

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 05.09.2025 12:19:33  
Уникальный программный ключ:  
04c19ed8bb98f508c677a486b9a878808322523



МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1	стр. 1	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	--------	------------------------	---------------

**Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации  
по дисциплине  
Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий**

Направление подготовки (специальность)  
**28.03.02 Наноинженерия**

Направленность (профиль)  
**Нанотехнологии в материаловедении**

Присваиваемая квалификация  
**Бакалавр**

Форма обучения  
**Очная**

Челябинск 2025 г.



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 2

Первый экземпляр \_\_\_\_\_

КОПИЯ № \_\_\_\_\_

## Содержание

1. Паспорт фонда оценочных средств
2. Перечень формируемых компетенций
  - 2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной
3. Содержание оценочных средств по дисциплине
  - 3.1. Виды оценочных средств
  - 3.2. Содержание оценочных средств
4. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации
  - 4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации
  - 4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств
  - 4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 3

Первый экземпляр \_\_\_\_\_

КОПИЯ № \_\_\_\_\_

## 1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Направление подготовки: 28.03.02 Наноинженерия

Направленность (профиль): Нанотехнологии в материаловедении

Дисциплина: Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий

Семестр: 7

Форма промежуточной аттестации: экзамен

Система оценивания: оценивание результатов осуществляется по пятибалльной системе.

## 2. ПЕРЕЧЕНЬ ФОРМИРУЕМЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ И ЭТАПЫ ИХ ФОРМИРОВАНИЯ

### 2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной

Изучение дисциплины «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий» направлено на формирование следующих компетенций:

Коды компетенции и согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Содержание компетенций согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Индикаторы достижения компетенции согласно ОПОП	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
1	2	3	4
УК-6	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Демонстрирует понимание основных принципов самообразования, профессионального и личностного развития. УК-6.2. Определяет свои личные ресурсы и возможности для достижения поставленной цели. УК-6.3. Демонстрирует умение рационального распределения временных и/или иных ресурсов	Для достижения УК-6.1: знать основные принципы самообразования, профессионального и личностного развития Для достижения УК-6.2: уметь определять свои личные ресурсы и возможности для достижения поставленной цели. Для достижения УК-6.3: владеть навыками рационального распределения временных и/или иных ресурсов для саморазвития
ОПК-4	Способен понимать принципы работы современных информационных	ОПК-4.1. Проводит литературный и патентный поиск в профессиональной области.	Для достижения ОПК-4.1: знать основы программирования и основные принципы поиска информации



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 4

Первый экземпляр \_\_\_\_\_

КОПИЯ № \_\_\_\_\_

	технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-4.2. Определяет перечень ресурсов и программного обеспечения для использования в профессиональной деятельности с учетом требований информационной безопасности	в глобальных сетях Для достижения ОПК-4.2: уметь использовать среды разработки программ для выполнения расчетов; проводить поиск информации по основным критериям, необходимым для проведения исследовательских работ Для достижения ОПК-4.2: владеть навыками работы в средах разработки программ; навыками работы с глобальными сетями.
ПК-1	Способен анализировать опыт ведущих организаций, организовывать проведение НИР по проектированию и разработке наноструктурированных композиционных материалов и внедрять результаты исследований в новые технологии	ПК-1.1: Знает основные требования к достижению технического уровня изделий из наноструктурированных композиционных материалов с учетом опыта ведущих организаций; ПК-1.2: Умеет: анализировать имеющиеся литературные данные по взаимосвязи дисперсного состава и свойств наноструктурированных материалов; обеспечивать соблюдение требований стандартов, технических условий и нормативной документации на всех стадиях проектирования изделий из наноструктурированных композиционных материалов; ПК-1.3: Владеет навыками формирования технических заданий на приобретение сырья и вспомогательных материалов для производства наноструктурированных	Для достижения ПК-1.1: знать основные методы моделирования наносистем и процессов нанотехнологии; методики молекулярно-механических расчетов; основы применения для моделирования наносистем полуэмпирических квантово-механических методов; основы первопринципных расчетов наноструктур. Для достижения ПК-1.2: уметь осуществлять выбор наиболее подходящих методов для решения конкретных задач моделирования наноструктур; выполнять расчеты геометрически оптимизированной структуры, электронных и энергетических характеристик наноструктур. Для достижения ПК-1.3: владеть навыками проведения молекулярно-механических и квантово-механических расчетов структуры и свойств молекулярных наноструктур и



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 5

Первый экземпляр \_\_\_\_\_

КОПИЯ № \_\_\_\_\_

КОМПОЗИЦИОННЫХ  
МАТЕРИАЛОВ

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ  
МАТЕРИАЛОВ.



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 6

Первый экземпляр \_\_\_\_\_

КОПИЯ № \_\_\_\_\_

### 3. СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

#### 3.1 Виды оценочных средств

№ п/п	Код компетенции/ планируемые результаты обучения	Контролируемые темы/ разделы	Наименование оценочного средства для текущего контроля	Наименование оценочного средства на промежуточной аттестации/№ задания
1	Для достижения УК-6.1: знать основные принципы самообразования, профессионального и личностного развития Для достижения УК-6.2: уметь определять свои личные ресурсы и возможности для достижения поставленной цели. Для достижения УК-6.3: владеть навыками рационального распределения временных и/или иных ресурсов для саморазвития	Раздел 1. «Обзор методов расчета наноструктур»	Отчет по лабораторной работе № 1; контрольная работа	Тест (Раздел 1, № 1-5); вопросы к экзамену № 1-11
	Для достижения ОПК-4.1: знать основы программирования и основные принципы поиска информации в глобальных сетях Для достижения ОПК-4.2: уметь использовать среды разработки программ для выполнения расчетов; проводить поиск информации по основным критериям, необходимым для проведения исследовательских работ Для достижения ОПК-4.2:	Раздел 2. «Методы молекулярной механики»	Отчет по лабораторной работе № 2; контрольная работа	Тест (Раздел 1, № 6-10); вопросы к экзамену № 12-33



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 7

Первый экземпляр \_\_\_\_\_

КОПИЯ № \_\_\_\_\_

<p>владеть навыками работы в средах разработки программ; навыками работы с глобальными сетями.</p> <p>Для достижения ПК-1.1: знать основные методы моделирования наносистем и процессов нанотехнологии; методики молекулярно-механических расчетов; основы применения для моделирования наносистем полуэмпирических квантово-механических методов; основы первопринципных расчетов наноструктур.</p> <p>Для достижения ПК-1.2: уметь осуществлять выбор наиболее подходящих методов для решения конкретных задач моделирования наноструктур; выполнять расчеты геометрически оптимизированной структуры, электронных и энергетических характеристик наноструктур.</p> <p>Для достижения ПК-1.3: владеть навыками проведения молекулярно-механических и квантово-механических расчетов структуры и свойств молекулярных наноструктур и наноструктурированных материалов.</p>	<p>Раздел 3. «Квантово-механические методы расчета»</p>	<p>Отчет по лабораторной работе № 3; контрольная работа</p>	<p>Тест (Раздел 1, № 11-15); вопросы к экзамену № 34-37</p>
	<p>Раздел 4. «Расчет структуры и свойств углеродных наноструктур»</p>	<p>Отчеты по лабораторным работам № 1-3; контрольная работа</p>	<p>Тест (Раздел 4, № 16-20); вопросы к экзамену № 38-41</p>



### 3.2 Содержание оценочных средств

#### База тестовых вопросов

№ п/п	Формулировка вопроса	Варианты ответов
<b>Раздел 1. «Обзор методов расчета наноструктур»</b>		
1	Моделирование – это ...	1. процедура, выполняемая для поддержки, опровержения или подтверждения гипотезы или теории <b>2. исследование объектов познания на их моделях</b> 3. процесс взятия полной или частной производной функции 4. выбор наилучшего варианта из возможных для достижения наибольшей эффективности какого-либо процесса
2	Молекулярно-механические методы основываются на применении ... Выберите пропущенное словосочетание.	1. законов квантовой механики 2. теории гравитации 3. законов оптики <b>4. законов классической физики</b>
3	На какие два класса можно разделить квантово-механические методы?	<b>1. полуэмпирические</b> <b>2. первопринципные</b> 3. молекулярной механики 4. итерационные
4	Геометрическая оптимизация – алгоритм нахождения такого относительного расположения атомов в модели, при котором наблюдается ... полной энергии связей. Укажите недостающее слово.	<b>1. минимум</b> 2. максимум 3. убывание 4. увеличение
5	Выберите самый быстросходящийся метод геометрической оптимизации:	1. пассивный поиск 2. покоординатный спуск 3. метод наискорейшего спуска <b>4. метод сопряженных градиентов</b>
<b>Раздел 2. «Методы молекулярной механики»</b>		
6	Какой вид имеет потенциал Ленарда-Джонса?	1. $U_{ij} = -\frac{A}{R_{ij}^6} + B \cdot \exp(-\alpha \cdot R_{ij})$ 2. $E_{ij;k} = f_c(r_{ij}) \cdot [f_R(r_{ij}) + B_{ij} f_A(r_{ij})]$ 3. $U_{ij} = \frac{A}{R_{ij}^{12}} - \frac{B}{R_{ij}^6}$



Версия документа - 1	стр. 9	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	--------	------------------------	---------------

		$4. E_{\text{bond}} = 143.88 \sum_{\text{bonds}} \frac{1}{2} K_b (r - r_0)^2 [1 + C_S (r - r_0)]$
7	Как называется электростатическая энергия, дающая основной вклад в энергию связи ионных кристаллов?	1. энергия Гиббса 2. свободная энергия 3. внутренняя энергия <b>4. энергия Маделунга</b>
8	Потенциальная энергетическая функция Терсоффа является ... потенциалом. Выберите пропущенное слово.	1. одночастичным 2. двухчастичным <b>3. трехчастичным</b> 4. четырехчастичным
9	Потенциал Бреннера является усовершенствованным потенциалом ...	1. Ленарда-Джонса <b>2. Терсоффа</b> 3. Додсона 4. AIREBO
10	какой из эмпирических потенциалов разработан только для металлов?	<b>1. Эркока</b> 2. Терсоффа 3. Бреннера 4. Ленарда-Джонса
<b>Раздел 3. «Квантово-механические методы расчета»</b>		
11	В полуэмпирических квантово-механических методах при решении уравнения Шредингера производится замена части интегралов перекрытия на ...	1. теоретические значения <b>2. эмпирические параметры</b> 3. их линейную комбинацию 4. случайные величины
12	Выберите наиболее точный полуэмпирический метод расчета органических соединений:	1. AM1 2. MNDO 3. PM3 <b>4. PM7</b>
13	Метод теории функционала плотности в значительной степени решает проблему расчета систем, включающих большое число частиц, путем сведения задачи о системе многих тел с потенциалом электрон-электронного взаимодействия к ...	<b>1. одночастичной задаче</b> 2. многочастичной задаче 3. неразрешимой задаче 4. задаче оптимизации
14	Укажите наиболее распространенное приближение метода теории функционала плотности:	1. линейная комбинация атомных орбиталей <b>2. обобщенное градиентное приближение</b> 3. нулевое дифференциальное перекрывание 4. приближение классической механики
15	В каком программном обеспечении не реализован метод теории функционала плотности?	1. Quantum-ESPRESSO 2. GAUSSIAN <b>3. Avogadro</b> 4. VASP



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 10

Первый экземпляр \_\_\_\_\_

КОПИЯ № \_\_\_\_\_

#### Раздел 4. «Расчет структуры и свойств углеродных наноструктур»

16	... – это двумерная полиморфная разновидность углерода, состоящая из 3-координированных атомов. Выберите пропущенное слово.	1. нанотрубка 2. фуллерен 3. кластер <b>4. графен</b>
17	Какие углеродные нанотрубки не существуют?	1. зигзагообразные <b>2. плоские</b> 3. хиральные 4. креслообразные
18	Квантовой точкой является ...	<b>1. нанокластер кремния</b> 2. нанотрубка 3. графеновый слой 4. кристалл GaAs
19	Какую форму имеет фуллерен C <sub>60</sub> ?	1. кубическую 2. призмобразную 3. тетраэдрическую <b>4. усеченного икосаэдра</b>
20	... – это объекты, которые состоят из связанных между собой атомов или молекул, и размер которых не превышает 100 нм. Выберите пропущенное слово.	1. кристаллы <b>2. наночастицы</b> 3. полупроводники 4. композиты

## Лабораторные работы

### Лабораторная работа № 1

#### «Расчет структуры гексагонального графена»

*Цель работы:* научиться рассчитывать структуру слоев наноструктур.

*Задача работы:* написать программу, позволяющую найти равновесную структуру графенового слоя.

*Оборудование:* компьютер, операционная система, Pascal ABC.NET, текстовый редактор LibreOffice Writer, табличный процессор LibreOffice Calc.

*Порядок выполнения работы:*

1. В программе задать плоскую элементарную ячейку графена с параметрами  $a$ ,  $b$  и  $\alpha$ , которая содержит два атома углерода с координатами  $(a/3, 2b/3)$  и  $(2a/3, b/3)$  (рисунок 1).
2. Для элементарной ячейки графена задать граничные условия в виде восьми дополнительных ячеек, прилежащих к ней.
3. При использовании энергетической функции Терзоффа вычислить параметры ( $a$ ,  $b$  и  $\alpha$ ) и тип элементарной ячейки графенового слоя, соответствующие минимальной полной энергии ( $E_{total}$ ) системы. Диапазоны изменения параметров:  $a$ ,  $b$  – от 2 до 3 Å;  $\alpha$  – от 90 до 135°.



4. Определить, при какой толщине ( $h$ ) гофрированного графена (рисунок 2) наблюдается минимум полной энергии этого слоя. Построить график зависимости энергии от толщины гофрированного слоя:  $E_{total} = f(h)$ , где  $h$  изменяется от 0 до  $0.3 \text{ \AA}$ . Гофрирование должно происходить при одновременном изменении координат половины атомов слоя по оси  $Z$ .
5. Сопоставить расчетные параметры элементарной ячейки и длину межатомной связи в графене с соответствующими экспериментальными характеристиками.
6. Сделать выводы и написать отчет.

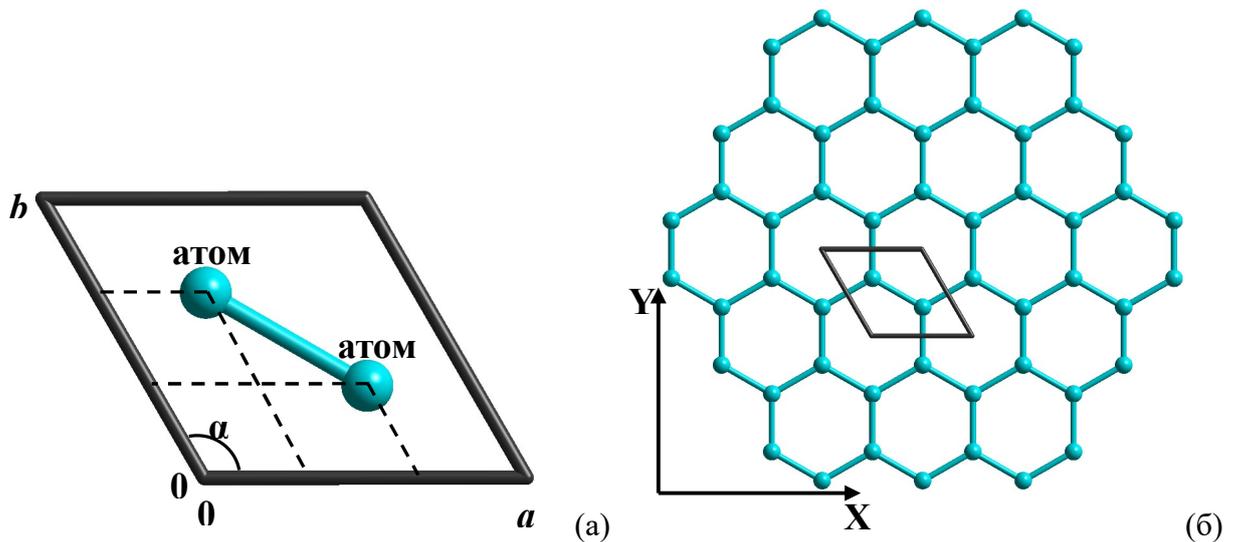


Рисунок 1. Элементарная ячейка графена (а) и ее расположение в структуре графенового слоя (б) ( $a$ ,  $b$  – длины векторов элементарных трансляций,  $\alpha$  – угол между векторами  $a$  и  $b$ ).

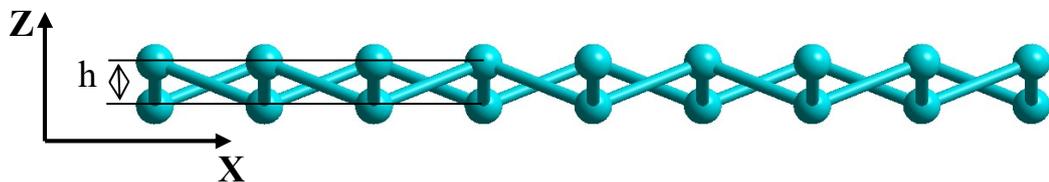


Рисунок 2. Проекция гофрированного графенового слоя на плоскость  $XZ$ .

### Лабораторная работа № 2

«Расчет трехмерной структуры кристаллов графита»

Цель работы: научиться рассчитывать структуру слоевых соединений, связанных ваддер-ваальсовыми связями.

Задача работы: создать программу, позволяющую найти равновесную упаковку графеновых слоев.



Оборудование: персональный компьютер, операционная система, Pascal ABC.NET, текстовый редактор LibreOffice Writer, табличный процессор LibreOffice Calc.

Порядок выполнения работы:

1. В программе задать начальную элементарную ячейку графита, в которую будут входить атомы только одного графенового слоя (рис. 1). Элементарная ячейка может быть:

- ромбической с координатами атомов  $(0, b/6, 0)$ ,  $(a/2, b/3, 0)$ ,  $(a/2, 2b/3, 0)$  и  $(0, 5b/6, 0)$ ;

- гексагональной с координатами атомов  $(a/3, 2b/3)$  и  $(2a/3, b/3)$ .

Длину ковалентной связи  $L_{C-C}$  в графеновом слое (рисунок 3) следует принять равной 0.142 нм. Параметры элементарной ячейки  $a$  и  $b$  могут быть выражены через длину связи  $L_{C-C}$ , тогда как параметр  $c$  равен межслоевому расстоянию  $L_{interlayer}$  (рисунок 4).

2. На основе элементарной ячейки графита построить нанокристалл графита, содержащий пять графеновых слоев (рисунок 4). Каждый графеновый слой должен содержать не менее 300 атомов.
3. Выполнить расчет энергии ван-дер-ваальсового взаимодействия слоев при изменении межслоевого расстояния  $L_{interlayer}$  и различных сдвигах  $x_a$  и  $x_b$  центрального графенового слоя по следующей формуле:

$$U_{ij} = -\frac{A}{R_{ij}^6} + B \cdot \exp(-\alpha \cdot R_{ij}),$$

где  $R_{ij}$  – расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м атомами различных графеновых слоев (размерность – [нм]),  $A = 1.49887$  ккал·моль·нм<sup>6</sup>,  $B = 175846000$  ккал·моль,  $\alpha = 35.8$  нм<sup>-1</sup>.

Значение межслоевого расстояния  $L_{interlayer}$  может изменяться от 0.25 до 0.40 нм. Координаты  $x_a$  и  $x_b$  вектора сдвига  $S = (x_a, x_b, 2L_{interlayer})$  центрального слоя соответственно изменяются от 0 до  $a$  и от 0 до  $b$  ( $a$  и  $b$  – параметры элементарной ячейки).

4. Для межслоевого расстояния  $L_{interlayer}$ , соответствующего минимальной ван-дер-ваальсовой энергии ( $U_{min}$ ), построить график зависимости энергии от координат вектора сдвига центрального слоя  $U_{v-d-W} = f(x_a, x_b)$ . Выполнить анализ полученных данных.
5. Сопоставить равновесное межслоевое расстояние и соответствующую ему упаковку графеновых слоев с экспериментальными данными.
6. Сделать выводы и написать отчет.

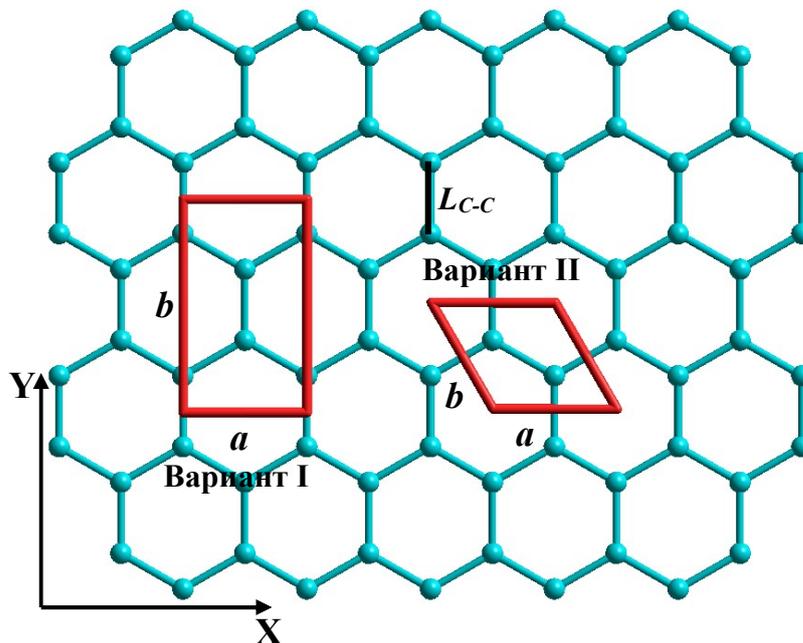


Рисунок 3. Элементарные ячейки графенового слоя.

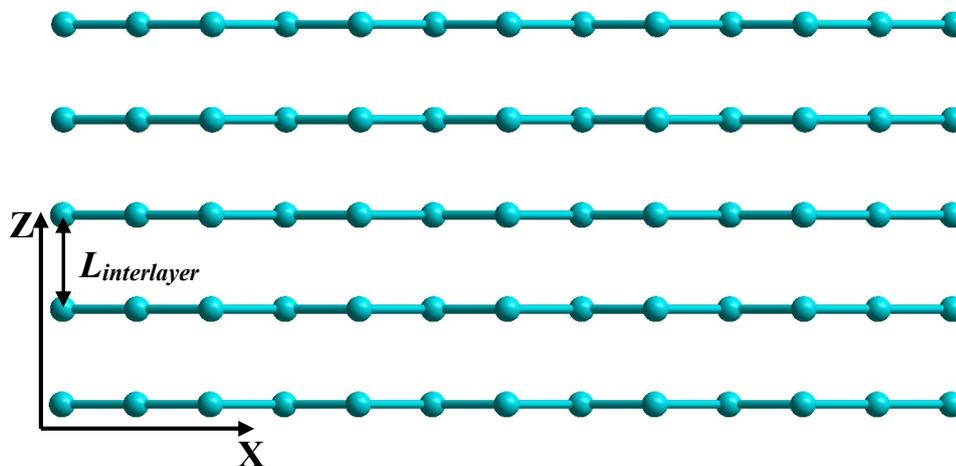


Рисунок 4. Кристалл графита с параллельной упаковкой графеновых слоев.

### Лабораторная работа № 3

«Расчет структурных и энергетических характеристик кремниевых кластеров»

Цель работы: научиться рассчитывать структуру полупроводниковых нанокластеров.

Задачи работы:

- 1) написать программу, позволяющую рассчитать структуру кремниевых кластеров сферической формы с помощью потенциала Терзоффа;
- 2) выполнить анализ взаимосвязи между радиусом и энергией сублимации кластера.



Оборудование: персональный компьютер, операционная система, Pascal ABC.NET, текстовый редактор LibreOffice Writer, табличный процессор LibreOffice Calc.

Порядок выполнения работы:

1. На первом этапе работы необходимо задать начальные координаты атомов сферического кластера кремния (радиуса  $R$ ) на основе кубической элементарной ячейки ГЦК-кремния (рисунок 5). Радиус кластера следует подобрать таким образом, чтобы атомы на его поверхности были связаны не менее чем с двумя ближайшими атомами. Параметр элементарной ячейки  $a$  принять равным  $5.429 \text{ \AA}$ . Координаты атомов кремния приведены в таблице 1.
2. С помощью графических возможностей среды программирования PascalABC.NET отобразить структуру сформированного кластера кремния.
3. При использовании энергетической функции Терзоффа для кремния выполнить геометрическую оптимизацию структуры кремниевого кластера, то есть найти такую пространственную конфигурацию атомов, которая должна соответствовать минимуму полной энергии кластера. Для геометрической оптимизации кластера необходимо использовать комбинацию методов наискорейшего спуска и дихотомии.
4. Построить график зависимости полной энергии ( $E_{total}$ ) от радиуса ( $R$ ) кремниевого кластера  $E_{total} = f(R)$ . Диапазон изменения  $R$  – от 6 до  $100 \text{ \AA}$ . Выполнить анализ полученных данных.
5. Сделать выводы и написать отчет.

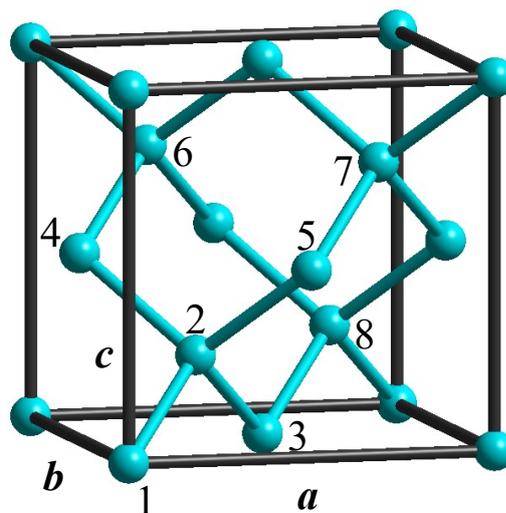


Рисунок 5. Кубическая элементарная ячейка кремния Si-I (атомы в ячейке обозначены цифрами).



Таблица 1. Относительные координаты атомов в кубической элементарной ячейке Si-I.

№ атома	$x/a$	$y/b$	$z/c$
1	0.00	0.00	0.00
2	0.25	0.25	0.25
3	0.50	0.50	0.00
4	0.00	0.50	0.50
5	0.50	0.00	0.50
6	0.25	0.75	0.75
7	0.75	0.25	0.75
8	0.75	0.75	0.25

### Пример варианта контрольной работы (Разделы 1, 2)

1. По каким критериям классифицируют методы моделирования наноструктур?
2. Как зависит время расчета структуры и свойств наноструктур от числа атомов?
3. Перечислите основные типы связей в соединениях.
4. Дать определение энергии Маделунга.

### Экзаменационные вопросы

1. Классификация методов расчета наноструктур.
2. Ограничения различных методов моделирования.
3. Трансляционная симметрия. Решетка Браве. Определение базиса. Одномерные решетки Браве.
4. Двумерные и трехмерные решетки Браве.
5. Геометрическая оптимизация. Постановка задачи. Метод пассивного поиска.
6. Метод дихотомии (деление отрезка пополам).
7. Метод золотого сечения.
8. Метод покоординатного спуска.
9. Метод наискорейшего спуска.
10. Метод сопряженных градиентов Флетчера-Ривса.
11. Метод сопряженных градиентов Полака-Рибьера.
12. Кристаллы инертных газов. Силы Ван-дер-Ваальса. Взаимное отталкивание атомов.
13. Кристаллы инертных газов. Равновесные постоянные решетки. Энергия связи.
14. Кристаллы инертных газов. Объемный модуль упругости.
15. Ионные кристаллы. Электростатическая энергия (Маделунга). Вычисление постоянной Маделунга.
16. Ионные кристаллы. Энергия взаимодействия. Равновесные постоянные решетки.
17. Ионные кристаллы. Объемный модуль упругости.
18. Ионные кристаллы. Вычисление постоянных, входящих в потенциал межатомного взаимодействия, по экспериментальным данным.
19. Ковалентные кристаллы. Степень ионности связи. Обменная энергия.
20. Методы молекулярной механики. Потенциал Морзе.
21. Потенциальная энергетическая функция Терсоффа.



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1	стр. 16	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	---------	------------------------	---------------

22. Потенциал Додсона.
23. Потенциальная энергетическая функция Терсоффа-Бреннера.
24. Потенциал Бреннера второго поколения.
25. Метод молекулярной механики ММ2.
26. Метод молекулярной механики ММ+.
27. Адаптивный межмолекулярный потенциал реактивной эмпирической связи (AIREBO).
28. Эмпирические потенциалы для металлов. Потенциал Бауэра-Майзенхолдера-Сигера.
29. Потенциал Блайштейна-Бароя-Ханна.
30. Потенциал Эркока-I.
31. Потенциал Эркока-II.
32. Потенциал Эркока-III.
33. Потенциал Эркока-IV.
34. Квантово-механические методы расчета.
35. Полуэмпирические квантово-механические методы.
36. Первопринципные методы моделирования.
37. Программное обеспечение для выполнения квантово-механических расчетов.
38. Графеновые слои. Структура и свойства.
39. Углеродные нанотрубки. Особенности структуры и свойств.
40. Фуллерены. Структура и свойства.
41. Кремниевые кластеры. Структура и свойства кластеров.

## **4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

### **4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации**

Промежуточная аттестация проводится в форме экзамена в два этапа.

На первом этапе студент проходит тестирование. Тест состоит из десяти вопросов, из которых по три вопроса должно быть из разделов № 1 и 3, по два вопроса – из разделов № 2 и 4. Продолжительность прохождения тестирования – 20 минут.

На втором этапе студент в устно-письменной форме отвечает на один вопрос из экзаменационного билета. Время подготовки к ответу на вопрос из билета – 30 минут. Во время подготовки нельзя использовать справочные материалы.

### **4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств**

Степень усвоения материала должна быть продемонстрирована при выполнении лабораторных работ и контрольных работ в течение семестра. Студенты в течение семестра должны успешно сдать отчеты по лабораторным работам и контрольные работы по всем разделам дисциплины. В течение семестра студент должен выполнить три контрольные работы по следующим разделам: 1 – «Обзор методов расчета наноструктур»; 2 – «Методы молекулярной механики»; 3 – «Квантово-механические методы расчета» и «Расчет структуры и свойств углеродных наноструктур». На контрольной работе студенту необходимо ответить на четыре вопроса. В случае если студент не сдал какие-либо



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1	стр. 17	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	---------	------------------------	---------------

контрольные работы в течение семестра, то на допуске к экзамену ему предлагается выполнить контрольные работы по соответствующим темам. В качестве дополнительных критериев проверки самостоятельной работы студента считается выступление студентов по соответствующим разделам, предложенным в качестве выполнения самостоятельной работы.

Особенности проведения процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья обозначены в рабочей программе дисциплины (модуля).

#### Критерии оценивания контрольной работы:

Характеристики ответа	Оценка	Уровень освоения проверяемых компетенций
Правильно и с пояснениями даны ответы на четыре вопроса	зачтено	высокий
Даны ответы на четыре вопроса, но имеются ошибки		средний
Правильно и с пояснениями даны ответы на три вопроса		базовый
Частично даны ответы на четыре вопроса		
Решены три задачи, но есть небольшие ошибки	не зачтено	недостаточный
Даны правильные ответы только на один-два контрольных вопроса		

К промежуточной аттестации (экзамену) не допускаются студенты, которые не сдали отчеты по лабораторным работам.

Экзамен проходит в два этапа. На первом этапе студент проходит тестирование. Второй этап заключается в ответе на два вопроса из экзаменационного билета.

#### 4.2.1. Критерии оценивания теста

В результате прохождения тестирования студент может набрать не более пяти баллов, которые будут суммироваться с баллами, полученными при ответе на теоретические вопросы.

Правильные ответы	10	8-9	7	6	5	менее 5
Баллы	5 баллов	4 балла	3 балла	2 балла	1 балл	0 баллов
Уровень освоения проверяемых компетенций	высокий	средний		базовый		недостаточный

#### 4.2.2. Критерии оценивания теоретического вопроса

В билете приведены два теоретических вопроса из списка экзаменационных



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1	стр. 18	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	---------	------------------------	---------------

вопросов (раздел 3.2. Содержание оценочных средств). В процессе ответа студентом на эти вопросы может быть набрано не более пяти баллов.

#### Критерии оценивания теоретических вопросов

Характеристики ответа	Баллы	Уровень освоения проверяемых компетенций
Студент обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание учебного материала. Исчерпывающе, последовательно, грамотно и логически стройно его излагает, не затрудняется с ответом при видоизменении задания, свободно справляется с поставленными задачами. Правильно обосновывает принятые решения. Может самостоятельно обобщать и излагать материал, не допуская ошибок.	5	высокий
Студент твердо знает материал дисциплины, грамотно и по существу излагает его, но при этом допускаются негрубые ошибки при ответе на вопросы.	4	средний
Студент освоил только основной материал, но не знает отдельных деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушает последовательность изложения программного материала.	3	
Студент знает лишь некоторые из базовых понятий, с большим затруднением отвечает на вопросы	2	базовый
При ответе на вопросы студент допускает грубые ошибки	1	недостаточный
Студент не может ответить на вопросы	0	

#### 4.2.3. Подведение итогов промежуточной аттестации

Для проведения промежуточной аттестации производится суммирование баллов, набранных студентом в результате выполнения теста и ответа на теоретические вопросы из экзаменационного билета. На основе этих баллов выставляется оценка по пятибалльной системе. Критерии выставления оценки приведены в таблице ниже.

Оценка	Баллы
<b>Отлично</b>	<b>10</b>
<b>Хорошо</b>	<b>8-9</b>
<b>Удовлетворительно</b>	<b>7</b>
<b>Неудовлетворительно</b>	<b>0-6</b>



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)  
Физический факультет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование наносистем и процессов нанотехнологий»  
по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 19

Первый экземпляр \_\_\_\_\_

КОПИЯ № \_\_\_\_\_

### 4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций

Оценка	Баллы	Уровень сформированности компетенций
<b>Отлично</b>	<b>10</b>	Высокий уровень освоения проверяемых компетенций: студент свободно владеет основной терминологией и понятийным аппаратом молекулярно-механических и квантово-механических методов моделирования структуры и свойств нанообъектов, что позволяет обосновывать выбор наиболее подходящих методов для решения конкретных задач моделирования наноструктур; полностью сформировано умение использовать навыки работы с программными средствами, использующими различные методы расчета структуры и свойств нанообъектов.
<b>Хорошо</b>	<b>8-9</b>	Средний уровень освоения проверяемых компетенций: у студента формируется комплексное знание основ моделирования, необходимых для выполнения молекулярно-механических или квантово-механических расчетов структуры и свойств нанообъектов; сформировано умение применять полученные навыки решения конкретных физических задач с помощью численного моделирования.
<b>Удовлетворительно</b>	<b>7</b>	Базовый уровень освоения проверяемых компетенций: предполагает формирование компетенций на начальном уровне: студент знает только основные положения дисциплины и недостаточно владеет навыками работы с программными средствами, используемыми для моделирования структуры и свойств нанообъектов.
<b>Неудовлетворительно</b>	<b>0-6</b>	Недостаточный уровень освоения проверяемых компетенций: студент не знает основных положений вопроса, не ориентируется в основных понятиях, излагает материал с трудом, с грубыми фактическими ошибками либо отказывается от ответов на вопросы.

