

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Квантовая молекулярная динамика
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 15 час.

Всего часов: 45, всего зач. ед.: 1

Программу составили:

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент

И.М. Саитов, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании Физтех-кластера академической и научной карьеры 28.01.2022

Аннотация

Предлагаемый курс знакомит студентов с методами современной вантовой лекулярной динамики. Курс состоит из теоретической части, в которой студенты знакомятся с фундаментальными основами используемых методов, и из практической части, в которой студенты учатся пользоваться программными пакетами для расчетов на основе изученных теоретических методов.

В рамках теоретической части в курсе представлены уровни приближений описания электронной структуры в рамках теории функционала электронной плотности (ТФП) для проведения расчетов квантовой молекулярной динамики. Рассматриваются методы расчета как адиабатической, так и неадиабатической динамики. Рассматриваются различные способы расчета возбужденных состояний электронов и их динамики. Рассматриваются методы анализа оптических свойств материалов. Описываются преимущества использования различных типов базисных наборов для представления волновых функций. Представлены методы описания электрон-ионных корреляций на основе функций Ванье.

В рамках практической части курса студенты на вычислительном кластере будут применять представленные в теоретической части методы. Одна из задач курса - дать студентам навыки проведения соответствующих расчетов.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Изучение основных методов и теоретических основ современной квантовой молекулярной динамики с акцентом на исследования неадиабатической динамики и на анализе оптических свойств вещества.

Задачи дисциплины

- освоение студентами базовых знаний в области квантового молекулярного моделирования;
- приобретение теоретических знаний в области теории функционала плотности и ее специальных разделов;
- изучение различных пакетов квантового молекулярного моделирования;
- обучение студентов подбору и настройке современных программных пакетов для квантового моделирования.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения

УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения
	УК-2.3 Способен организовать и координировать работу участников проекта, обеспечивать работу команды необходимыми ресурсами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности

решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

Основы теории функционала плотности и метода квантовой молекулярной динамики в адиабатическом приближении и неадиабатическом приближении. Методы расчет возбужденных состояний в материалах. Методы расчета оптических свойств в рамках ТФП. Метод функций Ванье локализации электронных орбиталей.

уметь:

Проводить расчеты уравнения состояния и оптических свойств в рамках ТФП. Проводить расчеты возбужденных состояний системы. Проводить расчеты методами неадиабатической динамики. Проводить локализацию электронных орбиталей. Проводить моделирование термодинамических свойств с использованием метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям.

владеть:

пакетов для расчетов методом ТФП (VASP, Quantum Espresso, CPMD).

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Обзор численных решений уравнения Шредингера	2	2		2
2	Метод адиабатической молекулярной динамики DFT	1	1		1
3	Расчеты в основном состоянии ТФП	2	2		2
4	Расчеты методами конечно-температурной ТФП	1	1		1
5	Расчет оптических свойств в рамках ТФП	2	2		2

6	Учет возбужденных состояний в рамках ТФП: ROKS	1	1		1
7	Учет возбужденных состояний в рамках время зависящей ТФП: TD DFT	1	1		1
8	Метод неадиабатической молекулярной динамики ТФП: Метод среднего поля	1	1		1
9	Метод неадиабатической молекулярной динамики ТФП: Surface Hopping	1	1		1
10	Метод неадиабатической молекулярной динамки в рамках волновых пакетов: WPMD (eFF)	1	1		1
11	Метод молекулярной динамики на интегралах по траекториям в рамках ТФП. Энергия Нулевых колебаний	1	1		1
12	Максимально локализованные орбитали Ванье	1	1		1
Итого часов		15	15		15
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		45 час., 1 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Обзор численных решений уравнения Шредингера

Будет сделан обзор следующих методов и их применимости: аналитический метод, метод возмущений, метод Хартри-Фока. Так же будет проведено введение в теорию функционала плотности, функции Грина. Студенты попробуют запустить простейшие пакеты квантовых расчетов.

2. Метод адиабатической молекулярной динамики DFT

Будет рассмотрена Борн-Оппенгеймерская молекулярная динамика. Молекулярная динамика Кара-Паринелло. Рассмотрены приближения и область применимости этих методов.

3. Расчеты в основном состоянии ТФП

Введение в теорию функционала плотности. Влияния базисов, приближения обменно-корреляционного функционала. Плотность электронных состояний. Будут рассмотрены наиболее популярные пакеты расчетов в рамках теории функционала плотности.

4. Расчеты методами конечно-температурной ТФП

Рассмотрен метод теории функционала плотности в формулировке конечных температур. Рассмотрены приближения, которые необходимы в этой теории, а также границы ее применимости. Обсуждается вопрос описания электронных переходов в рамках этих подходов.

5. Расчет оптических свойств в рамках ТФП

Будут рассмотрены различные методы расчета диэлектрической проницаемости в приближении теории линейного отклика в длинноволновом пределе в рамках ТФП. Расчет с использованием формул для продольного и поперечного тензоров ДП. Учет эффектов локального поля. Также будут рассмотрены различные приближения для учета обменно-корреляционного взаимодействия: от приближения невзаимодействующих электронов до метода гриновских функций (GW)

6. Учет возбужденных состояний в рамках ТФП: ROKS

Рассматривается модель перехода электрона в возбужденное состояние с различными вариантами расположения спинов. Строится теория описания первого возбужденного состояния электрона и сравнивается с допущениями конечно-температурной теории. Проводится расчет водорода в рамках метода ROKS и рассматриваются различные варианты перехода (синглетное, триплетное), проводится анализ молекулярных орбиталей.

7. Учет возбужденных состояний в рамках время зависящей ТФП: TD DFT

Рассматриваются основы TDDFT. Изучение влияния учета экситонных состояний на оптические свойства вещества при различных условиях в рамках теории функционала плотности с зависимостью от времени на основе решений уравнений Бете-Солпитера. Обзор программных пакетов для TD DFT.

8. Метод неадиабатической молекулярной динамики ТФП: Метод среднего поля

Рассматривается неадиабатическая динамика квантовой системы методом среднего поля (методом Эренфеста). Исследуется применимость метода в моделях химических реакций.

9. Метод неадиабатической молекулярной динамики ТФП: Surface Hopping

Рассматривается неадиабатическая динамика квантовой системы с возможностью перескоков электронов между основным и возбужденным состоянием. Применение ROKS, ограничение на количество возбужденных состояний, границы применимости.

10. Метод неадиабатической молекулярной динамики в рамках волновых пакетов: WPMD (eFF)

Рассматриваются основы полуклассического приближения квантовой теории. Метод волновых пакетов и различные варианты представления электронов. В качестве одной из реализаций метода волновых пакетов рассматривается метод electron Force Field.

11. Метод молекулярной динамики на интегралах по траекториям в рамках ТФП. Энергия Нулевых колебаний

Изучение влияния нулевых колебаний на уравнение состояния и структурные свойства применительно к системам, содержащим водород.

12. Максимально локализованные орбитали Ванье

Рассматривается метод максимально локализованных орбиталей Ванье, широко применяемых при расчетах периодических структур. Изучаются критерии применимости метода и случаи, в которых такие орбитали могут расширить информацию о системе.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Компьютеры, мультимедийное оборудование (проектор), экран, доступ к вычислительному кластеру, доска, мел или маркеры.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] / В. Г. Цирельсон - М.БИНОМ. Лаб. знаний, 2010
2. Marzari N. et al. Maximally localized Wannier functions: Theory and applications //Reviews of Modern Physics. – 2012. – Т. 84. – №. 4. – С. 1419.
3. Doltsinis N. L., Marx D. First principles molecular dynamics involving excited states and nonadiabatic transitions //Journal of Theoretical and Computational Chemistry. – 2002. – Т. 1. – №. 02. – С. 319-349.
4. Jaramillo-Botero A. et al. Large-scale, long-term nonadiabatic electron molecular dynamics for describing material properties and phenomena in extreme environments //Journal of computational chemistry. – 2011. – Т. 32. – №. 3. – С. 497-512.

Дополнительная литература

1. Atkins P. W., Friedman R. S. Molecular quantum mechanics. – Oxford university press, 2011.
2. Mahan G. D. 9. Many-Particle Systems. – Princeton University Press, 2008. – С. 288-319.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Базы данных по журналам Physical Review, J of Chemical Physics, ЖЭТФ, ТВТ, УФН и др.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций. На практических занятиях используются компьютеры и вычислительный кластер (многопроцессорная и многоузловая система с графическими ускорителями и системой очередей) с возможностью удалённого доступа.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры (Вычислительная физика конденсированного состояния и живых систем)
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Разработчики:

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент
И.М. Саитов, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
	УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения
	УК-2.3 Способен организовать и координировать работу участников проекта, обеспечивать работу команды необходимыми ресурсами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений

ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Квантовая молекулярная динамика» обучающийся должен:

знать:

Основы теории функционала плотности и метода квантовой молекулярной динамики в адиабатическом приближении и неадиабатическом приближении. Методы расчет возбужденных состояний в материалах. Методы расчета оптических свойств в рамках ТФП. Метод функций Ванье локализации электронных орбиталей.

уметь:

Проводить расчеты уравнения состояния и оптических свойств в рамках ТФП. Проводить расчеты возбужденных состояний системы. Проводить расчеты методами неадиабатической динамики. Проводить локализацию электронных орбиталей. Проводить моделирование термодинамических свойств с использованием метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям.

владеть:

пакетов для расчетов методом ТФП (VASP, Quantum Espresso, CPMD).

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Примеры контрольных заданий для текущего контроля:

- 1) Запустить расчет водорода в первом синглетном состоянии и в основном состоянии, рассчитать разницу в энергиях.
- 2) Опишите кратко суть метода Хартри-Фока. В каких системах его применение нецелесообразно?

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Перечень контрольных вопросов

1. Формула для продольного тензора диэлектрической проницаемости в рамках теории линейного отклика в длинноволновом пределе. Формула Линхарда.
2. Формула Кубо и Кубо-Гринвуда. Отличие от выражения для продольного тензора ДП.
3. В чем основное приближение динамики Борн-Оппенгеймера?
4. Почему теория функционала плотности в формулировке конечных температур не может точно описать возбужденное состояние электронов?
5. Напишите теорему Гельмана-Фейнмана.
6. Из каких соображений строится теория Surface-Hopping?

Примеры контрольных заданий

1. Рассчитать давление и парную корреляционную функцию вещества при заданных условиях в рамках квантового метода молекулярной динамики. Исследовать полученные результаты на сходимость по параметрам расчета.
2. Рассчитать давление и парную корреляционную функцию вещества при заданных условиях в рамках метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям. Исследовать полученные результаты на сходимость по параметрам расчета. Сравнить с результатами расчета в адиабатическом приближении.
3. Расчет диэлектрической проницаемости, статической электропроводности и коэффициента отражения рассматриваемого вещества при заданных условиях. Определение характера проводимости. Исследование сходимости полученных результатов от параметров расчета.
4. Учет влияния эффектов локального поля на оптические свойства.
5. Определение плотности свободных зарядов и эффективной частоты столкновений в проводнике на основе расчета диэлектрической проницаемости.
6. Выведите уравнения для расчета энергии в рамках теории ROKS.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Дифференцированный зачёт проводится в письменной и устной форме по билетам. В каждом билете представлен один теоретический вопрос и одно практическое задание. При проведении зачёта обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.