

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Аксёнов Александр Александрович
Должность: Декан химического факультета
Дата подписания: 19.06.2026 12:07:07
Уникальный программный ключ:
073635787274402487435acab3ab854864d48641

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета
д.х.н., проф. Аксенов А.В.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по
дисциплине
Компьютерное моделирование неорганических материалов

Направление подготовки	04.04.01 Химия
Направленность (профиль)	Химия современных материалов и технологий
Форма обучения	Очная
Год начала обучения	2026
Реализуется в	1 семестре

Введение

1. Назначение: Фонд оценочных средств по дисциплине «Компьютерное моделирование неорганических материалов» предназначен для формирования у студентов специальности 04.04.01 Химия компетенций: УК-6, ПК-1, ПК-2, ПК-3.

2. ФОС является приложением к программе дисциплины «Компьютерное моделирование неорганических материалов»

3. Разработчик (и)

И. о. заведующего кафедрой неорганической химии, доцент каф. неорганической химии, к.х.н., Чебышев Константин Александрович

Ассистент каф. неорганической химии, к.х.н., Бережная Татьяна Сергеевна

Ассистент каф. неорганической химии, Щеглов Николай Евгеньевич

4. Проведена экспертиза ФОС. Члены экспертной группы:

Председатель Чебышев Константин Александрович, и. о. зав. кафедрой неорганической химии

Члены комиссии: Малюга Владимир Владимирович, доцент кафедры неорганической химии.

Щеглов Николай Евгеньевич, ассистент кафедры неорганической химии.

Представитель организации-работодателя: Адоньев А.И., директор ЗАО «Люкс»

Экспертное заключение: рекомендовать ФОС к использованию в учебном процессе

5. Срок действия ФОС определяется сроком реализации образовательной программы.

1. Описание критериев оценивания компетенции на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Компетенция (ии), индикатор (ы)	Уровни сформированности компетенции(ий),			
	Минимальный уровень не достигнут (Неудовлетворительно) 2 балла	Минимальный уровень (удовлетворительно) 3 балла	Средний уровень (хорошо) 4 балла	Высокий уровень (отлично) 5 баллов
Компетенция УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни				
Результаты обучения по дисциплине (модулю): Индикатор: ИД-1 УК-6 Устанавливает личные и профессиональные цели в соответствии с уровнем своих ресурсов и приоритетов действий, для успешного развития в избранной сфере профессиональной деятельности ИД-2 УК-6 Реализует и корректирует стратегию личностного и профессионального развития, с учетом условий, средств, личностных возможностей, этапов карьерного роста, временной перспективы развития деятельности и требований рынка труда ИД-3 УК-6 Критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении	Не умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Не владеет навыками самоорганизации и саморазвития.	Удовлетворительно умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Удовлетворительно владеет навыками самоорганизации и саморазвития.	Хорошо умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Хорошо владеет навыками самоорганизации и саморазвития.	Отлично умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Отлично владеет навыками самоорганизации и саморазвития.

поставленных задач в избранной сфере профессиональной деятельности.				
Компетенция: ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.				
Результаты обучения по дисциплине (модулю): <i>Индикатор:</i> ИД-1 ПК-1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР ИД-2 ПК-1 Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР ИД-3 ПК-1 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР ИД-4 ПК-1 Готовит объекты исследования	Не знает концепции основных разделов современной химической науки. Не знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Не знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Знает технологические требования и нормативы. Не умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Не умеет работать в команде. Не владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Не владеет навыками решения химических задач. Не владеет методами оформления результатов деятельности в изобразительной предметной области.	Удовлетворительно знает концепции основных разделов современной химической науки. Удовлетворительно знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Удовлетворительно знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Удовлетворительно знает технологические требования и нормативы. Удовлетворительно умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Удовлетворительно умеет работать в команде. Удовлетворительно владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Удовлетворительно владеет навыками решения химических задач. Удовлетворительно владеет методами оформления	Хорошо знает концепции основных разделов современной химической науки. Хорошо знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Хорошо знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Хорошо знает технологические требования и нормативы. Хорошо умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Хорошо умеет работать в команде. Хорошо владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Хорошо владеет навыками решения химических задач. Хорошо владеет	Отлично знает концепции основных разделов современной химической науки. Отлично знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Отлично знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Отлично знает технологические требования и нормативы. Отлично умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Отлично умеет работать в команде. Отлично владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Отлично владеет навыками решения химических задач. Отлично владеет методами оформления результатов деятельности в изобразительной

	Не владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Не владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов.	результатов деятельности в изобразительной предметной области. Удовлетворительно владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Удовлетворительно владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов.	методами оформления результатов деятельности в изобразительной предметной области. Хорошо владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Хорошо владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов.	предметной области. Отлично владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Отлично владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов.
--	--	---	---	--

Компетенция: ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы.

Результаты обучения по дисциплине (модулю): Индикатор: ИД-1 ПК-2 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных).	Не знает концепции основных разделов современной химической науки. Не знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Не знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Не знает технологические требования и нормативы. Не знает информационные основы методов анализа экспериментальных данных. Не умеет работать с источниками научно-технической информации, научной литературы, баз данных в области	Знает концепции основных разделов современной химической науки. В достаточной мере знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Имеет представления о том как работать с источниками научно-технической информации, научной литературы, баз данных в области фундаментальной и прикладной химии. Умеет работать в команде. Слабо развиты навыки решения химических задач.	Знает концепции основных разделов современной химической науки. В достаточной мере знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Имеет представления о технологических требованиях и нормативах. Знает информационные основы методов анализа экспериментальных данных. На хорошем уровне умеет работать с источниками научно-технической информации, научной	Знает концепции основных разделов современной химической науки. Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности. Знает технологические требования и нормативы. Знает информационные основы методов анализа экспериментальных данных. Умеет работать с источниками научно-технической информации, научной литературы, баз данных в области фундаментальной и
---	---	---	---	---

	фундаментальной и прикладной химии, составлять готовый информационный продукт в области профессиональной деятельности. Не умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Не умеет работать в команде. Не владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Не владеет навыками решения химических задач. Не владеет методами оформления результатов деятельности в избранной предметной области. Не владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Не владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовка научных текстов.		литературы, баз данных в области фундаментальной и прикладной химии, составлять готовый информационный продукт в области профессиональной деятельности. Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Умеет работать в команде. Владеет навыками решения химических задач. Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовка научных текстов.	прикладной химии, составлять готовый информационный продукт в области профессиональной деятельности. Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Умеет работать в команде. Владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Владеет навыками решения химических задач. Владеет методами оформления результатов деятельности в избранной предметной области. Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовка научных текстов.
Компетенция: ПК-3 Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры в профессиональной деятельности				
Результаты обучения по дисциплине (модулю): ИД-1 ПК-3. Выполняет	Не умеет работать с источниками научно-технической информации, научной литературы, баз	Имеет базовые знания об этапах составления математических моделей, владеет отдельными элементами	Умеет пользоваться современными информационно-коммуникационными технологиями для	В совершенстве знает математические основы методов анализа экспериментальных данных; информационные

стандартные операции на высокотехнологическом современном оборудовании. ИД-2 ПК-3. Обосновывает применение того или иного алгоритма машинного обучения для решения конкретной профессиональной задачи химической направленности. ИД-3 ПК-3. Разрабатывает и адаптирует оригинальные модели и алгоритмы для работы искусственного интеллекта при решении профессиональных задач химической направленности.	данных в области фундаментальной и прикладной химии.	проектирования моделей процессов переноса энергии, Знает основные понятия и методы построения моделей на основе теории подобия.	поиска и обработки информации, работы с базами данных, презентации результатов в избранной предметной области.	основы методов анализа экспериментальных данных.
--	---	--	---	---

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕРКИ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ

Но мер зада ния	Правильный ответ	Содержание вопроса	Компете нция
1.		Что такое компьютерное моделирование? a) Процесс изготовления компьютеров b) Создание программного обеспечения c) Исследование материалов с помощью численных методов d) Ручной анализ экспериментальных данных	УК-6
2.		Какой основной метод применяется для моделирования атомной структуры твердых тел? a) Метод конечных элементов b) Метод молекулярной динамики c) Метод Монте-Карло d) Нейтронная дифракция	УК-6
3.		Какой принцип лежит в основе квантово-механических расчетов в моделировании материалов? a) Принцип неопределенности Гейзенберга b) Уравнение Шредингера c) Закон сохранения импульса d) Принцип Паули	УК-6
4.		Какой из следующих методов основан на решении уравнения Шредингера? a) Плотностно-функциональный метод (DFT) b) Метод молекулярной динамики c) Метод конечных элементов d) Метод Монте-Карло	ПК-1
5.		Какой параметр описывает устойчивость кристаллической структуры в расчетах? a) Энергия Ферми b) Коэффициент теплового расширения c) Энергия образования d) Электронная плотность	ПК-3
6.		Какой программный пакет часто используется для квантово-механического моделирования? a) ANSYS b) VASP c) AutoCAD d) SolidWorks	ПК-2

7.		Как называется область моделирования, содержащая повторяющиеся ячейки кристалла? a) Суперячейка b) Тетраэдр c) Спиновая решетка d) Фазовая диаграмма	ПК-1
8.		Какой метод моделирования позволяет изучать диффузию атомов? a) Молекулярная динамика b) Метод Монте-Карло c) Метод DFT d) Графеновые вычисления	ПК-1
9.		Какой основной параметр рассчитывается в DFT-методе? a) Электронная плотность b) Скорость звука в кристалле c) Коэффициент теплопроводности d) Время релаксации	УК-6
10.		Что такое периодические граничные условия? a) Условия, накладываемые при моделировании бесконечного кристалла b) Условия на границах конденсированных сред c) Граничные условия для квантовых точек d) Алгоритм оптимизации структуры	ПК-1
11.		Какой из перечисленных материалов является неорганическим? a) Полистирол b) Оксид кремния (SiO₂) c) Целлюлоза d) Белок	ПК-2
12.		Что такое элементарная ячейка кристалла? a) Минимальная повторяющаяся часть структуры b) Совокупность нескольких кристаллов c) Дефект кристаллической структуры d) Вакуумное пространство в модели	УК-6
13.		Какой параметр определяет прочность кристалла? a) Коэффициент термического расширения b) Коэффициент Пуассона c) Модуль Юнга d) Электронное сродство	ПК-3

14.		Как называется упаковка атомов в кубической структуре с максимальной плотностью? a) ОЦК b) ГЦК c) Гексагональная d) Амофная	ПК-3
15.		Какой метод можно использовать для определения зонной структуры материала? a) Метод конечных элементов b) Метод Kohn-Sham c) Лазерная абляция d) Метод фазовых полей	ПК-1
16.		Какой из методов используется для анализа дефектов в кристаллических структурах? a) Метод молекулярной динамики b) Метод Монте-Карло c) Метод динамики частиц d) Метод фотонной спектроскопии	УК-6
17.		Какой из ниже приведенных методов используется для расчета тепловых свойств материалов? a) Метод Монте-Карло b) Молекулярная динамика с применением температурных условий c) Метод решеточного динамического анализа d) Метод конформного анализа	ПК-2
18.		Какое свойство материала описывает его способность проводить электрический ток? a) Электронная плотность b) Электрическая проводимость c) Теплопроводность d) Инерционность	ПК-1
19.		Как называется процесс, при котором атомы материала меняют свое расположение под действием тепла? a) Диффузия b) Декомпозиция c) Кристаллизация d) Рекомбинация	ПК-2
20.		Какой основной фактор влияет на стабильность атомной структуры при высоких температурах? a) Энергия Гиббса b) Тепловое расширение c) Плотность материала d) Энергия активации	ПК-1

21.		Как называется метод, при котором вычисляется вероятность состояний системы на основе статистики? a) Метод Монте-Карло b) Метод молекулярной динамики c) Метод элементарных колебаний d) Метод дискретных элементов	ПК-1
22.		Какой из методов моделирования используется для изучения фазовых диаграмм материалов? a) Метод Монте-Карло b) Метод плотностно-функциональных расчетов c) Метод молекулярной динамики d) Метод когерентных волн	УК-6
23.		Какой из следующих методов моделирования наиболее подходит для изучения явлений, происходящих на атомном уровне? a) Метод атомных силовых микроскопов b) Метод молекулярной динамики c) Метод расчетов на основе термодинамики d) Метод упругой волны	ПК-2
24.		Какое явление используется для расчета электронных структур в методах квантовой механики? a) Деформация кристалла b) Преобразование Фурье c) Закон Гейзенберга d) Магнитный момент	ПК-3
25.		Какая модель описывает взаимодействие атомов в молекулярной динамике? a) Модель Лоренца b) Потенциал Леннард-Джонса c) Модель Ньютона d) Модель Джейнса	ПК-2
26.		Какое количество электронов можно использовать для расчета структуры с помощью метода DFT? a) 1-2 электрона b) Только валентные электроны c) Все электроны d) Только проводящие электроны	УК-6
27.		Что такое фазовая диаграмма материала? a) График зависимости температурных характеристик b) Множество состояний, которые может принять материал при разных температурах и давлениях c) Спектр электронных состояний d) График зависимости атомных взаимодействий	УК-6

28.		Какой метод является основным для расчетов электронных состояний в кристаллических материалах? a) Метод Дирака b) Метод плотностного функционала c) Метод элементарных частиц d) Метод Ричардсона	ПК-1
29.		Какой из параметров является важным при моделировании механических свойств материалов? a) Модуль упругости b) Количество атомов в структуре c) Величина магнитного поля d) Энергия активации	ПК-1
30.		Что такое молекулярная динамика в контексте компьютерного моделирования? a) Метод анализа химических реакций b) Метод численного решения уравнений движения частиц c) Метод анализа волновых функций атомов d) Метод анализа термодинамических свойств вещества	ПК-2
31.		Опишите основные принципы и методы компьютерного моделирования неорганических материалов. Как они применяются для исследования их структуры и свойств?	ПК-3
32.		Что такое метод молекулярной динамики? Как он используется для моделирования взаимодействий атомов и молекул в неорганических материалах?	ПК-2
33.		Объясните, что такое метод Монте-Карло. Как он используется для решения задач в области моделирования неорганических материалов, особенно в термодинамике и фазовых переходах?	УК-6
34.		Какие особенности имеет моделирование кристаллических структур с использованием периодических граничных условий? Приведите примеры применения этого метода.	ПК-3

35.		Как метод плотностного функционала (DFT) применяется для изучения электронной структуры неорганических материалов? Опишите его основные преимущества и ограничения.	ПК-2
36.		Расскажите о принципах работы с квантовомеханическими методами в моделировании неорганических материалов. Какие задачи решаются с их помощью, и какие проблемы могут возникнуть при их применении?	УК-6
37.		Объясните роль потенциала Леннард-Джонса в молекулярной динамике. Как этот потенциал используется для моделирования взаимодействий между атомами и молекулами?	ПК-1
38.		Как моделируются дефекты в кристаллических структурах? Перечислите основные типы дефектов и методы их анализа с использованием компьютерных методов.	ПК-3
39.		Что такое фазовые диаграммы материалов и как они рассчитываются с использованием методов компьютерного моделирования? Объясните их важность для прогнозирования свойств материалов.	ПК-3
40.		Какие методы используются для изучения тепловых свойств неорганических материалов в рамках молекулярной динамики? Как с помощью этих методов можно прогнозировать поведение материалов при изменении температуры?	ПК-2
41.		Какие параметры и характеристики необходимо учитывать при моделировании механических свойств неорганических материалов, таких как прочность и жесткость? Опишите, как они рассчитываются.	УК-6

42.		Как моделируются межфазные границы и взаимодействия в многофазных системах? Какие задачи решаются при помощи этого подхода в контексте неорганических материалов?	УК-6
43.		Расскажите о методах расчета зонной структуры и плотности состояний неорганических материалов. Как эти расчеты могут быть использованы для анализа проводящих и полупроводниковых свойств материалов?	УК-6
44.		Объясните, как методы молекулярной динамики используются для изучения диффузии атомов в твердых телах. Какие факторы влияют на скорость диффузии и как это моделируется?	ПК-1
45.		Как в компьютерном моделировании неорганических материалов используются методы, основанные на решении уравнений Шредингера? Приведите примеры их применения для анализа электронных и структурных свойств материалов.	ПК-3
46.		Что такое суперячейки, и как они применяются при моделировании дефектов и примесей в кристаллических материалах? Объясните, как эта концепция помогает повысить точность расчетов.	УК-6
47.		Какие существуют подходы для моделирования термодинамических свойств неорганических материалов? Какие параметры важны для анализа их устойчивости при высоких температурах?	ПК-1
48.		Как методы компьютерного моделирования могут быть использованы для предсказания механизма химических реакций в неорганических материалах, например, при их термическом разложении или окислении?	ПК-2

49.		Как моделируются магнитные и оптические свойства неорганических материалов с использованием различных методов численного моделирования? Как эти свойства связаны с электронной структурой материала?	ПК-3
50.		Что такое метод «великолепных симуляций» и как он используется для моделирования аномальных явлений в неорганических материалах, таких как высокое давление или сверхпроводимость?	ПК-2

2. Критерии оценивания компетенций

Оценка «отлично» выставляется студенту, если теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно излагает материал; свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний; использует в ответе дополнительный материал все предусмотренные программой задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному; анализирует полученные результаты; проявляет самостоятельность при выполнении заданий.

Оценка «хорошо» выставляется студенту, если теоретическое содержание курса освоено полностью, необходимые практические компетенции в основном сформированы, все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения достаточно высокое. Студент твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если теоретическое содержание курса освоено частично, но пробелы не носят существенного характера, большинство предусмотренных программой заданий выполнено, но в них имеются ошибки, при ответе на поставленный вопрос студент допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, наблюдаются нарушения логической последовательности в изложении программного материала.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если он не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические и лабораторные работы, необходимые практические компетенции не сформированы, большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий не выполнено, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к минимальному.

Оценка «зачтено» выставляется студенту, который дал полные правильные ответы или допустил неточности, не имеющие принципиального характера, а также, студенту, допускающему незначительные ошибки и имеющему незначительные пробелы.

Оценка «не зачтено» выставляется студенту, если он дал неверные ответы, путался в понятиях и определениях, допускал ошибки принципиального характера.