

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 29.06.2026 10:39:46
Уникальный программный ключ:
04c19ed8bfb98f3b6cb77a486b9a8788b8522525



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 «Первопринципные методы ФКС»
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

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

**Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации
по дисциплине (модулю)
Первопринципные методы ФКС**

Направление подготовки (специальность)
03.04.02 Физика

Направленность (профиль)
Теоретическая и математическая физика

Присваиваемая квалификация
Магистр

Форма обучения
Очная

Год набора **2026**

Челябинск 2026 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 «Первопринципные методы ФКС»
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» 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 «Первопринципные методы ФКС»
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1	стр. 3	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	--------	------------------------	---------------

1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Направление подготовки: 03.04.02 «Физика»

Направленность (профиль): Теоретическая и математическая физика

Дисциплина: Первопринципные методы ФКС

Семестр: 2

Форма промежуточной аттестации: зачет

Система оценивания: оценивание результатов осуществляется с использованием балльно-рейтинговой системы.

2. ПЕРЕЧЕНЬ ФОРМИРУЕМЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ И ЭТАПЫ ИХ ФОРМИРОВАНИЯ

2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной

Изучение дисциплины «Первопринципные методы ФКС» направлено на формирование следующих компетенций:

Коды компетенции согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Содержание компетенций согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Индикаторы достижения компетенции согласно ОПОП	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ПК-1	Способен проводить научно-исследовательскую работу в области физики конденсированного состояния вещества	ПК-1.1. Демонстрирует знание основных теоретических положений и методов в области теоретической и математической физики ПК-1.2. Демонстрирует умения сбора и анализа информации по тематике проводимых научных исследований в области теоретической и	Для достижения ПК-1.1: знать основные теоретические положения и методы в области физики Для достижения ПК-1.2: уметь собирать и анализировать информацию по тематике проводимых научных исследований в области физики Для достижения ПК-1.3: владеть практическими навыками и опытом установления новых фактов и закономерностей в области физики



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 «Первопринципные методы ФКС» по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 4

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

		математической физики ПК-1.3. Имеет практический опыт установления новых фактов и закономерностей в области теоретической и математической физики	
ПК-2	Способность ставить научные задачи в области физики конденсированного состояния вещества и решать их с использованием современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта	ПК-2.1. Обладает знаниями о передовом отечественном и зарубежном опыте эксплуатации и технического обслуживания электронного оборудования. ПК-2.2. Демонстрирует умение ставить научные задачи в области теоретической и математической физики и решать их с использованием современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта ПК-2.3. Имеет практический опыт (навыки) проведения научно-исследовательских работ, опираясь на использование современного оборудования и	Для достижения ПК-2.1: знать обладать знаниями о передовом отечественном и зарубежном опыте эксплуатации и технического обслуживания электронного оборудования Для достижения ПК-2.2: уметь ставить научные задачи в области физики конденсированного состояния вещества и решать их с использованием современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта Для достижения ПК-2.3: владеть практическим опытом (навыками) проведения научно-исследовательских работ, опираясь на использование современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта



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 «Первопринципные методы ФКС»
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 5

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

отечественного и
зарубежного опыта



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 «Первопринципные методы ФКС»
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» 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 ПК-1.1: знать основные теоретические положения и методы в области физики Для достижения ПК-1.2: уметь собирать и анализировать информацию по тематике проводимых научных исследований в области физики Для достижения ПК-1.3: владеть практическими навыками и опытом установления новых фактов и закономерностей в области физики Для достижения ПК-2.1: знать обладать знаниями о передовом отечественном и зарубежном опыте эксплуатации и технического обслуживания электронного оборудования Для достижения ПК-2.2: уметь ставить научные задачи в области физики конденсированного	Введение. Основные понятия	1. Письменный опрос; 2. задачи к практическим занятиям	Тест, вопросы к зачету
		Основные положения физики твердого тела	1. Письменный опрос; 2. задачи к практическим занятиям	
		Квантовая задача многих тел. Одноэлектронное приближение	1. Письменный опрос; 2. задачи к практическим занятиям.	
		Теория функционала плотности	Практические задания по моделированию заданных свойств материала с помощью пакетов программ Quantum ESPRESSO и VASP	
		Методы решения уравнений зонной теории	Практические задания по моделированию зонной структуры материала с помощью пакетов программ Quantum ESPRESSO и 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 «Первопринципные методы ФКС» по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 7

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

<p>состояния вещества и решать их с использованием современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта Для достижения ПК-2.3: владеть практическим опытом (навыками) проведения научно-исследовательских работ, опираясь на использование современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта</p>	<p>Теория функционала плотности для магнитных материалов</p>	<p>Практические задания по магнитной структуры материала с помощью пакетов программ Quantum ESPRESSO и VASP</p>	
---	--	---	--

3.2 Содержание оценочных средств

Раздел 1. Примеры задач к практическим занятиям

1. Чему равно число атомов в элементарной ячейке в случае: 1) простой кубической, 2) кубической объёмно-центрированной и 3) гранецентрированной кубической решеток?
2. Плотность меди, имеющей гранецентрированную кубическую решетку, равна $\rho = 8,96 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$. Вычислить объем элементарной ячейки и 9 атомный радиус для этой кристаллической структуры. Сколько атомов содержится в объеме, равном 1 м^3 ?
3. Зная молярную массу кристалла AgBr (тип решетки NaCl) $\mu = 0,1878 \text{ кг/моль}$ и плотность $\rho = 6,5 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, рассчитать расстояния между кристаллографическими плоскостями $d(100)$, $d(110)$, $d(111)$
4. Определить тройку базисных векторов прямой элементарной ячейки, если ее объем равен $V_{\text{пр}} = (\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = 1$, а вектор $\mathbf{g} = 4\pi\mathbf{i} + 6\pi\mathbf{j} + 8\pi\mathbf{k}$ является вектором ее обратной решетки. Здесь $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ – единичные орты прямоугольной декартовой системы координат. Считать, что базисные векторы прямой решетки отвечают условиям ортогональности.
5. Вычислить объем обратной решетки, базисные векторы которой построены на базисных векторах прямой ОЦК-решетки. Длину ребра куба принять равной 0.1 нм.
6. Определить число элементарных ячеек кристалла объемом $V=1 \text{ м}^3$: 1) хлористого цезия (решетка объёмно-центрированная кубической сингонии); 2) меди (решетка гранецентрированная кубической сингонии); 3) кобальта, имеющего гексагональную структуру с плотной упаковкой.
7. Система плоскостей примитивной кубической решетки задана индексами (111). Определить расстояние d между соседними плоскостями, если параметр a решетки равен 0.3 нм.



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 «Первопринципные методы ФКС»
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1	стр. 8	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	--------	------------------------	---------------

8. Зная постоянную a кубической решетки, вычислить расстояния между кристаллографическими плоскостями $d(100)$, $d(110)$, $d(111)$ для: а) простой кубической структуры; б) ОЦК структуры; в) ГЦК структуры

Раздел 2. Примеры задач к практическим занятиям

1. Концентрация атомов в металле равна n . Считая, что каждый атом отдает в зону проводимости по одному электрону, найти энергию Ферми при $T = 0$ К
2. Кусок металла объемом 20 см^3 находится при температуре 0 К. Определить число ΔN свободных электронов, импульсы которых отличаются от максимального импульса p_{max} не более чем на $0,1 p_{max}$. Энергия Ферми 5 эВ
3. Считая при абсолютном нуле температуры электронный газ полностью вырожденным газом Ферми, оценить его энергию в объеме $V = 1 \text{ м}^3$ при электронной плотности $n = N/V = 10^{18} \text{ м}^{-3}$.
4. Вычислить Фермиевские энергию, импульс и скорость при $T = 0$ К для металла с изотропным квадратичным законом дисперсии электронов с эффективной массой, равной $0,8$ массы свободного электрона, и концентрацией электронов 10^{23} см^{-3} .
5. Вычислить энергию Ферми при $T = 0$ К для алюминия. Считать, что на каждый атом алюминия приходится три свободных электрона
6. Вычислить в модели свободных электронов при $T = 0$ К плотность электронов вблизи уровня Ферми 3 эВ
7. Найти связь между концентрацией электронов n и энергией Ферми при $T = 0$ К.
8. Доказать, что средняя энергия свободных электронов в металле вблизи $T = 0$ К составляет $3/5$ энергии Ферми.

Раздел 3. Примеры задач к практическим занятиям

1. Частица приведена в состояние с волновой функцией

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin \frac{\pi x}{a} & \text{при } 0 \leq x \leq a; \\ 0 & \text{при } x < 0 \text{ или } x > a. \end{cases}$$

Вычислить нормировочную константу A .

2. Волновая функция задается во всем пространстве в сферических координатах выражением

$$\Psi(r) = A \exp \left[-\frac{r^2}{2r_0^2} \right],$$

где r_0 — константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу A .


3. Раскрыть скобки в произведениях операторов:

$$(\hat{F} - \hat{G})(\hat{F} + \hat{G}); \quad (\hat{F} + \hat{G})^2.$$

4. Доказать тождества:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = -[\hat{G}, \hat{F}]; \quad \{\hat{F}, \hat{G}\} = \{\hat{G}, \hat{F}\}.$$

5. Показать, что среднее значение квадрата физической величины F неотрицательно.

 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 «Первопринципные методы ФКС» по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»			
Версия документа - 1	стр. 9	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

6. Показать, что функция $\psi(x) = e^{-x^2/2}$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} - x^2$,

и найти соответствующее собственное значение.

7. Показать, что оператор координаты и оператор проекции импульса на другую координату коммутируют.

8. Построить гамильтониан атома гелия.

Раздел 4. Практические задания по моделированию заданных свойств материала с помощью пакетов программ Quantum ESPRESSO и VASP.

1. Выполнить тесты сходимости полной энергии кристаллов ряда металлических и неметаллических соединений в зависимости от величины обрезки волновых функций и размера сетки волновых векторов.

2. Определить равновесные параметры решетки и модуль всестороннего сжатия для ряда металлических и неметаллических соединений в рамках процедуры электронной релаксации и уравнения Бирч-Мурнагана.

3. Определить равновесные параметры решетки и модуль всестороннего сжатия для ряда металлических и неметаллических соединений в рамках процедуры ионной релаксации.

4. Определить возможную химическую устойчивость/неустойчивость ряда металлических и неметаллических бинарных соединений по отношению к распаду на составляющие элементы.

Раздел 5. Практические задания по моделированию зонной структуры материала с помощью пакетов программ Quantum ESPRESSO и VASP.

1. Выполнить расчеты полной и поэлементной плотности электронных состояний для ряда металлических и неметаллических соединений.

2. Определить энергии Ферми для ряда металлических и неметаллических соединений в зависимости от числа валентных электронов.

3. Получить зонный спектр для металлов, полупроводников и диэлектриков. Определить ширину запрещенной зоны.

4. Построить поверхности Ферми для ряда металлических и неметаллических соединений.

Раздел 6. Практические задания по моделированию магнитной структуры материала с помощью пакетов программ Quantum ESPRESSO и VASP.

1. Выполнить расчеты полного и поэлементного магнитного моментов для ряда ферро- и антиферромагнитных соединений.

2. Определить устойчивую магнитную конфигурацию для ряда металлических соединений с учетом выбора различных кристаллических структур.

3. Провести исследования влияния выбора обменно-корреляционного потенциала на магнитные свойства и стабильность той или иной магнитной структуры для ряда ферро- и антиферромагнитных соединений.

4. Сделать оценки температуры магнитного перехода для ряда ферро- и антиферромагнитных соединений исходя из разницы энергий между магнитоупорядоченной и неупорядоченной фазой.



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 «Первопринципные методы ФКС»
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 10

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

Тест:

1. Какое максимальное количество осей симметрии третьего порядка может быть в кристалле?
 - а) одна;
 - б) три;
 - в) четыре;
 - г) шесть.
2. Сколько центров инверсии в кубе?
 - а) один;
 - б) три;
 - в) шесть;
 - г) девять.
3. Каковы параметры решетки Бравэ в тригональной сингонии?
 - а) $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $a = b \neq c$;
 - б) $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$, $a = b = c$;
 - в) $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $a = b = c$;
 - г) $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$, $a = b \neq c$.
4. Кристаллографические индексы, характеризующие расположение атомных плоскостей в кристалле называются индексами
 - а) узлов;
 - б) направлений;
 - в) плоскостей;
 - г) Миллера.
5. Средняя энергия E , приходящаяся на один электрон в металле при $T = 0$ К равна (где E_F – энергии Ферми):
 - а) $E = 3kT/2$;
 - б) $E = E_F$;
 - в) $E = 3E_F/5$;
 - г) $E = 5E_F/3$.
6. Перекрывание валентной зоны и пустой зоны проводимости характерно для
 - а) полупроводника;
 - б) металла;
 - в) диэлектрика;
7. Какой статистике подчиняется электронный газ в металлах?
 - а) Больцмана;
 - б) Максвелла;
 - в) Бозе-Эйнштейна;
 - г) Ферми-Дирака.
8. Энергетический спектр электронов в кристаллах имеет вид:
 - а) непрерывный;
 - б) линейчатый;
 - в) зонный;



- г) смешанный
9. Уровень Ферми в полупроводниках вблизи абсолютного нуля расположен:
- а) в валентной зоне;
 - б) в зоне проводимости;
 - в) в запрещенной зоне.
10. Основная константа квантовой механики:
- а) Постоянная Неймана
 - б) Постоянная Планка
 - в) Постоянная Гейзенберга
11. Укажите историческую последовательность изучения атома: (1) модель Бора, (2) модель Томсона (3) модель атома Резерфорда
- а) 1-2-3
 - б) 2-3-1
 - в) 3-1-2
12. Де Бройль выдвинул гипотезу, что частицы вещества (например, электрон) обладают волновыми свойствами. Эта гипотеза впоследствии была...
- а) опровергнута путем теоретических рассуждений
 - б) опровергнута экспериментально
 - в) подтверждена в экспериментах по дифракции электронов
 - г) подтверждена в экспериментах по выбиванию электронов из металлов при освещении.
13. Какая из формулировок соответствует принципу Паули.
- а) Энергетический спектр электронов в квантово-механической системе дискретен
 - б) В квантово-механической системе на одном энергетическом уровне не может быть двух электронов, обладающих одинаковым спином
 - в) Состояние микрочастицы в квантовой механике задается волновой функцией
 - г) Состояние микрочастицы в квантовой механике не может одновременно характеризоваться точными значениями координаты и импульса
14. Системы из каких квантовых частиц описываются функцией распределения Ферми-Дирака.
- а) Системы из частиц с полуцелым спином
 - б) Системы из частиц с целым спином
 - в) Системы из частиц с нулевым спином
 - г) Системы из частиц, практически не взаимодействующих между собой
 - д) Системы из частиц очень высоких энергий
15. Какая из перечисленных величин определяет плотность вероятности нахождения микрообъекта в данном месте пространства.
- а) Квадрат модуля волновой функции



Версия документа - 1	стр. 12	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	---------	------------------------	---------------

- б) Волновая функция
- в) Координата
- г) Импульс

16. Приближение Борна-Оппенгеймера заключается в

- а) пренебрежении кинетической энергии
- б) пренебрежении кулоновского взаимодействия между электронами
- в) пренебрежении кулоновского взаимодействия между электроном и ядром
- г) пренебрежении кулоновского взаимодействия между ядрами

17. Выберите правильное утверждение:

- (а) Приближение Хартри обеспечивает антисимметричность волной функции
- (б) Приближение Хартри не обеспечивает антисимметричность волной функции**
- (в) Приближение Хартри говорит о том, что два электрона не могут занимать одно и то же электронное состояние.

18. Потенциал Хартри характеризует

- (а) электрон-электронные взаимодействия**
- (б) электрон-ядерные взаимодействия
- (в) ядерные взаимодействия

19. Основная идея теории функционала плотности заключается в

- (а) замене волновой функции на электронную плотность**
- (б) представлении волной функции в качестве определителя Слейтера
- (в) решении уравнении Шредингера методом Хартри-Фока

20. Обменно-корреляционного взаимодействие включает в себя

- (а) слагаемое кинетической энергии
- (б) слагаемое внешнего потенциала
- (в) слагаемое Хартри
- (г) всевозможные квантовые эффекты**

Ответы

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
в	а	б	г	в	б	г	в	в	б

11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
б	в	б	а	а	г	б	а	а	г

Вопросы к зачету

1. Цели и задачи вычислительного материаловедения. Основные методы и процедуры. Методы конечных элементов. Методы Монте-Карло.
2. Цели и задачи вычислительного материаловедения. Основные методы и процедуры. Методы молекулярной динамики. Первопринципные методы (abinitio методы).



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 «Первопринципные методы ФКС»
по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 13

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

3. Кулоновское взаимодействие. Многочастичное уравнение Шредингера.
4. Многочастичное уравнение Шредингера. Атомные единицы.
5. Приближение Борна-Оппенгеймера.
6. Приближение свободных электронов.
7. Детерминант Слейтера.
8. Приближение молекулярного поля.
9. Метод Хартри-Фока.
10. Алгоритм самосогласованных вычислений.
11. Теория функционала плотности. Электронная плотность.
12. Теория функционала плотности. Полная энергия основного состояния.
13. Модель Томаса-Ферми-Дирака.
14. Теоремы Хоэнберга-Кона.
15. Вариационный принцип Хоэнберга-Кона.
16. Приближение Кона-Шэма: Кинетическая энергия, внешний потенциал, энергия Хартри, обменно-корреляционная энергия и оценка энергетических вкладов в функционал энергии.
17. Самосогласованные уравнения Кона-Шэма.
18. Теория функционала плотности для магнитных материалов. Уравнение Дирака и концепция спинов.
19. Зарядовая и спиновая плотности.
20. Спин в многоэлектронной системе.
21. Уравнение Кона-Шэма в теории функционала спиновой плотности.
22. Представление обменно-корреляционных «дырок».
23. Приближение локальной плотности.
24. Приближение спиновой локальной плотности.
25. Приближение обобщенного градиента и мета-обобщенного градиента.
26. Гибридные и другие обменно-корреляционные функционалы.
27. Самосогласованный подход к решению уравнений Кона-Шэма. Вариационный принцип. Ограничения. Самосогласованность.
28. Блок-схема самосогласованных вычислений.
29. Функционал полной энергии. Функционал Кона-Шэма для потенциала $EKS[V]$.
30. Явный функционал для плотности.
31. Обобщенные потенциалы $V, n, E[V, n]$. Достижение самосогласованности.
32. Метод Бройдена. Полная энергия и другие свойства. Основные допущения к решениям уравнения Кона-Шэма.

4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по каждому из пройденных разделов проводится в два этапа.

На первом этапе студент решает тесты открытого типа со свободным ответом, состоящие из 5 вопросов, или задачу. Продолжительность – 10 минут.



Версия документа - 1	стр. 14	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	---------	------------------------	---------------

На втором этапе студент сдает отчеты по практическим заданиям, связанным с моделированием различных свойств кристаллов с помощью пакетов программ Quantum ESPRESSO и VASP – 10 мин.

4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

Студент в течение семестра решает задачи и выполняет практические задания, связанные с моделированием различных свойств кристаллических соединений с помощью пакетов программ Quantum ESPRESSO и VASP. Задачи и практические задания сгруппированы по темам. В течение семестра студент должен сдать отчет по каждой теме. Отчет по практическим заданиям должен включать в себя постановку задачи, описание деталей вычислений, графическое представление результатов и их анализ, основные выводы.

Критерии оценивания отчета по темам практических заданий: Работа засчитывается в том случае, если отчет содержит все отмеченные пункты, студент может ответить/объяснить ход численных расчетов.

Если студент за время работы в семестре выполнил успешно все работы (решение задач, промежуточные тесты), а также защитил отчет, то он освобождается от зачета (уровень освоения проверяемых компетенций – высокий, оценка «Зачтено»).

Если студент за время работы в семестре выполнил часть запланированных работ (решение задач, промежуточные тесты) или защитил отчет, то студент допускается к сдаче зачета в форме решения теста.

Критерии оценивания теста: каждый правильный ответ – 1 балл. Максимальное количество баллов – 20. Чтобы тест был зачтен, студент должен дать правильные ответы по крайней мере на 12 вопросов из 20. В противном случае, студенту дается один вопрос из общего списка. Если студент отвечает на вопрос, то он получает оценку «Зачтено» (уровень освоения проверяемых компетенций – базовый) иначе оценка «Незачтено».

Оценка	Зачтено	Незачтено
Баллы	20-12 баллов	11-0 баллов
Уровень освоения проверяемых компетенций	средний	недостаточный

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



Версия документа - 1	стр. 15	Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____
----------------------	---------	------------------------	---------------

4. 3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций

Уровни сформированности компетенций определяется следующим образом:

1. **Высокий уровень сформированности компетенций соответствует оценке отлично:**
предполагает формирование компетенций на высоком уровне: студент свободно владеет основной терминологией и понятийным аппаратом курса «Первопринципные методы ФКС», что позволяет формулировать выводы и участвовать в дискуссии по учебным вопросам данной дисциплины; полностью сформировано умение применять полученную теоретическую базу для решения конкретных практических задач и уверенно владеть навыком их решения;
2. **Средний уровень соответствует оценке хорошо:**
предполагает формирование компетенций на среднем уровне: студент хорошо владеет основной терминологией и понятийным аппаратом курса «Первопринципные методы ФКС»; сформировано умение применять полученную теоретическую базу для решения конкретных практических задач и владеть навыками решения базовых задач по «Первопринципным методам ФКС»;
3. **Базовый уровень соответствует оценке удовлетворительно:**
предполагает формирование компетенций на начальном уровне: студент знает «теоретический минимум» и недостаточно владеет методами решения базовых задач по «Первопринципным методам ФКС»;
4. **Низкий уровень соответствует оценке неудовлетворительно:**
студент не владеет основной терминологией и понятийным аппаратом раздела физики конденсированного состояния «Первопринципные методы ФКС»; не владеет навыками решения базовых задач.

