

МИНОБРНАУКИ России  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный технический университет»  
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ  
заведующий кафедрой

Биотехнологии, химии и

стандартизации

(наименование кафедры)

М.Г. Сульман

(Ф.И.О. зав. кафедрой)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

## ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

Промежуточной аттестации в форме зачета

(промежуточной аттестации: экзамен, зачет, курсовая работа или курсовой проект; практики: с указанием вида и типа практики; государственного итогового экзамена)

### КОМПЬЮТЕРНЫЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР

Наименование дисциплины (для промежуточной аттестации)

направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) –

Химия функциональных наноматериалов

Типы задач –

научно-исследовательский

Разработаны в соответствии с:

Рабочей программой дисциплины «Компьютерные методы моделирования

наноструктур»

утвержденной Проректором по УВР от «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Разработчик(и): профессор Ю.Ю. Косивцов

Тверь 202\_

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

## **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 1**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Методы корреляции, основанные на теории распознавания образов, регрессионных зависимостях и квантовых моделях молекул.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Особенности применения математических методов и моделей в теории и практике.**

3. Задание для проверки уровня УМЕТЬ – 0 или 1 балл:

**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Найдите расстояние между центрами двух атомов  $r_0$ , при котором энергия системы минимальна**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 2**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Линейные статистические модели и линейное программирование.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте энергии кластеров (правильный пятиугольник).**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 3**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Численное дифференцирование, его связь с интерполяцией и аппроксимацией функций.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте энергии кластеров (тригональная бипирамида).**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 4**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов.**
2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Понятие модели. Классификация математических моделей.**
3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Выведите формулу, описывающую зависимость числа атомов в октаэдрическом кластере от количества атомов на его ребре  $O(n)$ .**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 5**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Метод молекулярной динамики (общие принципы).**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Понятие модели и моделирования. Роль моделирования в физико-химических исследованиях.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:  
**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте энергии кластеров (квадратная пирамида).**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 6**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Молекулярное распознавание (Считывание информации, Молекулярные рецепторы, Матричный синтез, Супрамолекулярный катализ, Комплементарность активного центра и субстрата).**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Методы корреляции, основанные на теории распознавания образов, регрессионных зависимостях и квантовых моделях молекул.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**Если «разобрать» на атомы некоторый тетраэдрический кластер и затем сложить из них октаэдр, то для завершения фигуры нам понадобится один дополнительный атом металла, а ребро нового кластера будет содержать на 2 атома меньше, чем ребро исходного. Сколько атомов было в исходном кластере?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 7**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**Сколько слоев можно выделить в кубических кластерах с общим числом атомов 512 и 125?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 8**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Общие принципы кодирования химических соединений**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**Рассмотрим выпуклый многогранник  $Z$ , состоящий из  $x$   $n$ -угольников и  $y$   $m$ -угольников, в каждой вершине которого сходятся по 3 ребра. Сколько ребер в  $Z$ , если он имеет 60 вершин?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 9**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Синтетический и ретросинтетический подходы.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Рассмотрим выпуклый многогранник  $Z$ , состоящий из  $x$   $n$ -угольников и  $y$   $m$ -угольников, в каждой вершине которого сходятся по 3 ребра. Сколько разных изомеров (фигур, не совмещаемых друг с другом вращением в пространстве) получится, если у каждого из рассматриваемых  $Z$  в пределах одной грани пометить две вершины?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 10**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Компьютерное планирование органического синтеза. Формально-логические и эмпирические методы планирования.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Метод молекулярной динамики (общие принципы).**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:  
**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Найдите расстояние между центрами двух атомов  $r_0$ , при котором энергия системы минимальна.**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 11**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Понятие о планировании экспериментов. Постановочные и дискриминирующие эксперименты.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Молекулярное распознавание (Считывание информации, Молекулярные рецепторы, Матричный синтез, Супрамолекулярный катализ, Комплементарность активного центра и субстрата).**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**Рассмотрим выпуклый многогранник  $Z$ , состоящий из  $x$   $n$ -угольников и  $y$   $m$ -угольников, в каждой вершине которого сходятся по 3 ребра. Сколько ребер в  $Z$ , если он имеет 60 вершин?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 12**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Структура оптимизационной модели (целевая функция, система ограничений, условия неотрицательности переменных).**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**Сколько слоев можно выделить в кубических кластерах с общим числом атомов 512 и 125?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 13**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Градиентные методы оптимизации. Метод неопределенных множителей Лагранжа.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Общие принципы кодирования химических соединений.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**Если «разобрать» на атомы некоторый тетраэдрический кластер и затем сложить из них октаэдр, то для завершения фигуры нам понадобится один дополнительный атом металла, а ребро нового кластера будет содержать на 2 атома меньше, чем ребро исходного. Сколько атомов было в исходном кластере?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 14**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Классические методы оптимизации. Метод Гаусса-Зейделя. Симплексный метод.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Синтетический и ретросинтетический подходы**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:  
**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте энергии кластеров (квадратная пирамида).**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 15**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Понятие о планировании экспериментов. Постановочные и дискриминирующие эксперименты.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Компьютерное планирование органического синтеза. Формально-логические и эмпирические методы планирования.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» - 0 или 1 балл:

**Рассмотрим выпуклый многогранник  $Z$ , состоящий из  $x$   $n$ -угольников и  $y$   $m$ -угольников, в каждой вершине которого сходятся по 3 ребра. Сколько ребер в  $Z$ , если он имеет 60 вершин?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 16**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Прикладные программы для решения задач методами линейного программирования.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Понятие о планировании экспериментов. Постановочные и дискриминирующие эксперименты.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Найдите расстояние между центрами двух атомов  $r_0$ , при котором энергия системы минимальна.**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 17**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Структура программы: раздел описания и раздел операторов. Логические выражения.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:

**Понятие о планировании экспериментов. Постановочные и дискриминирующие эксперименты.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:

**Если «разобрать» на атомы некоторый тетраэдрический кластер и затем сложить из них октаэдр, то для завершения фигуры нам понадобится один дополнительный атом металла, а ребро нового кластера будет содержать на 2 атома меньше, чем ребро исходного. Сколько атомов было в исходном кластере?**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 18**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Константы и переменные. Массивы переменных. Стандартные математические функции. Программная реализация алгоритмов.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Структура оптимизационной модели (целевая функция, система ограничений, условия неотрицательности переменных).**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Выведите формулу, описывающую зависимость числа атомов в октаэдрическом кластере от количества атомов на его ребре  $O(n)$ .**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 19**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Алгоритмы и блок-схемы алгоритмов. Основные свойства и формы представления алгоритмов. Устойчивость вычислительных алгоритмов.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Градиентные методы оптимизации. Метод неопределенных множителей Лагранжа.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 1 балл:  
**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте энергии кластеров (квадратная пирамида).**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Тверской государственный технический университет»**

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Компьютерные методы моделирования наноструктур»

Семестр 3

### **ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 20**

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Тестирование и отладка математической модели. Погрешности математического моделирования.**

2. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1 балл:  
**Градиентные методы оптимизации. Метод неопределенных множителей Лагранжа.**

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» - 0 или 1 балл:  
**При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними**

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

**Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте энергии кластеров (правильный пятиугольник).**

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман