Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский государственный технический университет»
Кафедра материаловедения в машиностроении

Паспорт зачета

по дисциплине «Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов», 2 семестр

1. Методика оценки

Зачет проводится в письменной форме, по билетам. Билет состоит из 1 вопроса и 1 задачи и формируется по следующему правилу:

- вопрос выбирается из диапазона вопросов 1 – 10;
- задача выбирается из диапазона задач 1 – 10.

Таким образом, проверяются результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с установленными в программе индикаторами достижения компетенций.

На зачете преподаватель вправе задавать студенту уточняющие и дополнительные вопросы из общего перечня (п. 4).

Форма билета для зачета

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
Факультет МТФ

Билет № _____
к зачету по дисциплине «Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов»

---

1. Вопрос.
2. Задача.

Утверждаю: зав. кафедрой ____ _____ должность, ФИО
(подпись)
(дата)

2. Критерии оценки результатов обучения, соотнесенных с уровнями освоения индикаторов достижения компетенций

Ответ на билет для зачета засчитывается на **продвинутом** уровне, если студент проводит сравнительный комплексный анализ материала, выявляет проблемы, предлагает механизмы их решения, представляет количественные характеристики определенных

процессов, приводит конкретные примеры, не допускает ошибок и способен обосновать выбор метода решения задачи. Совокупность результатов обучения по дисциплине (модулю) и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций не содержит пробелов. Установленные в программе компетенции сформированы в полном объеме. Оценка составляет *от 18 до 20 баллов.*

Ответ на билет для зачета засчитывается на **базовом** уровне, если студент при ответе на вопросы формулирует основные понятия, дает характеристику процессов, явлений, проводит анализ причин, условий, способен представить количественные и качественные характеристики процессов, не допускает существенных ошибок при решении задачи. Совокупность результатов обучения по дисциплине и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит несущественные пробелы. Установленные в программе компетенции сформированы на базовом уровне. Оценка составляет *от 14 до 17 баллов.*

Ответ на билет для зачета засчитывается на **пороговом** уровне, если студент при ответе на вопросы дает определение основных понятий, может показать причинно-следственные связи явлений, при решении задачи допускает непринципиальные ошибки, например, вычислительные. Совокупность результатов обучения по дисциплине соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит пробелы. Установленные в программе компетенции сформированы на пороговом уровне. Оценка составляет *от 10 до 13 баллов.*

Ответ на билет для зачета считается **неудовлетворительным** (ниже порогового уровня), если студент при ответе на вопросы не дает определений основных понятий, не способен показать причинно-следственные связи явлений, при решении задачи допускает принципиальные ошибки. Совокупность результатов обучения по дисциплине и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит существенные пробелы. Установленные в программе компетенции не сформированы. Оценка составляет *менее 10 баллов.*

3. Шкала оценки

Зачет считается сданным, если сумма баллов по всем заданиям билета составляет от 10 до 20 баллов включительно. Сумма менее 10 баллов признается неудовлетворительным результатом промежуточной аттестации по дисциплине.

В общей оценке по дисциплине баллы за зачет учитываются в соответствии с правилами балльно-рейтинговой системы, установленными в НГТУ.

4. Вопросы к зачету по дисциплине «Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов»

Теоретические вопросы

1. Полная энергия и основное состояние электронов.
2. Приближение Кон-Шэма.
3. Объемно-корреляционный функционал.
4. Самосогласованные расчеты.
5. Формализм, используемый при расчетах упругих свойств твердых тел.
6. Метод подталкивания упругой ленты.
7. Определение собственных мод колебаний и собственных частот.
8. Электронная плотность состояний.
9. Фононная плотность состояний.
10. Определение термодинамических параметров.

Задачи

1. Дана кристаллическая решетка соединения FeAl (ПГС 221, a = 2,910 A, Al [[0,5

0,5 0,5]], Fe [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома алюминия.

2. Дана кристаллическая решетка соединения Cu_3Au (ПГС 221, a = 3,748 А, Cu [[0 0,5 0,5]], Au [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома меди.
3. Дана кристаллическая решетка соединения NiAl (ПГС 221, a = 2,877 А, Al [[0,5 0,5 0,5]], Ni [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома алюминия.
4. Дана кристаллическая решетка соединения NiTi (ПГС 221, a = 2,998 А, Ni [[0,5 0,5 0,5]], Ti [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома никеля.
5. Дана кристаллическая решетка соединения CuZn (ПГС 221, a = 2,949 А, Zn [[0,5 0,5 0,5]], Cu [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома меди.
6. Дана кристаллическая решетка соединения CuNi (ПГС 225, a = 3,563 А, Cu [[0,5 0,5 0,5]], Cu [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома меди.
7. Дана кристаллическая решетка соединения Co_3Ti (ПГС 221, a = 3,613 А, Co [[0 0,5 0,5]], Ti [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома кобальта.
8. Дана кристаллическая решетка соединения Ni_3Al (ПГС 221, a = 3,569А, Ni [[0 0,5 0,5]], Al [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома алюминия.
9. Дана кристаллическая решетка соединения Ni_3Fe (ПГС 221, a = 3,555 А, Ni [[0 0,5 0,5]], Fe [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома никеля.
10. Дана кристаллическая решетка соединения Al_3Li (ПГС 221, a = 4,010 А, Al [[0 0,5 0,5]], Li [[0 0 0]]. Определить энергию основного состояния соединения, оценить объемный модуль упругости и энергию формирования вакансии при удалении из решетки атома алюминия.