



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОП



(подпись)

Патрушева О.В.
(Ф.И.О.)



УТВЕРЖДАЮ

Директор департамента ядерных технологий


(подпись)

Тананаев И.Г.
(Ф.И.О.)

20 декабря 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Основы компьютерного моделирования материалов

Направление подготовки 22.03.01 Материаловедение и технологии материалов

Профиль «Материаловедение и управление свойствами материалов (совместно с МИФИ)»

Форма подготовки очная

курс 4 семестр 7
лекции 18 час.
практические занятия 36 час.
лабораторные работы 0 час.
всего часов аудиторной нагрузки 54 час.
самостоятельная работа 54 час.
в том числе на подготовку к экзамену 0 час.
зачет 7 семестр
экзамен не предусмотрен

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 22.03.01 Материаловедение и технологии материалов, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 02 июня 2020 г. №701.

Рабочая программа обсуждена на Директор департамента общей и экспериментальной физики, протокол № 1от «05» февраля 2021 г.

Директор департамента к.х.н., доцент Короченцев В.В.
Составитель: к.ф.-м.н. доцент Голик С.С.

Владивосток
2022

Оборотная сторона титульного листа РПД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « _____ » _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « _____ » _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

III. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « _____ » _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

IV. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « _____ » _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

1. Цели и задачи дисциплины:

Цель: подготовка студентов к квантово-химическому моделированию молекул и кристаллов, а также к самостоятельным компьютерным вычислениям электронного строения, пространственной структуры и физико-химических свойств различных молекулярных систем.

Задачи:

- раскрыть понятийный аппарат квантовой механики и квантовой химии;
- сформировать представления об основах теории строения атомов и молекул, о схемах решения уравнения Шредингера для атомов и молекул;
- сформировать навыки практического использования компьютерных программ для моделирования молекулярных систем.

В результате освоения дисциплины у студентов формируются следующие профессиональные компетенции:

| Наименование категории (группы) профессиональных компетенций | Код и наименование общепрофессиональной компетенции (результат освоения) | Код и наименование индикатора достижения компетенции |
|--|--|--|
| Технологический | ПК-4 Способен использовать на производстве знания о типах современных материалов, традиционных и новых технологических процессах, и операциях в области материаловедения | ПК-4.1 Участвует в разработке рекомендации по составу, способам обработки и технологиям конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности |

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине) |
|--|---|
| ПК-4.1 Участвует в разработке рекомендации по составу, способам обработки и технологиям конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Знает основные современные методы квантово-химического моделирования (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности); Имеет представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры материала |
| | Умеет определять необходимую информацию для моделирования электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов; Умеет ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов. |

| | |
|---|--|
| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине) |
| | Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов и |

II. Трудоемкость дисциплины и видов учебных занятий по дисциплине.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачётных единиц (180 академических часов).

(1 зачетная единица соответствует 36 академическим часам)

Видами учебных занятий и работы обучающегося по дисциплине являются:

| | |
|-------------|--|
| Обозначение | Виды учебных занятий и работы обучающегося |
| Лек | Лекции |
| Лаб | Лабораторные работы |
| СР | Самостоятельная работа обучающегося в период теоретического обучения |

Структура дисциплины:

Форма обучения – очная.

| № | Наименование раздела дисциплины | Семестр | Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося | | | | | Контроль | Формы промежуточной аттестации |
|--------|--|---------|---|-----|----|----|----|----------|--------------------------------|
| | | | Лек | Лаб | Пр | ОК | СР | | |
| 1 | Раздел I. Основы квантовой механики. | 7 | 8 | - | 18 | | | | зачет |
| 2 | Раздел II. Основные положения и методы квантового моделирования молекул. | 7 | 10 | - | 18 | - | 54 | | |
| Итого: | | | 36 | - | 36 | - | 54 | | |

III. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Лекционные занятия (18 час.)

Раздел 1. Основы квантовой механики (8 часов)

Тема 1. Основные постулаты квантовой механики (2 часа)

Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций. Операторы физических величин (наблюдаемых); средние значения и дисперсии наблюдаемых. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.

Математический аппарат квантовой механики. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Вырождение. Матричное представление операторов. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.

Тема 2. Соотношения неопределенностей. Уравнение Шредингера (2 часа)

Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Физический смысл соотношений неопределенностей и простейшие оценки на их основе.

Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности.

Тема 3. Примеры применения квантовой механики (2 часа)

Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе.

Тема 4. Приближенные методы решения квантово-механических задач. (2 часа)

Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца.

Раздел 2. Основные положения и методы квантового моделирования молекул. (8 часов).

Тема 1. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. (1 час)

Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Роль представлений о поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории химии. Равновесная конфигурация и конформации молекул. Малые колебания ядер вблизи положения равновесия. Колебания с большими амплитудами. Вращение системы ядер как целого.

Тема 2. Электронное волновое уравнение (1 час)

Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри - Фока (самосогласованного поля, ССП). Уравнения, определяющие орбитали. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Теорема

Купманса и фотоэлектронные спектры. Пределы применимости метода Хартри-Фока.

Тема 3. Метод молекулярных орбиталей (1 час)

Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Метод ССП МО ЛКАО.

Тема 4. Теория функционала плотности (1 час)

Представление о методах функционала электронной плотности. Сравнение различных функционалов.

Тема 6. Симметрия и свойства молекул (2 часа)

Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представления точечных групп, неприводимые представления и таблицы характеров.

Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии. σ - и π -орбитали, π -электронное приближение. Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали.

Связывающие и разрыхляющие орбитали.

Тема 7. Программное обеспечение для моделирования (2 часов).

Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы.

IV. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА И САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Практические работы (36 час.)

Занятие 1. Волновая функция и ее свойства. Нормировка волновой функции, нахождение средних значений физических величин. (обсуждение в группах) (4 часа)

Занятие 2. Операторы в квантовой механике. Операторы динамических переменных (координаты, импульса, момента импульса, энергии, квадрата момента импульса). Расчет собственных значений и собственных функций операторов на примерах. (обсуждение в группах) (6 часов)

Занятие 3. Использование волнового уравнения Шредингера (обсуждение в группах) (2 часа)

Занятие 4. Симметрия электронной волновой функции. Неприводимые представления. (обсуждение в группах) (2 часов)

Занятие 5. Геометрия молекул в декартовых и внутренних координатах. Группы симметрии. (обсуждение в группах) (2 часов)

Занятие 6. Расчет геометрии основного состояния (обсуждение в группах) (4 часа)

Занятие 7. Оптимизация геометрии (обсуждение в группах) (4 часа)

Занятие 8. Колебательные спектры (решение задач с обсуждением) (6 часа)

Занятие 9. Электронные спектры (обсуждение в группах) (6 часов)

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Основы материаловедения» включает в себя:

- план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе примерные нормы времени на выполнение по каждому заданию;
- характеристика заданий для самостоятельной работы студентов и методические рекомендации по их выполнению;
- требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;
- критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

| № | Дата/сроки выполнения | Вид самостоятельной работы | Нормы времени на выполнение | Форма контроля |
|----------|------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|---------------------------------|
| 1 | 2 неделя | Подготовка к семинарским занятиям | 8 час | Работа на практических занятиях |
| 2 | 4 неделя | Подготовка к семинарским занятиям | 8 час | Работа на практических занятиях |
| 3 | 6 неделя | Подготовка к семинарским занятиям | 8 час | Работа на практических занятиях |
| 4 | 8 неделя | Подготовка к семинарским занятиям | 8 час | Работа на практических занятиях |
| 5 | 10 неделя | Подготовка к семинарским занятиям | 8 час | Работа на практических занятиях |
| 6 | 12 неделя | Подготовка к семинарским занятиям | 8 час | Работа на практических занятиях |
| 7 | 14 неделя | Подготовка к семинарским занятиям | 8 час | Работа на практических занятиях |

| | | | | |
|--|--|--|--|----------|
| | | | | занятиях |
|--|--|--|--|----------|

Самостоятельная работа студентов включает в себя подготовку к практическим работам, подготовка к защите теории по работе, самоконтроль знаний по теме работы с помощью вопросов к каждой работе.

Рекомендации по самостоятельной работе студентов

Планирование и организация времени, отведенного на выполнение заданий самостоятельной работы.

Изучив график выполнения самостоятельных работ, следует правильно её организовать. Рекомендуется изучить структуру каждого задания, обратить внимание на график выполнения работ, отчетность по каждому заданию предоставляется в последнюю неделю согласно графику. Обратите внимание, что итоги самостоятельной работы влияют на окончательную оценку по итогам освоения учебной дисциплины.

Работа с литературой.

При выполнении ряда заданий требуется работать с литературой. Рекомендуется использовать различные возможности работы с литературой: фонды научной библиотеки ДВФУ (<http://www.dvfu.ru/library/>) и других ведущих вузов страны, а также доступных для использования научно-библиотечных систем.

В процессе выполнения самостоятельной работы, в том числе при написании эссе рекомендуется работать со следующими видами изданий:

а) Научные издания, предназначенные для научной работы и содержащие теоретические, экспериментальные сведения об исследованиях. Они могут публиковаться в форме: монографий, научных статей в журналах или в научных сборниках;

б) Учебная литература подразделяется на:

- учебные издания (учебники, учебные пособия, тексты лекций), в которых содержится наиболее полное системное изложение дисциплины или какого-то ее раздела;

- справочники, словари и энциклопедии – издания, содержащие краткие сведения научного или прикладного характера, не предназначенные для сплошного чтения. Их цель – возможность быстрого получения самых общих представлений о предмете.

Требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы

Требования к конспекту для практических занятий:

1. Должен быть в отдельной тетради, подписанный.
2. Обязательно писать план занятия с указанием темы, вопросов, списка литературы и источников.
3. Отражать проблематику всех поставленных вопросов (анализ источника, литературы).
4. Иметь по ним аргументированные выводы. Слово «аргументированные» является ключевым. Главное - доказуемость выводов.

Критерии оценки выполнения самостоятельной работы

Контроль самостоятельной работы студентов предусматривает:

- соотнесение содержания контроля с целями обучения;
- объективность контроля;
- валидность контроля (соответствие предъявляемых заданий тому, что предполагается проверить);
- дифференциацию контрольно-измерительных материалов. Формы контроля самостоятельной работы:

- Работа на практических занятиях.

Критерии оценки результатов самостоятельной работы

Критериями оценок результатов внеаудиторной самостоятельной работы студента являются:

- уровень освоения студентами учебного материала;
- сформированность общеучебных умений;
- умения студента активно использовать электронные образовательные ресурсы, находить требующуюся информацию, изучать ее и применять на практике;
- обоснованность и четкость изложения ответа;
- оформление материала в соответствии с требованиями;
- умение ориентироваться в потоке информации, выделять главное;
- умение четко сформулировать проблему, предложив ее решение, критически оценить решение и его последствия;
- умение показать, проанализировать альтернативные возможности, варианты действий;
- умение сформировать свою позицию, оценку и аргументировать ее.

Методические рекомендации по выполнению заданий для самостоятельной работы и критерии оценки.

Собеседование (устный опрос) позволяет оценить знания и кругозор студента, умение логически построить ответ, владение монологической речью

и иные коммуникативные навыки.

Опрос – важнейшее средство развития мышления и речи. Обучающая функция опроса состоит в выявлении деталей, которые по каким-то причинам оказались недостаточно осмысленными в ходе учебных занятий и при подготовке задания по самостоятельной работе.

Критерии оценки. Используется зачетная система. Во время опроса допускается не более 1-й ошибки или неточности по названию периода, его времени и длительности.

| Оценка | Требования |
|---------------------|--|
| «зачтено» | Студент владеет навыками самостоятельной работы по теме исследования, реферировать литературные источники; методами анализа теоретических и/или практических аспектов изучаемой области. Студент умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы. Работа соответствует требованиям и выполнена в установленные сроки. |
| «не зачтено» | Не раскрыта структура и теоретическая составляющая темы. Студент не умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы, не владеет навыком реферировать литературные источники.. |

Требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы

Подготовка к практическим работам оценивается в ходе устного опроса по пятибалльной системе.

Отчеты составляются студентами индивидуально и защищаются устно, оцениваются по пятибалльной системе.

По теме для самостоятельного изучения студенты опрашиваются устно на консультациях согласно графику, оцениваются по пятибалльной системе.

Критерии оценки выполнения самостоятельной работы

Оценка «Отлично»

- А) Задание выполнено полностью.
- Б) Отчет/ответ составлен грамотно.
- В) Ответы на вопросы полные и грамотные.
- Г) Материал понят, осознан и усвоен.

Оценка «Хорошо»

- А), Б) - те же , что и при оценке «Отлично».
- В) Неточности в ответах на вопросы, которые исправляются после уточняющих вопросов.
- Г) Материал понят, осознан и усвоен.

Оценка «Удовлетворительно»

А), Б - те же , что и при оценке «Отлично».

В) Неточности в ответах на вопросы, которые не всегда исправляются после уточняющих вопросов.

Г) Материал понят, осознан, но усвоен не достаточно полно.

Оценка «Неудовлетворительно»

А) Программа не выполнена полностью.

Б) Устный отчет и ответы на вопросы не полные и не грамотные.

В) Материал не понят, не осознан и не усвоен.

VI. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

| № п/п | Контролируемые модули/разделы / темы дисциплины | Коды и этапы формирования компетенций | | Оценочные средства - наименование | |
|-------|---|---|--|-----------------------------------|---|
| | | | | текущий контроль | промежуточная аттестация |
| 1 | Раздел 1. Основы квантовой механики | ПК-4.1 Участствует в разработке рекомендации по составу, способам обработки и технологиям конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Знает основные современные методы квантово-химического моделирования (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности); | Контрольная работа (ПР-2) | Экзамен, вопросы № 1 - 10 Экзамен, вопросы |
| | | | Умеет определять необходимую информацию для моделирования электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов; | Контрольная работа. (ПР-2) | |
| | | | Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов | Работа на семинарских занятиях | |
| 2 | Раздел 2. Основные положения и методы квантового моделирования молекул. | К-4.1 Участствует в разработке рекомендации по составу, способам обработки и технологиям конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Имеет представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры материала | Контрольная работа (ПР-2) | № 10 - 26 |
| | | | Умеет ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов. | Контрольная работа. (ПР-2) | |
| | | | Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов | Работа на семинарских занятиях | |

VII. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(электронные и печатные издания)

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по химич. спец. / В. И. Барановский .— М. : Академия, 2008 .— 383 с. — (Высшее профессиональное образование) .— Режим доступа: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+2+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>.
3. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учебное пособие / Майер И. ; под ред. А. Л. Чугреева ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 387 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>. — Загл. с экрана.
4. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана. Киселёв В. В. / Квантовая механика. Курс лекций / М.: МЦНМО, 2009. - 560 с.
5. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.П. Демидович. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2005. — 200 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/604>. — Загл. с экрана.
6. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] / В.И. Крашенинин ; Е.Г. Газенаур ; Л.В. Кузьмина .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012 .— 56 с. — Режим доступа: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>;
7. :<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>>.

Дополнительная литература
(электронные и печатные издания)

1. Хурсан С.Л. Методические указания для семинарских и практических занятий по курсу "Квантовая механика и квантовая химия"(раздел "Квантовая механика" : Учебное пособие / С.Л.Хурсан, Уч.-науч.комплекс "Интеграция" .— Уфа : Реактив, 2000 .— 43с. : ил. — Обяз.экз. — ISBN 5883330681(Беспл.). <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+7+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по спец. ВПО 020101.65 "Химия" / А. И. Ермаков .— М. : Юрайт, 2010 .— 555 с. — (Основы наук) .— ISBN 978-5-9916-0587-8. — ISBN 978-5-9692-0331-0. <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+rs2+14+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
3. Шпольский, Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома [Электронный ресурс] : учебник / Э.В. Шпольский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 448 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/443>. — Загл. с экрана.

**Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети
«Интернет»**

1. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
2. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
3. <http://www.physbook.ru/>
4. <https://www.rp-photonics.com/encyclopedia.html>

VIII. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционные занятия ориентированы на освещение вводных тем в каждый раздел курса и призваны ориентировать студентов в предлагаемом материале, заложить научные и методологические основы для дальнейшей

самостоятельной работы студентов.

Важной является самостоятельная работа по курсу. В ходе этой работы студенты отбирают необходимый материал по изучаемому вопросу и анализируют его. При подготовке к занятиям студенты могут пользоваться рабочей программой учебной дисциплины, а также справочной литературой и другими пособиями (учебниками, учебными пособиями, рекомендованной литературой и т.п.).

При промежуточной аттестации до экзамена должны сдать все отчетные работы и получить допуск к зачету.

Работа с литературой. Рекомендуется использовать различные возможности работы с литературой: фонды научной библиотеки ДВФУ и электронные библиотеки (<http://www.dvfu.ru/library/>), а также доступные для использования другие научно-библиотечные системы.

IX. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

| Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы | Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы | Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа |
|---|---|--|
| 690922, Приморский край, г. Владивосток, о. Русский, кампус ДВФУ, п. Аякс, 10, Корпус L, ауд. L 501, L 608 (учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа) | Мультимедийное оборудование: ЖК-панель 47", Full HD, LG M4716 ССВА - 1 шт. Парты и стулья Мультимедийное оборудование: ЖК-панель 47", Full HD, LG M4716 ССВА - 1 шт. Парты и стулья | |
| 690922, Приморский край, г. Владивосток, остров Русский, полуостров Саперный, поселок Аякс, 10, корп. А (Лит. П), Этаж 10, каб. А1017. Аудитория для самостоятельной работы | Оборудование: Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK – 15 шт. Интегрированный сенсорный дисплей Polymedia FlipBox - 1 шт. Копир-принтер-цветной сканер в e-mail с 4 лотками Xerox WorkCentre 5330 (WC5330C – 1 шт.) | |

X. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонды оценочных средств представлены в приложении



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)
ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ
(ШКОЛА)

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
Основы компьютерного моделирования материалов
Программа бакалавриата
по направлению подготовки 22.03.01 Материаловедение и технологии
материалов,
профиль «Материаловедение и управление свойствами материалов
(совместно с МИФИ)»
Форма подготовки очная

Владивосток
2022

Перечень форм оценивания, применяемых на различных этапах формирования компетенций в ходе освоения дисциплины

| № п/п | Контролируемые модули/разделы / темы дисциплины | Коды и этапы формирования компетенций | | Оценочные средства - наименование | |
|-------|---|--|--|-----------------------------------|---|
| | | | | текущий контроль | промежуточная аттестация |
| 1 | Раздел 1. Основы квантовой механики | ПК-4.1 Участствует в разработке рекомендации по составу, способам обработки и технологиям конструктивных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Знает основные современные методы квантово-химического моделирования (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности); | Контрольная работа (ПР-2) | Экзамен, вопросы № 1 - 10 Экзамен, вопросы |
| | | | Умеет определять необходимую информацию для моделирования электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов; | Контрольная работа. (ПР-2) | |
| | | | Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов | Работа на семинарских занятиях | |
| 2 | Раздел 2. Основные положения и методы квантового моделирования молекул. | К-4.1 Участствует в разработке рекомендации по составу, способам обработки и технологиям конструктивных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Имеет представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры материала | Контрольная работа (ПР-2) | № 10 - 26 |
| | | | Умеет ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов. | Контрольная работа. (ПР-2) | |
| | | | Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов | Работа на семинарских занятиях | |

Оценочные средства для текущего контроля

Для дисциплины «Основы компьютерного моделирования материалов» используются следующие оценочные средства:

Устный опрос:

1. Собеседование (УО-1)

Письменные работы:

1. Контрольные работы (ПР-2)

Устный опрос

Устный опрос позволяет оценить знания и кругозор студента, умение логически построить ответ, владение монологической речью и иные коммуникативные навыки.

Обучающая функция состоит в выявлении деталей, которые по каким-то причинам оказались недостаточно осмысленными в ходе учебных занятий и при подготовке к зачёту.

Собеседование (УО-1) – средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.

Письменные работы

Письменный ответ приучает к точности, лаконичности, связности изложения мысли. Письменная проверка используется во всех видах контроля и осуществляется как в аудиторной, так и во внеаудиторной работе.

1. Контрольная работа (ПР-2) - проверка умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу.

Комплект заданий для контрольной работы

Тема 1. Основы квантовой механики

Вариант 1.

1. Найдите собственное значение оператора $\frac{d^2}{dx^2}$, если $f(x) = \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$

2. Решите уравнение сферической гармоники для водородоподобного атома X при условии, что $l=2$, $m=1$.

3. Определите радиальную часть волновой функции водородоподобного атома для случая $n=3$, $l=2$.

Вариант 2.

1. Найдите собственное значение оператора $\frac{d^2}{dx^2}$, если $f(x) = x^3$

2. Решите уравнение сферической гармоники для водородоподобного атома X при условии, что $l=2$, $m=-1$.

3. Определите радиальную часть волновой функции водородоподобного атома для случая $n=2, l=1$.

Тема 2. Основные положения и методы квантового моделирования молекул.

Вариант 1.

Одноэлектронная волновая функция. Метод ЛКАО-МО. Симметрия молекул. Базисные наборы.

Вариант 2.

Методы приближенного решения уравнения Шрёдингера. Метод ССП. Характеры неприводимых представлений.

Критерии оценки выполнения контрольной работы

| | |
|-------------------------------|------------------------------------|
| Отметка "Отлично" | Верно выполнено более 85% заданий. |
| Отметка "Хорошо" | Верно выполнено 75-85% заданий. |
| Отметка "Удовлетворительно" | Верно выполнено 60-75% заданий. |
| Отметка "Неудовлетворительно" | Верно выполнено менее 60% заданий. |

Оценочные средства для промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация студентов по дисциплине «Основы компьютерного моделирования материалов» проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной. Форма отчётности по дисциплине – зачет (7-й, весенний семестр).

Методические указания по сдаче зачета

Во время проведения экзамена студенты могут пользоваться рабочей программой дисциплины, а также с разрешения преподавателя, проводящего зачет, справочной литературой и другими пособиями (учебниками, учебными пособиями, рекомендованной литературой и т.п.).

Время, предоставляемое студенту на подготовку к ответу на экзамене, должно составлять не более 20 минут. По истечении данного времени студент должен быть готов к ответу.

При неявке студента на зачет в ведомости делается запись «не явился».

Оценочные средства для промежуточной аттестации

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Результаты обучения | Шкала оценивания промежуточной аттестации | |
|--|---|--|---|
| | | Незачтено | зачтено |
| ПК-4.1 Участвует в разработке рекомендации по составу, способам обработки и технологиям конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Знает основные современные методы квантово-химического моделирования (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности); Имеет представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры материала | <i>Незнание базовой терминологии, основных понятий и законов</i> | <i>Знает базовую терминологию, основные понятия и/или законы теории. базовые принципы, но допущены 2-3 несущественные ошибки.</i> |
| | Умеет определять необходимую информацию для моделирования электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов; Умеет ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов. | <i>Не может применять основные методы</i> | <i>Умеет применять базовые принципы, но допущены 2-3 несущественные ошибки.</i> |
| | Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов и | <i>Не владеет необходимыми навыками</i> | <i>Владеет навыками, но допущены 2-3 несущественные ошибки.</i> |

Вопросы к зачету

1. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии.
2. Основные этапы развития квантовой теории.
3. Математический аппарат квантовой механики.
4. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Вырождение. Матричное представление операторов.
5. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.
6. Соотношения неопределенностей. Физический смысл и простейшие оценки на их основе.
7. Основные постулаты квантовой механики.
8. Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций.
9. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.
10. Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера.
11. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе.
12. Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса.
13. Задача об атоме водорода. Разделение переменных.
14. Вырождение одноэлектронных состояний как следствие симметрии центрального поля.
15. Приближенные методы решения квантово-механических задач.
16. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца.
17. Дипольный электрический и магнитный моменты системы частиц.
18. Снятие вырождения под влиянием постоянного электрического или магнитного поля (эффекты Штарка и Зеемана.)
19. Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления.
20. Уравнение Шредингера для атомов и молекул.
21. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение.
22. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение.
23. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Детерминант Слэтера.
24. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры.

25. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).

26. Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы.

Критерии оценки по дисциплине

Оценка «зачтено» ставится, если ответ обнаруживает прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; допускается две-три неточности в ответе.

Оценка «незачтено» ставится, если ответ обнаруживает незнание процессов изучаемой предметной области, отличающийся неглубоким раскрытием темы; незнанием основных вопросов теории, несформированными навыками анализа явлений, процессов; неумением давать аргументированные ответы, слабым владением монологической речью, отсутствием логичности и последовательности. Допускаются серьезные ошибки в содержании ответа; незнание современной проблематики изучаемой области.