


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Руководитель образовательной
программы


_____ А.В. Германенко
«29» 04 _____ 2020 г.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

для проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Моделирование кристаллов и наноструктур

в составе модуля

Методы математического моделирования

Уровень образования: Магистратура

Форма обучения: Очная

Перечень примерных вопросов для зачета

- 1 Что означает моделирование «из первых принципов»?
- 2 Какие свойства кристалла можно смоделировать?
- 3 Какие еще структуры моделируют кроме кристаллов?
- 4 При моделировании мы ограничены возможностями суперкомпьютеров. Какое максимально возможное число атомов может сдержать структура, которую реально смоделировать в настоящее время?
- 5 Какую информацию может дать моделирование при создании новых материалов?
- 6 Для чего моделируют зонную структуру и определяют ширину запрещенной щели?
- 7 Какую информацию может дать моделирование для интерпретации измеренных ИК и КР спектров?
- 8 Для чего моделируют кристаллическую структуру широкозонных диэлектриков, активированных редкоземельными ионами?
- 9 Как связаны фононы и теплоемкость? Как согласуется с экспериментом рассчитанное значение теплоемкости для ионных кристаллов – CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 ? Какой вклад в теплоемкость учитывался при расчете?
- 10 Какое различие между экспериментально определенными и рассчитанными постоянными решетки можно считать нормальным?
- 11 Какое различие между рассчитанной и определенной на эксперименте шириной запрещенной щели можно считать нормальным?
- 12 Какие приближения используются при решении уравнения Шредингера?
- 13 На чем основано приближение Борна-Оппенгеймера?
- 14 Каково характерное время расчета для системы из N частиц в методе Хартри-Фока? В DFT расчете?
- 15 Вследствие чего «появилось» обменное взаимодействие? Какова его природа?
- 16 Верно ли утверждение, что «уравнения Хартри-Фока – это одноэлектронные уравнения»?
- 17 Благодаря какому приближению многоэлектронная задача сводится к системе взаимосвязанных одноэлектронных уравнений?
- 18 Каким образом решается система одноэлектронных уравнений?
- 19 Учитывает ли метод Хартри-Фока корреляцию между электронами с сонаправленными спинами?
- 20 В чем заключается основной недостаток метода Хартри-Фока?
- 21 Количество работ, сделанных в рамках DFT, стремительно растет. В чем преимущества теории функционала плотности?
- 22 О чем говорят теоремы Хоэнберга-Кона?
- 23 Какую проблему решает метод Кона-Шэма?
- 24 Какой физический смысл имеют орбитали Кона-Шэма?
- 25 Какие вклады учитывает $V_{xc}[\rho]$ – функционал «обменно-корреляционной энергии»?
- 26 Опишите «иерархию» обменно-корреляционных функционалов?
- 27 В чем заключаются преимущества гибридных функционалов?
- 28 Объясните аббревиатуру «МО ЛКАО».
- 29 Верно ли утверждение, что пользуясь методом МО ЛКАО мы строим одноэлектронные функции?
- 30 Объясните аббревиатуру «НОМО-LUMO».
- 31 Для соединений с каким типом химической связи возможно применение метода МО ЛКАО?
- 32 На что влияет частота сетки Монкхорста-Пака при расчетах?
- 33 Что можно построить с помощью программы VESTA? Можно ли определить межионные углы с помощью этой программы?
- 34 Что можно визуализировать с помощью программы Jmol?
- 35 Для чего используется метод псевдопотенциала? Какие электронные оболочки в этом методе описываются явно, посредством базисных наборов?
- 36 О чем говорит карта зарядовой плотности?
- 37 Как рассчитать давление фазового перехода из одной структуры в другую под воздействием гидростатического сжатия?