

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**
Моделирование молекулярных систем

Код модуля
1159009(1)

Модуль
Физическое моделирование квантовых систем

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико-математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Согласовано:

Управление образовательных программ

В.В. Топорищева

Авторы:

- Мазуренко Владимир Гаврилович, Профессор, теоретической физики и прикладной математики

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Моделирование молекулярных систем

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Лабораторные занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Зачет	
4.	Текущая аттестация	Отчет по лабораторным работам	1

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Моделирование молекулярных систем

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ОПК-2 -Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты	З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое	Зачет Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам

	сочетание цели и средств при планировании исследований	
УК-2 -Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	<p>Д-2 - Демонстрировать способность убеждать, аргументировать свою позицию</p> <p>З-2 - Формулировать основные принципы формирования концепции проекта в сфере профессиональной деятельности</p> <p>П-2 - Выбирать оптимальные способы решения конкретных задач проекта на каждом этапе его реализации на основе анализа и оценки рисков и их последствий с учетом ресурсов и ограничений</p> <p>У-3 - Анализировать и оценивать риски и результаты проекта на каждом этапе его реализации и корректировать проект в соответствии с критериями, ресурсами и ограничениями</p>	<p>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p>
УК-1 -Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, в том числе в цифровой среде	<p>Д-1 - Демонстрировать аналитические способности и критическое мышление</p> <p>З-2 - Определять этапы разработки стратегии действий, в том числе в цифровой среде, и методы решения проблемных ситуаций</p> <p>П-1 - Использовать эффективные стратегии действий для решения проблемной ситуации, в том числе в цифровой среде, с учетом оценки ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>У-2 - Обосновывать выбор стратегии для достижения поставленной цели, в том числе в цифровой среде, с учетом ограничений, рисков и моделируемых результатов</p>	<p>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p>
ПК-2 -Способен осуществлять эффективное	З-2 - Классифицировать типовые решения, библиотеки программных модулей,	<p>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p>

управление разработкой программных средств и проектов	шаблоны, классы объектов, используемые при разработке программного обеспечения П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники У-2 - Применять методы и средства разработки программного обеспечения, баз данных, программных интерфейсов	Отчет по лабораторным работам
ПК-3 -Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-конструкторских разработок	З-1 - Сделать обзор характеристик научно-производственного оборудования подразделения, правила его эксплуатации З-2 - Изложить порядок оформления научно-технической документации и заявок на приобретение приборов, материалов, другого научного оборудования П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ У-1 - Выбирать методы и средства проведения исследований и разработок с учетом специфики поставленной задачи	Зачет Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам

3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)

3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.5

Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>активность студента на аудиторных занятиях</i>	3,16	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.4		
Промежуточная аттестация по лекциям – зачет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.6		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – не предусмотрено		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено		
3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – 0.5		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>отчет по лабораторным работам</i>	3,16	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – 1		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено		
4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий – не предусмотрено		
Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям – нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено		

3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах

Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– **не предусмотрено**

Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – **не предусмотрено**

4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)			
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания	
		Традиционная характеристика уровня	Качественная характеристика уровня

1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

5.1.1. Лекции

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

5.1.2. Лабораторные занятия

Примерный перечень тем

1. Реализация алгоритма классической молекулярной динамики и исследование поведения разреженного газа с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса
2. Расчет колебательных спектров кубических металлов методом классической молекулярной динамики в модели EAM и использованием программы DL_POLY
3. Вычисление макроскопических величин и корреляционных функций разреженного газа
4. Проведение молекулярно-динамических расчетов кристаллических соединений «из первых принципов» с использованием программы CPMD: получение равновесного состояния и вычисление функции радиального распределения атомов.
5. Молекулярно-динамическое моделирование молекул воды «из первых принципов» с использованием программы Quantum-ESPRESSO: получение равновесной конфигурации, вычисление макроскопических величин.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

Базовый

5.2.1. Отчет по лабораторным работам

Примерный перечень тем

1. Исследование эффективности двух «первопринципных» методов молекулярной динамики: Борна-Оппенгеймера и Кара-Паринелло на примере работы программы CPMD.

2. Проведение молекулярно-динамических расчетов кристаллических соединений «из первых принципов» с использованием программы CPMD: получение равновесного состояния и вычисление функции радиального распределения атомов.

3. Структурное исследование сложных органических молекул погруженных в воду с использованием программы DL_POLY: поиск устойчивого состояния и визуализация процесса.

Примерные задания

Провести расчеты колебательных спектров кубических металлов (Li, Na, K и др.) методом классической молекулярной динамики в модели EAM и использованием программы DL_POLY.

Провести молекулярно-динамических расчеты кристаллов Na, Ag и др. соединений «из первых принципов» с использованием программы CPMD: получение равновесного состояния и вычисление функции радиального распределения атомов.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

5.3.1. Зачет

Список примерных вопросов

1. Вычисление средних по ансамблю и термодинамических величин
2. Алгоритм Верле. Метод «предсказаний и поправок».
3. Метод средней точки. Прыжковый метод. Метод Эйлера-Рундсона
4. Многочастичные потенциалы для металлов (EAM).
5. Способы контроля внешних параметров при использовании метода МД
LMS-платформа – не предусмотрена

5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.