

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
Моделирование кристаллов и наноструктур

**Код модуля**  
1155949(1)

**Модуль**  
Методы математического моделирования

**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	Чернышев Владимир Артурович	кандидат физико-математических наук, доцент	Доцент	физики конденсированного состояния и наноразмерных систем

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

**Авторы:**

- Чернышев Владимир Артурович, Доцент, физики конденсированного состояния и наноразмерных систем

## 1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ **Моделирование кристаллов и наноструктур**

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	4	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Практические/семинарские занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Экзамен	
4.	Текущая аттестация	Контрольная работа	4

## 2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ **Моделирование кристаллов и наноструктур**

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-2 -Способен самостоятельно ставить, формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа	Д-1 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели З-1 - Сделать обзор основных методов моделирования и математического анализа, применимых для формализации и решения задач профессиональной деятельности З-2 - Характеризовать сферы применения и возможности пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности П-1 - Решать самостоятельно сформулированные практические задачи,	Контрольная работа № 2 Контрольная работа № 3 Контрольная работа № 4 Контрольная работа №1 Лекции Практические/семинарские занятия Экзамен

	<p>относящиеся к профессиональной деятельности методами моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ</p> <p>У-1 - Самостоятельно сформулировать задачу области профессиональной деятельности, решение которой требует использования методов моделирования и математического анализа</p> <p>У-2 - Использовать методы моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности</p>	
<p>ОПК-3 -Способен планировать и проводить комплексные исследования и изыскания для решения инженерных задач относящихся к профессиональной деятельности, включая проведение измерений, планирование и постановку экспериментов, интерпретацию полученных результатов</p>	<p>Д-1 - Проявлять умение видеть детали, упорство, аналитические умения</p> <p>З-2 - Характеризовать возможности исследовательской аппаратуры и методов исследования, используя технические характеристики и области применения</p> <p>З-3 - Сделать обзор основных методов статистической обработки и анализа результатов измерений</p> <p>П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания экспериментальные комплексные научно-технические исследования и изыскания для решения инженерных задач в области профессиональной деятельности, включая обработку, интерпретацию и оформление результатов</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального</p>	<p>Контрольная работа № 2</p> <p>Контрольная работа № 3</p> <p>Контрольная работа № 4</p> <p>Контрольная работа №1</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> <p>Экзамен</p>

	<p>планирования исследования и изыскания</p> <p>У-2 - Обоснованно выбрать необходимую аппаратуру и метод исследования для решения инженерных задач, относящихся к профессиональной деятельности</p>	
<p>ПК-3 -Способен разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание взаимосвязи между структурой и свойствами материалов, определять общие принципы построения моделей исследуемых процессов, явлений и объектов исходя из фундаментальных теорий</p> <p>П-1 - Производить иллюстрированные расчеты, выполнять разработку моделей путем сравнения с физическим явлением, экспериментальными или теоретическими данными</p> <p>У-1 - Применять теоретические знания и алгоритмы для решения задач, составлять математические модели при исследовании физических процессов</p>	<p>Контрольная работа № 2</p> <p>Контрольная работа № 3</p> <p>Контрольная работа № 4</p> <p>Контрольная работа №1</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> <p>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

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.50</b>		
<b>Текущая аттестация на лекциях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>контрольная работа №1</i>	2,6	50
<i>контрольная работа №2</i>	2,8	50
<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 – 0.50</b>		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>контрольная работа №3</i>	2,10	50
<i>контрольная работа №4</i>	2,14	50
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– <b>1.00</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 –не предусмотрено</b>		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям - <b>не предусмотрено</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 – <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. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Структура входного файла для программы CRYSTAL. Параметры расчета. Точность вычисления самосогласованного поля, двухэлектронных интегралов. Сетка Монкхорста-Пака.

2. Использование псевдопотенциалов для описания внутренних оболочек ионов. Валентные базисные наборы.

3. Использование псевдопотенциалов для редкоземельных элементов.

4. Оптимизация кристаллической структуры. Метод Хартри-Фока. Метод неограниченного Хартри-Фока для моделирования кристаллов с подрешеткой d- и f-элементов.

5. Оптимизация кристаллической структуры. Теория функционала плотности (DFT). Расчеты с негибридными функционалами. Расчеты с гибридными функционалами. Иерархия DFT функционалов.

6. Расчет зонной структуры. Визуализация результатов. Расчет зонной структуры методом Хартри-Фока. Метод неограниченного Хартри-Фока для моделирования кристаллов с подрешеткой d- и f-элементов. Оценка величины запрещенной щели.

7. Расчет зонной структуры методами DFT. Гибридные и негибридные функционалы. Расчет зонной структуры для кристаллов с подрешеткой d- и f-элементов.

8. Построение карт зарядовой плотности.

9. Расчет фононного спектра в Г-точке. Расчет в рамках DFT. Использование гибридных и негибридных функционалов. Численные аспекты расчета.

10. Моделирование ИК и КРС спектров на основе расчета фононного спектра с учетом интенсивности. Визуализация результатов и сравнение их с экспериментом.

11. Расчет дисперсионных кривых фононов. Расчет плотности состояний. Использование Фурье-интерполяции.



12. Расчет упругих постоянных. Расчет упругих модулей.
13. Моделирование редкоземельных примесных центров в кристаллах. Исследование искажений кристаллической решетки вблизи примесного иона.
14. Моделирование редкоземельных примесных центров в кристаллах. Построение зонной структуры.
15. Расчет параметров кристаллического поля.
16. Расчет оптического спектра редкоземельного иона с учетом J-J смешивания.
17. Моделирование нанокластеров редкоземельных ионов.
18. Моделирование влияния гидростатического сжатия на кристаллическую структуру, фононный спектр, упругие свойства, зонную структуру соединений.

#### Примерные задания

1. Провести расчет кристаллической структуры, зонной структуры, упругих постоянных, фононного спектра кристалла  $\text{SrF}_2$ . Визуализировать колебания решетки с помощью программы Jmol.
2. Построить ИК и КР спектры для орторомбической фазы  $\text{SrF}_2$ . Расчет провести с гибридным функционалом B3LYP. Расчет интенсивности КР спектра провести для длины возбуждающего излучения  $\lambda=532$  нм и  $T=298$  К.
3. Рассчитать упругие постоянные  $\text{Er}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$ . Расчет провести с гибридным функционалом PBE0. Для эрбия использовать квазирелятивистский псевдопотенциал. Проверить, удовлетворяет ли полученный из расчета тензор упругих постоянных критерию устойчивости Борна.
4. Построить фононные дисперсионные кривые для кристалла  $\text{BaF}_2$  (кубическая фаза).
5. Оценить величину давления  $P_c$ , при котором происходит переход из кубической в орторомбическую фазу в кристалле  $\text{PbF}_2$ . Для Pb использовать псевдопотенциал.

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. Контрольная работа №1

Примерный перечень тем

1. Ab initio расчет зонной структуры и определение ширины запрещенной зоны.

Примерные задания

Провести расчет кристаллической структуры и зонной структуры кристалла  $\text{Yb}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$ . Использовать гибридный функционал PBE0. Для иттербия использовать квазирелятивистский псевдопотенциал. Оценить ширину запрещенной щели.

LMS-платформа – не предусмотрена

#### 5.2.2. Контрольная работа № 2

Примерный перечень тем

1. Ab initio расчет кристаллической структуры, фононного спектра, упругих постоянных.

Примерные задания

Провести расчет кристаллической структуры, упругих постоянных, фононного спектра кристалла  $\text{PbF}_2$  в кубической фазе. Для  $\text{Pb}$  использовать псевдопотенциал. Сравнить результаты расчета с экспериментальными данными, имеющимися в научной печати.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.3. Контрольная работа № 3

Примерный перечень тем

1. Моделирование кристаллической структуры широкозонных диэлектриков, активированных редкоземельными ионами. Расчет электронной структуры редкоземельных примесных центров и нанокластеров.

Примерные задания

Провести расчет кристаллической структуры и зонной структуры  $\text{CaF}_2$ . Рассчитать искажения кристаллической решетки вблизи примесного центра  $\text{Yb}^{3+}$  в  $\text{CaF}_2$  (примесный ион  $\text{Yb}^{3+}$  замещает катион  $\text{Ca}^{2+}$ ). Оценить радиус искажений. Рассчитать зонную структуру активированного кристалла.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.4. Контрольная работа № 4

Примерный перечень тем

1. Моделирование новых материалов

Примерные задания

Оценить величину давления  $P_c$ , при котором происходит переход из кубической в орторомбическую фазу в кристалле  $\text{PbF}_2$ . Использовать псевдопотенциал для  $\text{Pb}$ . Использовать гибридный функционал PBE0. Сравнить результаты расчета с имеющимися в научной печати данными.

LMS-платформа – не предусмотрена

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

### 5.3.1. Экзамен

Список примерных вопросов

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 содержать 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 –  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{SrF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ ? Какой вклад в теплоемкость учитывался при расчете?

10. Какое различие между экспериментально определёнными 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 «HOMO-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?
- 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.