

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
Численные методы материаловедения

**Код модуля**  
1153282(0)

**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 степени, без звания	инженер	теоретической физики и прикладной математики
2	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико-математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Т.Г. Комарова

**Авторы:**

- **Андреев Сергей Николаевич**, инженер, теоретической физики и прикладной математики
- **Мазуренко Владимир Гаврилович**, Профессор, 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

<p>ПК-5 -Способен понимать и применять методологии проектирования в области физики конденсированного состояния и материаловедения</p>	<p>З-1 - Изложить характеристики научно-производственного оборудования подразделения, правила его эксплуатации  З-2 - Сформулировать порядок оформления научно-технической документации и заявок на приобретение приборов, материалов, другого научного оборудования  П-1 - Иметь практический опыт сбора и составления научно-технической и другой служебной документации  У-1 - Систематизировать информацию для решения поставленных научно-технических задач</p>	<p>Лабораторные занятия  Лекции  Отчет по лабораторным работам  Экзамен</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

<p><b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.5</b></p>		
<p>Текущая аттестация на лекциях</p>	<p>Сроки – семестр, учебная неделя</p>	<p>Максимальная оценка в баллах</p>
<p><i>активность на занятиях</i></p>	<p>7,16</p>	<p>100</p>
<p><b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.5</b></p>		
<p><b>Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен</b></p>		
<p><b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.5</b></p>		
<p><b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – не предусмотрено</b></p>		
<p>Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях</p>	<p>Сроки – семестр, учебная неделя</p>	<p>Максимальная оценка в баллах</p>
<p><b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– не предусмотрено</b></p>		
<p><b>Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям–нет</b></p>		
<p><b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– не предусмотрено</b></p>		

<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –0.5</b>		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>отчет по лабораторным работам</i>	7,16	100
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -1</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

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

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)				
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания		
		Традиционная характеристика уровня		Качественная характеристика уровня
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  
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 твердых растворов при помощи метода когерентного потенциала.
2. Структурная оптимизация.

Примерные задания

Лабораторная работа 1.

Исследование электронной структуры в рамках приближения электронной плотности

## Лабораторная работа 1.

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

Целью данной работы является получение начальных навыков расчёта электронной структуры при помощи пакета Quantum Espresso.

Содержание работы:

Для заданного преподавателем соединения, используя предложенные данные по его кристаллической структуре, провести расчет в приближении локальной электронной плотности при помощи программного комплекса Quantum Espresso.

В рамках проводимого моделирования необходимо построить кристаллическую структуру для данного соединения, используя Bilbao Crystallographic Server, визуализировать полученную кристаллическую структуру исследуемого соединения при помощи программы VESTA или XCrySDen, построить зонную структуру, полные и парциальные плотности состояний для разных атомов. Провести сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными. Дать простое микроскопическое объяснение полученной электронной структуры (металлическое или изоляторное состояние) Написать отчет о проделанной работе согласно требованиям ГОСТ, и сдать его преподавателю.

## Лабораторная работа 2.

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



## 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.

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

#### 5.3.1. Экзамен

Список примерных вопросов

1. Метод когерентного потенциала. Достоинства и недостатки метода. Какие еще методы расчета систем содержащих примеси существуют?
2. Методы решения однопримесной модели Андерсона. Квантовый метод Монте-Карло (QMS) . Метод численной ренормализационной группы. Метод численной диагонализации. Итеративная теория возмущений.
3. Метод Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока в неортогональном базисе.
4. Вариационный принцип Хоэнберга-Кона  
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 профориентационная деятельность	Технология самостоятельной работы	ОПК-5	У-2 П-2	Лабораторные занятия Отчет по лабораторным работам