

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
Основы моделирования нанобъектов

**Код модуля**  
1148509(1)

**Модуль**  
Основы моделирования нанобъектов

**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	Звонарев Сергей Владимирович	Кандидат физико-математических наук, доцент	доцент	Физических методов и приборов контроля качества

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Т.Г. Комарова

**Авторы:**

- **Звонарев Сергей Владимирович**, доцент, **Физических методов и приборов контроля качества**

## 1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ **Основы моделирования нанообъектов**

1.	<b>Объем дисциплины в зачетных единицах</b>	3	
2.	<b>Виды аудиторных занятий</b>	Практические/семинарские занятия	
3.	<b>Промежуточная аттестация</b>	Зачет	
4.	<b>Текущая аттестация</b>	Собеседование/устный опрос	1

## 2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ **Основы моделирования нанообъектов**

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

<b>Код и наименование компетенции</b>	<b>Планируемые результаты обучения (индикаторы)</b>	<b>Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине</b>
<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>
ОПК-2 -Способен формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа	Д-1 - Способность к самообразованию, к самостоятельному освоению новых методов математического анализа и моделирования З-1 - Привести примеры использования методов моделирования и математического анализа в решении задач, относящихся к профессиональной деятельности З-2 - Перечислить и дать краткую характеристику освоенным за время обучения пакетам прикладных программ, используемых для моделирования при решении задач в области	Зачет Практические/семинарские занятия Собеседование/устный опрос

	<p>профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Решать поставленные задачи, относящиеся к области профессиональной деятельности, используя освоенные за время обучения пакеты прикладных программ для моделирования и математического анализа</p> <p>У-1 - Обоснованно выбрать возможные методы моделирования и математического анализа для предложенных задач профессиональной деятельности</p> <p>У-2 - Выбирать пакеты прикладных программ для использования их в моделировании при решении поставленных задач в области профессиональной деятельности</p>	
--	---	--

### 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 – не предусмотрено</b>		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – <b>не предусмотрено</b>		
Промежуточная аттестация по лекциям – <b>нет</b>		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – <b>не предусмотрено</b>		
<b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 1</b>		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах

<i>Собеседование (устный опрос)</i>		3,16	100
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– 0.4</b>			
<b>Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям–зачет</b>			
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– 0.6</b>			
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –не предусмотрено</b>			
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах	
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -не предусмотрено</b>			
<b>Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет</b>			
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено</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	
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено</b>			
<b>Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет</b>			
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – 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
<b>Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено</b>		
<b>Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – 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. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Моделирование структуры и свойств 1-компонентных наночастиц
2. Моделирование структуры и свойств 2-компонентных наночастиц
3. Моделирование самоорганизации наночастиц
4. Моделирование процесса спекания монослойных и многослойных структур
5. Моделирование микроструктуры методом плотной упаковки сфер
6. Моделирование фрактальных агрегатов
7. Моделирование диффузии идеального газа через монослойную мембрану
8. Моделирование диффузии идеального газа через многослойную мембрану
9. Моделирование диффузии по фрактальному агрегату

Примерные задания

Порядок выполнения работы "Моделирование структуры и свойств 1-компонентных наночастиц"

1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.
2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль.
3. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Моделирование и исследование свойств наночастиц» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Моделирование 1-компонентных наночастиц».
4. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 1 и 2. Размер частицы задать равным 500 нм, число трансляционных уровней 2. Остальные параметры нужно оставить «по умолчанию».
5. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кнопку «Запустить эксперимент».
6. Получить выходные параметры для выполненного эксперимента и показать их преподавателю.
7. Повторить эксперименты для числа трансляционных уровней 3, 5, 7 и 9.
8. Объяснить указанного параметра на выходные параметры: атомная масса компонентов наночастицы, плотность структуры наночастицы, потенциальная энергия системы, площадь поверхности наночастицы, объем наночастицы. Построить зависимости числа трансляционных уровней от указанных выше параметров.
9. Провести анализ полученных результатов. Написать отчет.

Порядок выполнения работы "Моделирование структуры и свойств 2-компонентных наночастиц"

1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.
2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль.
3. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Моделирование и исследование свойств наночастиц» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Моделирование 2-

компонентных наночастиц».

4. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 3 и 4. Размер частицы задать равным 500 нм, а число трансляционных уровней равным 1. Остальные параметры нужно оставить «по умолчанию».

5. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кнопку «Запустить эксперимент».

6. Получить выходные параметры для выполненного эксперимента и показать их преподавателю.

7. Сохранить данные для построения потенциального поля (\*.zbox) и кривую потенциала Морзе (\*.grp) в папке «Мои документы/ № своей группы/ Своя фамилия».

8. Повторить эксперименты для числа трансляционных уровней 3, 5, 7 и 9.

9. Объяснить указанного параметра на выходные параметры: атомная масса компонентов наночастицы, плотность структуры наночастицы, потенциальная энергия системы, площадь поверхности наночастицы, объем наночастицы. Построить зависимости числа трансляционных уровней от указанных выше параметров.

10. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Моделирование и исследование свойств наночастиц» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Построение потенциального поля».

11. В качестве параметров структуры и потенциала выбрать данные, полученные в п. 3 7.

12. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кнопку «Запустить эксперимент».

13. Получить изображение потенциального поля для числа трансляционных уровней равного 5 и показать его преподавателю.

14. Провести анализ полученных результатов. Написать отчет.

Порядок выполнения работы "Моделирование самоорганизации наночастиц"

1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.

2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль.

3. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Моделирование самоорганизации наночастиц» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Самосборка ансамблей микро- и наночастиц в капле растворителя».

4. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 5. Количество частиц нужно задать равным  $N = 100 \times \text{№ варианта}$ . Диаметр частиц  $D = 10 / \text{№ варианта}$  [мкм]. Остальные параметры нужно оставить «по умолчанию».

5. Значения варьируемых параметров необходимо выбирать следующим образом:

• используемая система: 1 – SiO<sub>2</sub> – вода SiO<sub>2</sub>, 2 – Полисти-рол – вода полистирол, 3 – Полистирол – вода SiO<sub>2</sub>;

• объем капли от 100 до 500 с шагом 100 пл;

• температуру от 300 до 340 К с шагом 10 К;

6. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кнопку «Запустить эксперимент».

7. Получить выходные параметры для выполненного эксперимента и показать их преподавателю.

8. Объяснить полученные зависимости высоты и радиуса капли от времени высыхания.

9. Получить радиальную функцию распределения и провести анализ рассчитанных результатов.

10. Написать отчет.

Порядок выполнения работы "Моделирование процесса спекания монослойных и многослойных структур"

1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.



2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль.
  3. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Моделирование процессов спекания» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Спекание на подложке».
  4. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 6. Количество частиц нужно задать равным  $N = 200 \times \text{№ варианта}$ . Диаметр частиц  $D = (10 / \text{№ варианта})^{1/2}$  [мкм]. Остальные параметры нужно оставить «по умолчанию».
  5. Значения варьируемых параметров необходимо выбирать следующим образом:
    - степень деформации изменять от 0.5 до 2.5 с шагом 0.5;
    - степень взаимопроникновения изменять от 0.2 до 1 с шагом 0.2;
    - скорость нагрева изменять от 10 до 310 К/с с шагом 50 К/с;
    - температуру спекания изменять от 100 до 1600 К с шагом 300 К;
    - скорость охлаждения изменять от 10 до 210 К/с с шагом 40 К/с.
  6. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кнопку «Запустить эксперимент».
  7. Получить выходные параметры для выполненного эксперимента и показать их преподавателю. Рассчитать начальные значения площади поверхности и объема всех частиц и сравнить их с полученными величинами.
  8. Провести серию экспериментов для различных значений варьируемого параметра согласно п. 5.
  9. Построить зависимости изменения площади поверхности и объема наночастиц от варьируемого параметра.
  10. Провести анализ полученных результатов. Написать отчет.
- Порядок выполнения работы "Моделирование микроструктуры методом плотной упаковки сфер"
1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.
  2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль.
  3. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Моделирование микроструктуры с помощью плотной упаковки сфер» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Плотная упаковка сфер».
  4. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 8 для первой фазы. Количество сфер нужно задать равным  $N = 500 \times \text{№ варианта}$ . Диаметр частиц  $D = 1 / \text{№ варианта}$  [мкм]. Остальные параметры нужно оставить «по умолчанию». Метод упаковки – параллельная. Количество и диаметр частиц следующих фаз определяются из соотношений  $N_i = N_{i-1}/i$  и  $D_i = i \cdot D_{i-1}$ , где  $i$  – номер фазы.
  5. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кнопку «Запустить эксперимент».
  6. Получить выходные параметры для выполненного эксперимента и показать их преподавателю.
  7. Повторить моделирования для всех возможных вариантов варьируемого параметра.
  8. Провести анализ полученных результатов и определить параметры упаковки, при которых плотность оптимальна. Объяснить полученные результаты.
  9. При выбранных оптимальных условиях упаковки провести моделирование плотной упаковки сфер, изменяя среднее квадратическое отклонение (СКО) распределения размеров от 0 до  $R$ , с шагом  $0.2R$ , где  $R$  – средний радиус сфер, равный  $D/2$ .
  10. Построить зависимость средней плотности упаковки и среднего радиуса сфер от СКО распределения размеров.
  11. Провести анализ полученных результатов. Написать отчет.
- Порядок выполнения работы "Моделирование фрактальных агрегатов"

1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.
2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль.
3. Ознакомиться с руководством пользователя (Вкладка «Методики», далее выбрать «Организация работы с учебно-методическим программным комплексом», затем открыть файл «Комплекс\_руководство пользователя.pdf»).
4. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Организация работы с учебно-методическим программным комплексом» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Фрактальный агрегат».
5. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 9.
6. Значения варьируемых параметров необходимо выбирать следующим образом:
  - количество частиц в агрегате изменять от 50 до 450 с шагом 100;
  - префактор изменять от 0.5 до 1.5 с шагом 0.2;
  - фрактальную размерность изменять от 1 до 3 с шагом 0.5;
7. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кноп-ку «Запустить эксперимент».
8. Получить изображение полученной структуры, показать ее преподавателю.
9. Провести серию экспериментов для различных значений варьируемого параметра согласно п. 6.
10. Объяснить влияние варьируемого параметра на структуру фрактального агрегата.
11. Провести анализ полученных результатов. Написать отчет.

Порядок выполнения работы "Моделирование диффузии идеального газа через монослойную мембрану"

1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.
  2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль.
  3. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Имитационное моделирование диффузионных процессов в мембранах» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Диффузия идеального газа через монослойную мембрану».
  4. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 10. Количество частиц мембраны и молекул идеального газа нужно задать равным  $Nч = 100 \times N\varnothing$  варианта,  $Nм = 2000 - (Nч)^{1/2}$ . Размер частиц мембраны  $D = 2 / (N\varnothing \text{ варианта})^{1/2}$  [мкм]. Высота экспериментальной камеры – 30 мкм. Остальные пара-метры нужно оставить «по умолчанию».
  5. Значения варьируемых параметров необходимо выбирать следующим образом:
    - высоту устья изменять от 5 до 20 с шагом 5;
    - радиус устья изменять от 10 до 50 с шагом 10;
    - угол наклона верхней/нижней частей устья изменять от 20 до 70 градусов с шагом 10 градусов;
    - температуру изменять от 300 до 700 К с шагом 100 К;
  6. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кноп-ку «Запустить эксперимент».
  7. Получить выходные параметры для выполненного эксперимента и показать их преподавателю.
  8. Провести серию экспериментов для различных значений варьируемого параметра согласно п. 5.
  9. Построить зависимости изменения относительного минимального, максимального и среднего давления над и под мембраной от варьируемого параметра. Оценить влияние варьируемого параметра на указанные зависимости.
  10. Провести анализ полученных результатов. Написать отчет.
- Порядок выполнения работы "Моделирование диффузии идеального газа через

многослойную мембрану"

1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.
2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль.
3. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Имитационное моделирование диффузионных процессов в мембранах» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Диффузия идеального газа через многослойную мембрану».
4. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 11. Количество частиц первого слоя мембраны и молекул идеального газа нужно задать равным  $N_{ч1} = 200 \times N_{\text{в}} \text{ варианта}$  и  $N_{\text{м}} = 2000 - (N_{ч1})^{1/2}$ . Размер частиц мембраны  $D_1 = 1/ N_{\text{в}} \text{ варианта}$  [мкм]. Количество и размер частиц следующих слоев мембраны определяются из соотношений  $N_{чi} = N_{чi-1}/i$  и  $D_i = i \cdot D_{i-1}$ , где  $i$  – номер слоя мембраны.
5. Количество частиц мембраны и молекул идеального газа нужно задать равным  $N_{ч} = 100 \times N_{\text{в}} \text{ варианта}$ ,  $N_{\text{м}} = 2000 - (N_{ч})^{1/2}$ . Размер частиц мембраны  $D = 2/ (N_{\text{в}} \text{ варианта})^{1/2}$  [мкм].
6. Высота экспериментальной камеры – 30 мкм. Остальные параметры нужно оставить «по умолчанию».
7. Значения варьируемых параметров необходимо выбирать следующим образом:
  - высоту устья изменять от 5 до 20 с шагом 5;
  - радиус устья изменять от 10 до 50 с шагом 10;
  - угол наклона верхней/нижней частей устья изменять от 20 до 70 градусов с шагом 10 градусов;
  - температуру изменять от 300 до 700 К с шагом 100 К;
8. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кнопку «Запустить эксперимент».
9. Получить выходные параметры для выполненного эксперимента и показать их преподавателю.
10. Провести серию экспериментов для различных значений варьируемого параметра согласно п. 6.
11. Построить зависимости изменения относительного минимального, максимального и среднего давления над и под мембраной от варьируемого параметра. Оценить влияние варьируемого параметра на указанные зависимости.
12. Провести анализ полученных результатов. Написать отчет.

Порядок выполнения работы "Моделирование диффузии по фрактальному агрегату"

1. Запустить Web-браузер, ввести URL-адрес узла – 10.18.26.31.
2. Авторизоваться в программном комплексе, введя логин и пароль, выданный преподавателем.
3. Выбрать раздел «Методики», перейти на методику «Моделирование диффузионных и адсорбционных процессов» и нажать кнопку «Запустить» в работе «Диффузия по фрактальному агрегату».
4. В соответствии с полученным вариантом ввести входные параметры согласно табл. 12. Концентрация ловушек и их радиус нуж-но задать равным  $n = 1/ N_{\text{в}} \text{ варианта}$  и  $r = N_{\text{в}} \text{ варианта}/ 50$ . Остальные параметры нужно оставить «по умолчанию».
5. Значения варьируемых параметров необходимо выбирать следующим образом:
  - размер частиц изменять от 1 до 50 нм с шагом 10 нм;
  - размер фрактальных агрегатов изменять от 100 до 1000 нм с шагом 200 нм;
  - фрактальную размерность изменять от 1 до 3 с шагом 0.5;
6. Для выполнения эксперимента необходимо нажать на кнопку «Запустить эксперимент».
7. Получить выходные параметры для выполненного эксперимента и показать их

преподавателю.

8. Провести серию экспериментов для различных значений варьируемого параметра согласно п. 5.

9. Оценить динамику заполнения ловушек.

10. Провести анализ полученных результатов. Написать отчет.

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. Собеседование/устный опрос**

Примерный перечень тем

1. Методы математического описания динамики взаимодействующих частиц

2. Модели кластерных систем

3. Математические модели транспортно-диффузионного переноса

Примерные задания

Задания по теме "Методы математического описания динамики взаимодействующих частиц"

1. Какие математические методы можно отнести к квантовомеханическим расчетам «из первых принципов»?

2. В чем суть квантово-теоретического подхода расчетов «из первых принципов»?

3. В чем сходство и различия метода самосогласованного поля и теории функционала плотности?

4. Перечислите наиболее широко используемые потенциалы взаимодействий частиц.

5. Опишите методы моделирования молекулярных систем.

6. Какие многочастичные потенциалы вам известны?

7. Какие полуэмпирические методы вы знаете?

8. В чем отличие метода молекулярной механики от квантовомеханических расчетов «из первых принципов»?

9. В чем суть метода молекулярной динамики?

10. Для каких целей может применяться моделирование методом молекулярной динамики?

11. Опишите основные этапы кинетического метода Монте-Карло.

Задания по теме "Модели кластерных систем"

1. Приведите примеры моделей кластерных систем?

2. Что такое фрактальные кластеры и какие модели их формирования вы знаете?

3. Какую информацию дают нам модели атомной подвижности?

Задания по теме "Математические модели транспортно-диффузионного переноса"

1. Какие модели транспортно-диффузионного переноса вы знаете?

2. Перечислите токи, возникающие в приповерхностном слое образца после облучения его поверхностью электронным пучком.

3. Какие процессы сопровождают транспорт носителей заряда в облученных материалах?
4. Объясните физическую модель транспорта электронов в материале.
5. Назовите особенности наноструктурного состояния, влияющие на процессы переноса заряда в материалах?  
LMS-платформа – не предусмотрена

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

#### **5.3.1. Зачет**

Список примерных вопросов

1. Понятие модели. Цели построения моделей.
2. Свойства моделей. Формы представления модели.
3. Понятие моделирование. Классификация моделирования. Материальное и идеальное моделирование.
4. Классификация моделей. Когнитивная, содержательная и формальная модели.
5. Математическая модель и математическое моделирование. Обобщенная математическая модель.
6. Нелинейность математических моделей. Степень соответствия математической модели объекту.
7. Классификация математических моделей в зависимости от: сложности объекта моделирования, оператора модели, входных и выходных параметров.
8. Классификация математических моделей в зависимости от: цели моделирования, способа исследования модели, объектов исследования.
9. Классификация математических моделей в зависимости от: принадлежности модели к иерархическому уровню описания объекта, характера отображаемых свойств, порядка расчета, использования управления процессом.
10. Имитационное моделирование. Методы и области применения.
11. Метод статистических испытаний (Монте-Карло).
12. Метод статистического моделирования.
13. Этапы построение математической модели.
14. Принципы и подходы к построению математических моделей.
15. Вычислительный эксперимент. Схема технологического цикла.
16. Вычислительный эксперимент. Его этапы, преимущества и области применения.
17. Математические модели в химии и биологии.
18. Математические модели в физике.
19. Математические модели динамики наносистем. Вычислительная нанотехнология.
20. Квантовомеханические расчеты «из первых принципов». Метод Хартри-Фока (одноэлектронное приближение).
21. Квантовомеханические расчеты «из первых принципов». Теория функционала плотности.
22. Квантовомеханические расчеты «из первых принципов». Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод валентных схем.
23. Квантовомеханические расчеты «из первых принципов». Метод молекулярных орбиталей.

24. Квантовомеханические расчеты «из первых принципов». Модель поверхности потенциальной энергии.
  25. Молекулярная механика.
  26. Молекулярная динамика.
  27. Полуэмпирические методы.
  28. Модели ограничения пространства моделирования.
  29. Структурные модели кластера. Плотная атомная упаковка и электронная оболочечная модель.
  30. Модели кластерных систем. Модель атомной подвижности, термодинамическая модель.
  31. Методы моделирования МК. Метод МК с алгоритмом Метрополиса.
  32. Кинетический метод Монте-Карло.
  33. Фрактальные кластеры. Модели формирования. Углеродные кластеры.
  34. Многомасштабное моделирование материалов и процессов.
  35. Виды многомасштабного моделирования.
  36. Моделирование в наноструктурной области. Измерения масштабирования.
  37. Методы, используемые при изменениях временного и пространственного масштабов.
- LMS-платформа – не предусмотрена

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

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения	Контрольно-оценочные мероприятия
Профессиональное воспитание	целенаправленная работа с информацией для использования в практических целях	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности Технология самостоятельной работы	ОПК-2	Д-1	Зачет Практические/семинарские занятия Собеседование/устный опрос