

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Оценочные материалы по дисциплине

Компьютерное моделирование материалов

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки :
Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
С.Н. Филимонов

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-2 – Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные;

ПК-1 – Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий;

ПК-3 – Способен разрабатывать алгоритмы и программы, применять методы компьютерного моделирования для решения задач профессиональной деятельности

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 2.2 – Анализирует и интерпретирует экспериментальные и теоретические данные, полученные в ходе научного исследования, обобщает полученные результаты, формулирует научно обоснованные выводы по результатам исследования

ИПК 1.1 – Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования, обобщает научные данные в соответствии с задачами исследования;

ИПК 3.1 – Знает основы программирования, владеет навыками создания компьютерных моделей физических явлений и процессов;

ИПК 3.2 – Использует общее и специализированное программное обеспечение для теоретических расчетов и анализа экспериментальных данных.

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

- опросы по лекционному материалу;
- домашние задания (в виде практических задач)

Примеры контрольных вопросов: (ОПК 2, ПК 3, ПК 3)

1. Уравнение Кона-Шэма. Метод функционала электронной плотности.
2. Кристаллография кристаллических структур и поверхности.
3. Структурная оптимизация структурных моделей кристаллов.
4. Сетка k-точек. Обратное пространство. Зонная структура.
5. Приближения LDA и GGA. Энергия когезии кристаллов.
6. Моделирование поверхностных структур.
7. Адсорбция на поверхность.

Примеры практических задач (ОПК-2, ПК-1)

1. Определить оптимальные положения адсорбции на поверхности ориентации (100)
2. Сформулировать теоремы Кона-Хюенберга и уравнения Кона-Шэма.

Критерии оценивания:

Положительный результат текущего контроля по дисциплине (контрольная точка) предполагает посещаемость более половины практических заданий, правильные ответы на контрольные вопросы и выполнение не менее половины домашних заданий.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Промежуточная аттестация по курсу проводится в восьмом семестре в форме зачета с учетом результатов текущей аттестации.

Критерии оценивания:

Результаты зачета определяются оценками «зачтено», «не зачтено».

- оценка «зачтено» выставляется в случае успешного выполнения всех лабораторных работ по курсу.

- оценка «не зачтено» - в случае наличия одной или нескольких невыполненных лабораторных работ по курсу.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Контрольные вопросы

Вопрос 1 (ОПК 2). Что такое адсорбция?

Ответ. Процесс осаждения атомов или молекул на поверхность твердого тела.

Вопрос 2 (ОПК 2, ПК 1, ПК 3). Сформулируйте любую из двух теорем Кона-Хоемберга

Ответ. Состояние системы электронов задается функционалом электронной плотности.

15. Информация о разработчиках

Филимонов Сергей Николаевич, канд. физ.-мат. наук, декан ФФ ТГУ; Алексеев Александр Олегович, ассистент кафедры физики полупроводников ФФ ТГУ.