов синтеза материалов различного функционального назначения (ЗН-2). Знает математические методы, позволяющие анализировать процессы, протекающие при синтезе материалов (ЗН-3). Умеет применять современные прикладные программные пакеты для моделирования различных явлений и процессов (У-1). Умеет осуществлять количественный и качественный анализ влияния различных факторов на протекание рассматриваемых процессов (У-2).	Ответы на вопросы №№ 1-3 к зачету Ответы на вопросы №№ 4-7 к зачету Ответы на вопросы №№ 8-11 к зачету Ответы на вопросы №№ 12-13 к зачету Ответы на вопросы №№ 14-17 к зачету	Не знает особенностей химических превращений в рассматриваемых процессах синтеза материалов различного функционального назначения, основные факторы, влияющие на протекание этих процессов Не знает современные подходы к решению задач математического моделирования технологических процессов синтеза материалов различного функционального назначения Не знает математические методы, позволяющие анализировать процессы, протекающие при синтезе материалов Не умеет применять современные прикладные программные пакеты для моделирования различных явлений и процессов Не умеет осуществлять количественный и качественный анализ влияния различных факторов на протекание рассматриваемых процессов	Знает особенности химических превращений в рассматриваемых процессах синтеза материалов различного функционального назначения, основные факторы, влияющие на протекание этих процессов Знает современные подходы к решению задач математического моделирования технологических процессов синтеза материалов различного функционального назначения Знает математические методы, позволяющие анализировать процессы, протекающие при синтезе материалов Умеет применять современные прикладные программные пакеты для моделирования различных явлений и процессов Умеет осуществлять количественный и качественный анализ влияния различных факторов на протекание рассматриваемых процессов

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)	
			«не зачтено»	«зачтено»
	Умеет на основании сочетания результатов математического моделирования, экспериментальных данных и/или сведений из источников оценивать адекватность предлагаемых моделей (У-3).	Ответы на вопросы №№ 18-20 к зачету	Не умеет на основании сочетания результатов математического моделирования, экспериментальных данных и/или сведений из литературных источников оценивать адекватность предлагаемых моделей	Умеет на основании сочетания результатов математического моделирования, экспериментальных данных и/или сведений из литературных источников оценивать адекватность предлагаемых моделей

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ (ТУ): промежуточная аттестация проводится в форме зачета. Критерии оценивания – «зачтено», «не зачтено» приведены в таблице 2.

Оценка «зачтено» выставляется, если ответ студента отличается последовательностью, логикой изложения, учащийся демонстрирует глубину владения представленным материалом, ответы формулируются аргументировано, обосновывается собственная позиция в проблемных ситуациях.

Оценка «не зачтено» ставится, если ответ студента не передает содержание проблемы, не демонстрирует умение выделять главное, существенное, ответ носит краткий, неглубокий, поверхностный характер.

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-3

1. Феноменологические модели: химическая термодинамика, химическая кинетика.
2. Основные факторы, влияющие на равновесие термодинамической системы.
3. Изобарно-изотермический потенциал как критерий самопроизвольности процесса.
4. Равновесное состояние термодинамической системы.
5. Качественная и количественная характеристики смещения равновесия. Степень равновесного превращения.
6. Термодинамические базы данных. Примеры.
7. Структурные базы данных. Примеры.
8. Термодинамический прогноз превращений веществ и материалов в равновесных гетерофазных системах.
9. Оценка величин термодинамических потенциалов и их зависимости от температуры
10. Экстенсивные и интенсивные термодинамические величины.
11. Термодинамическое прогнозирование превращений веществ и материалов в равновесных гетерофазных системах.
12. Методика расчета равновесного превращения через константу равновесия процесса.
13. Расчет равновесия химического превращения.
14. Оценка степени равновесного превращения.
15. Понятие о численных методах решения уравнений.
16. Принципы моделирования химико-технологических процессов.
17. Методика выбора оптимальных условий синтеза материалов электронной техники.
18. Задача расчета равновесного состава и ее математическая формулировка.
19. Моделирование равновесного состава в многокомпонентных гомогенных системах.
20. Прогноз равновесного состава в закрытых химических системах Метод экстремумов характеристических функций (МЭХФ).

К зачету допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше.

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

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

1. Положение о формах, периодичности и порядке проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в СПбГТИ(ТУ) (Утв. Приказом ректора СПбГТИ(ТУ) от 12.12.2014 № 463).

2. СТО СПбГТИ 039-2013. Магистратура. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2013.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2013.- 25 с.

3. СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. Порядок организации и проведения зачётов и экзаменов./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.06.2015. - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2015.- 45 с.