

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Моделирование электронной структуры твердых тел

**Код модуля**  
1159008(0)

**Модуль**  
Алгоритмы и методы моделирования физических систем

**Екатеринбург**

Оценочные материалы составлены автором(ами):

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия, имя, отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико-математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Т.Г. Комарова

**Авторы:**

- Мазуренко Владимир Гаврилович, Профессор, теоретической физики и прикладной математики

## 1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Моделирование электронной структуры твердых тел

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	5
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Лабораторные занятия
3.	Промежуточная аттестация	Экзамен
4.	Текущая аттестация	Отчет по лабораторным работам   1

## 2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Моделирование электронной структуры твердых тел

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
УК-3 -Способен организовать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели	Д-2 - Демонстрировать умение эффективно работать в команде З-3 - Характеризовать виды командных стратегий, факторы формирования успешной команды для эффективной деятельности П-2 - Обосновать выбор членов команды и распределения полномочий (функций) ее членов, координировать взаимодействия членов команды У-3 - Анализировать виды командных стратегий для достижения целей работы команды	Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам Экзамен

<p>ОПК-1 -Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях  П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целям подходов и методов  У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p>	<p>Лабораторные занятия  Лекции  Отчет по лабораторным работам  Экзамен</p>
<p>ОПК-5 -Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде докладов на российских и международных конференциях</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление  Д-2 - Проявлять внимательность и ответственность в подготовке материалов научных исследований к публичному доступу  З-1 - Демонстрировать понимание правил оформления различных видов и способов представления результатов: научных и научно-технических отчетов, презентаций, публикаций (докладов, статей, тезисов к конференциям, обзоров), стилей и норм научного письма на русском и английском языках</p>	<p>Лабораторные занятия  Лекции  Отчет по лабораторным работам  Экзамен</p>

	<p>П-2 - Иметь опыт подготовки выступлений и ведения профессиональных дискуссий, выступлений на семинарах и/или конференциях</p> <p>У-1 - Оценивать выполненные отчеты, презентации, научные публикации (доклады, статьи, тезисы к конференциям, обзоры) на соответствие нормам научного письма на русском и английском языках</p>	
<p>УК-1 -Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, в том числе в цифровой среде</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать аналитические способности и критическое мышление</p> <p>З-1 - Демонстрировать понимание основных методов системного подхода и критического анализа проблемных ситуаций</p> <p>З-2 - Определять этапы разработки стратегии действий, в том числе в цифровой среде, и методы решения проблемных ситуаций</p> <p>П-1 - Использовать эффективные стратегии действий для решения проблемной ситуации, в том числе в цифровой среде, с учетом оценки ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>П-2 - Использовать методы критического анализа и системного подхода в разработке стратегии действий для решения проблемных ситуаций, в том числе в цифровой среде</p> <p>У-1 - Выявлять проблемные ситуации, используя методы системного подхода и критического анализа</p> <p>У-2 - Обосновывать выбор стратегии для достижения поставленной цели, в том числе в цифровой среде, с учетом ограничений, рисков и моделируемых результатов</p>	<p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p> <p>Экзамен</p>

	У-3 - Анализировать проблемную ситуацию, выявлять и определять способы ее разрешения	
ПК-1 -Способен самостоятельно осваивать и применять современные математические методы исследования, анализа и обработки данных, компьютерные программы, средства разработки, научно-исследовательскую, измерительно-аналитическую и технологическую аппаратуру (в соответствии с избранным направлением прикладных математики и физики)	З-1 - Сделать обзор существующих методов и подходов к решению научных проблем в области проводимых исследований З-2 - Соотнести и классифицировать методы и средства математической обработки результатов расчетных и экспериментальных данных П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях с использованием соответствующих целей подходов и методов У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в области проводимых исследований	Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам Экзамен

### 3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)

#### 3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.50</b>		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>активность студента на аудиторных занятиях</i>	1,16	100
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.50</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.50</b>		

<b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – не предусмотрено</b>		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– <b>не предусмотрено</b>		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям– <b>нет</b>		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– <b>не предусмотрено</b>		
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –0.50</b>		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>отчет по лабораторным работам</i>	1,16	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям - <b>1.00</b>		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – <b>нет</b>		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – <b>0.00</b>		
<b>4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено</b>		
Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям - <b>не предусмотрено</b>		
Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям – <b>нет</b>		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – <b>не предусмотрено</b>		

### 3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– <b>не предусмотрено</b>		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – <b>не предусмотрено</b>		

## 4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-

оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

**Критерии оценивания учебных достижений обучающихся**

<b>Результаты обучения</b>	<b>Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам</b>
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

**Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням**

<b>Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)</b>				
<b>№ п/п</b>	<b>Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)</b>	<b>Шкала оценивания</b>		
		<b>Традиционная характеристика уровня</b>		<b>Качественная характеристика уровня</b>
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)



3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

## 5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

### 5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

#### 5.1.1. Лекции

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

#### 5.1.2. Лабораторные занятия

Примерный перечень тем

1. Вычисление закона дисперсии электронных состояний кристалла, построение и анализ энергетических зон.

2. Расчет электронной структуры в рамках приближения локальной электронной плотности.

3. Вычисление матрицы заселенности орбиталей.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

#### Базовый

#### 5.2.1. Отчет по лабораторным работам

Примерный перечень тем

1. Анализ электронной структуры простых соединений.

2. Вычисление свойств реальных систем современными вычислительными методами.

3. Расчет энергии кулоновского и обменного взаимодействия в рамках первопринципных расчетов.

Примерные задания

Расчёт электронной структуры в рамках приближения электронной плотности

## **Лабораторная работа №1**

### **Расчёт электронной структуры в рамках приближения электронной плотности**

Целью данной работы является получение начальных навыков расчёта электронной структуры при помощи пакета TB-LMTO.

Ход выполнения работы:

1. Получить у преподавателя тип и структуру исследуемого соединения, а также исходные данные для расчётов.
2. Провести расчёт электронной структуры в рамках приближения локальной электронной плотности
3. Построить плотность состояний и зонную структуру для каждого из расчётов

Расчёт энергии кулоновского и обменного взаимодействия в рамках первопринципных расчётов

LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля**

#### **5.3.1. Экзамен**

Список примерных вопросов

1. Приближение локальной плотности. Обменно-корреляционная энергия. Числа заполнения и одночастичные энергии.

2. Кристаллическая решетка. Прямая и обратная решетки. Ячейка Вигнера-Зейтца. Зона Бриллюэна. Обратная решетка и разложение в ряд Фурье периодических функций в кристалле.

3. Метод присоединенных плоских волн. Метод ККР. Функция Грина.

LMS-платформа – не предусмотрена

#### **5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности**

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.