

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
Численные методы материаловедения

**Код модуля**  
1161523(1)

**Модуль**  
Квантовые вычисления

**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	Андреев Сергей Николаевич	без ученой степени, без ученого звания	Преподаватель	теоретической физики и прикладной математики
2	Мазуренко Владимир Владимирович	доктор физико-математических наук, доцент	Заведующий кафедрой	теоретической физики и прикладной математики

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

В.В. Топорищева

**Авторы:**

- Андреев Сергей Николаевич, Преподаватель, теоретической физики и прикладной математики
- Мазуренко Владимир Владимирович, Заведующий кафедрой, теоретической физики и прикладной математики

## 1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ **Численные методы материаловедения**

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 **Численные методы материаловедения**

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
ОПК-5 -Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	З-1 - Сравнивать возможности различных современных программных средств для сбора, передачи, обработки и накопления информации П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных У-2 - Осуществлять поиск и выбор необходимых информационных баз данных для решения профессиональных задач	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 – не предусмотрено</b>		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>активность а занятиях</i>	7,16	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – <b>0.5</b>		
Промежуточная аттестация по лекциям – <b>экзамен</b>		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – <b>0.5</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 –1</b>		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>отчет по лабораторным работам</i>	7,16	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям - <b>1</b>		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – <b>нет</b>		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – <b>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
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 – не предусмотрено**

### 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

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
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. Исследование электронной структуры в рамках приближения электронной плотности
  2. Определение спиновых, орбитальных и полных магнитных моментов.
  3. Изучение формализма функций Ванье для определения интегралов перескока
  4. Структурная оптимизация.
  5. Исследование твердых растворов при помощи метода когерентного потенциала.
- 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. Исследование электронной структуры в рамках приближения электронной плотности
2. Определение спиновых, орбитальных и полных магнитных моментов.
3. Изучение формализма функций Ванье для определения интегралов перескока
4. Структурная оптимизация.

Примерные задания

## Лабораторная работа 2.

### **Определение спиновых, орбитальных и полных магнитных моментов.**

Целью данной работы является определение спиновых, орбитальных и полных магнитных моментов атома, а также построение матрицы спин-орбитального взаимодействия в базисе кубических гармоник.

Содержание работы:

Для заданного преподавателем соединения, используя предложенные данные по его кристаллической структуре провести расчет в приближении LDA+U при помощи программного комплекса Quantum Espresso. Затем определить значения оператора полного магнитного момента  $J$ , а также операторов спина  $S$  и орбиты  $L$  и их проекций на оси  $x, y, z$  в базисе кубических гармоник. Написать компьютерную программу на выбранном студентом языке программирования для нахождения спинового, орбитального и полного магнитного момента для каждого атома выбранного соединения, через матрицу заселенности. Компоненты моментов находятся, как произведение матрицы заселенности в базисе кубических гармоник на соответствующую матрицу оператора. Зная матричные элементы  $L_x, L_y, L_z, S_x, S_y, S_z$ , написать программу для нахождения вида матрицы спин-орбитального взаимодействия.

Отчет должен содержать значения проекций на оси  $x, y, z$  полного, спинового и орбитального магнитных моментов и их длину для каждого атома. Общий вид матрицы спин-орбитального взаимодействия. Сравнение определенных значений моментов с теоретическими. Код написанных студентом программ. Общие выводы.

Пример задания

LMS-платформа – не предусмотрена



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

#### 5.3.1. Экзамен

Список примерных вопросов

1. 1. Метод когерентного потенциала. Достоинства и недостатки метода. Какие еще методы расчета систем содержащих примеси существуют?

2. 2. Метод виртуального кристалла. Сравнение его с методом когерентного потенциала.

3. 3. Методы решения однопримесной модели Андерсона. Квантовый метод Монте-Карло (QMS) . Метод численной ренормализационной группы. Метод численной диагонализации. Итеративная теория возмущений.

4. 4. Динамическая теория среднего поля. Главная идея метода среднего поля  
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	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности Технология самостоятельной работы	ОПК-5	У-2 П-2	Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам Экзамен