

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, РАСЧЕТ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ

## **9 Семестр**

### **Раздел 1 Первый раздел**

#### **1.1 Контроль по итогам (КИ) - 8 Неделя**

Рубежный контроль освоения дисциплины (8 неделя) проводится в виде аттестации разделов (Контроля Итогов - КИ) на основании устного опроса. Степень полноты ответов определяет баллы за раздел. Для аттестации раздела необходимо набрать 15 баллов. Максимальный балл за раздел – 25. Критерии оценивания представлены в таблице.

<b>Оценка по 5-балльной шкале – оценка по ECTS</b>	<b>Сумма баллов за разделы</b>	<b>Требования к знаниям при сдаче коллоквиума</b>
«отлично» – <i>A</i>	23 ÷ 25	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
«хорошо» – <i>D, C, B</i>	19 ÷ 22	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
«удовлетворительно» – <i>E, D</i>	15 ÷ 18	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
«неудовлетворительно» – <i>F</i>	менее 15	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

Вопросы.

1. Что такое моделирование. Теоретические и экспериментальные исследования. Точные и приближенные методы.
  2. Компьютерное моделирование. Персональные компьютеры, высокопроизводительные компьютеры, многопроцессорные кластерные суперкомпьютеры.
  3. Классическое и квантовомеханическое представления, проблемы классического подхода.
  4. Области применимости моделей. Примеры
  5. Недостатки моделей, основанных на классической механике и на квантовой механике
  6. Особенности моделирования наноструктур. Размерные эффекты
  7. Полуэмпирические методы. Методы “из первых принципов”
  8. Теоретические и экспериментальные исследования. Точные и приближенные методы.
- Компьютерное моделирование
9. Метод молекулярной динамики
  10. Параллельные вычисления. Достоинства и недостатки параллельных вычислений.

## **Раздел 2 Второй раздел**

### **2.1 Контроль по итогам (КИ) - 16 Неделя**

Рубежный контроль освоения дисциплины (16 неделя) проводится в виде аттестации разделов (Контроля Итогов - КИ) на основании устного опроса. Степень полноты ответов определяет баллы за раздел. Для аттестации раздела необходимо набрать 15 баллов. Максимальный балл за раздел – 25. Критерии оценивания представлены в таблице.

<b>Оценка по 5-балльной шкале – оценка по ECTS</b>	<b>Сумма баллов за разделы</b>	<b>Требования к знаниям при сдаче коллоквиума</b>
«отлично» – <i>A</i>	23 ÷ 25	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
«хорошо» – <i>D, C, B</i>	19 ÷ 22	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
«удовлетворительно» – <i>E, D</i>	15 ÷ 18	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
«неудовлетворительно» – <i>F</i>	менее 15	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

## **Вопросы.**

1. Наноматериалы. Граничные и периодические квантовые условия в наноматериалах.  
Квантование электронного волнового вектора
2. Проблемы нахождения точного решения квантовомеханических задач.  
Необходимость использования приближенных методов
3. Одноэлектронное приближение, самосогласованное поле, метод сверхячейки
4. Модель складывания зоны, преимущества и недостатки метода
5. Основы метода функционала электронной плотности. Разложение волновых векторов в базисе плоских волн и молекулярных орбиталей
6. Метод псевдопотенциала.
7. Приближение сильной связи. Области применения.
8. Программный комплекс QuantumEspresso. Области применения
9. Программный комплекс Avogadro. Области применения, построение наноструктур, оптимизация геометрии
10. Компьютерные программные пакеты, основанные на теории функционала электронной плотности

## **9 Семестр**

### **Зачет**

Итоговая оценка представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках рубежного и промежуточного контроля и выставляется в соответствии с Положением о кредитно-модульной системе в соответствии со следующей шкалой:

Оценка по 5-балльной шкале	Сумма баллов за разделы и зачет	Оценка ECTS
5 – «отлично»	90-100	A
	85-89	B
4 – «хорошо»	75-84	C
	70-74	D
3 – «удовлетворительно»	65-69	
	60-64	E
2 – «неудовлетворительно»	Ниже 60	F

Расшифровка уровня знаний, соответствующего полученным баллам, дается в таблице указанной ниже

Оценка по 5-балльной шкале – оценка по ECTS	Сумма баллов за разделы	Требования к знаниям на экзамене
«отлично» – <i>A</i>	90 ÷ 100	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
«хорошо» – <i>D, C, B</i>	70 ÷ 89	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
«удовлетворительно» –	60 ÷ 69	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей,

<i>E, D</i>		допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
«неудовлетворительно» – <i>F</i>	менее 60	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

## ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ

1. Что такое моделирование. Теоретические и экспериментальные исследования. Точные и приближенные методы.
2. Компьютерное моделирование. Персональные компьютеры, высокопроизводительные компьютеры, многопроцессорные кластерные суперкомпьютеры.
3. Классическое и квантовомеханическое представления, проблемы классического подхода.
4. Области применимости моделей. Примеры
5. Недостатки моделей, основанных на классической механике и на квантовой механике
6. Особенности моделирования наноструктур. Размерные эффекты
7. Наноматериалы. Границные и периодические квантовые условия в наноматериалах. Квантование электронного волнового вектора
8. Полуэмпирические методы. Методы “из первых принципов”
9. Проблемы нахождения точного решения квантовомеханических задач. Необходимость использования приближенных методов

10. Теоретические и экспериментальные исследования. Точные и приближенные методы. Компьютерное моделирование
11. Метод молекулярной динамики
12. Одноэлектронное приближение, самосогласованное поле, метод сверхячейки
13. Модель складывания зоны, преимущества и недостатки метода
14. Основы метода функционала электронной плотности. Разложение волновых векторов в базисе плоских волн и молекулярных орбиталей
15. Метод псевдопотенциала.
16. Приближение сильной связи. Области применения.
17. Параллельные вычисления. Достиныства и недостатки параллельных вычислений.
18. Программный комплекс QuantumEspresso. Области применения
19. Программный комплекс Avogadro. Области применения, построение наноструктур, оптимизация геометрии
20. Компьютерные программные пакеты, основанные на теории функционала электронной плотности