

СИЛАБУС

навчальної дисципліни

«Молекулярна динаміка та *ab initio* моделювання у матеріалознавстві»

Галузь знань	10 Природничі науки
Шифр та назва спеціальності	104 Фізика та астрономія
Рівень вищої освіти	Третій (освітньо-науковий)
Статус дисципліни	Вибіркова
Викладач	
	<p>Овчаренко Юрій Михайлович Доцент, кандидат фізико-математичних наук, с.н.с. лабораторії рентгенівської фазоконтрастної томографії на основі малогабаритних прискорювачів, Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, м.Суми iap.oym@gmail.com</p>
Загальна інформація про дисципліну	
Анотація	<p>Курс присвячений сучасним методам молекулярної динаміки та <i>ab initio</i> моделювання, що застосовуються для дослідження властивостей металів і сплавів на атомному рівні. Особливу увагу приділено алгоритмам MD, принципам теорії функціонала густини та практичній роботі з провідним програмним забезпеченням, таким як LAMMPS і Quantum ESPRESSO. Студенти отримають навички побудови моделей, аналізу дифузійних, механічних та термодинамічних характеристик матеріалів, а також розрахунку електронної структури. Курс спрямований на формування компетентностей, необхідних для проведення високорівневих наукових досліджень у галузі матеріалознавства та фізики твердого тіла.</p>
Мета	<p>Метою курсу є формування у здобувачів системних знань та практичних навичок застосування методів молекулярної динаміки та <i>ab initio</i> квантово-механічних розрахунків для дослідження атомної структури, фізичних властивостей і процесів еволюції металів та сплавів. Курс спрямований на розвиток уміння обирати та використовувати сучасні між-атомні потенціали, інструменти DFT і алгоритми комп'ютерного моделювання. Особливий акцент робиться на інтерпретації результатів та застосуванні чисельних методів для розв'язання актуальних задач фізики твердого тіла та матеріалознавства.</p>

Результати навчання	<p>Внаслідок вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен бути здатним продемонструвати такі</p> <p>Компетентності:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Знати фундаментальні принципи молекулярної динаміки (MD) та <i>ab initio</i> методів, зокрема теорії функціонала густини (DFT). • Вміти вибирати й параметризувати міжатомні потенціали для металів і сплавів, а також оцінювати їх адекватність. • Проводити класичні MD-симуляції з використанням програмних засобів (наприклад, LAMMPS) та аналізувати результати щодо структури, дифузії, дефектів та термодинамічних властивостей. • Здійснювати DFT-розрахунки за допомогою пакету з відкритим програмним кодом Quantum ESPRESSO, включно з оптимізацією структури, обчисленням енергій дефектів та зонної структури. • Виконувати <i>ab initio</i> молекулярну динаміку (AIMD) для моделювання атомних рухів при різних температурних режимах. • Інтегрувати результати MD та DFT (наприклад, через багатомасштабні підходи або машинно-навчені потенціали) для наукового аналізу матеріалів. • Інтерпретувати й критично оцінювати результати моделювання в контексті фізичних властивостей металів та сплавів. <p>Результати навчання:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Пояснювати фізичні принципи молекулярної динаміки та <i>ab initio</i> квантово-механічних методів. • Обирати та аргументовано застосовувати міжатомні потенціали та параметри моделювання для різних матеріальних систем. • Створювати атомні моделі металів і сплавів, включно зі структурами, дефектами, поверхнями та нанофрагментами. • Проводити чисельні розрахунки за допомогою LAMMPS, Quantum ESPRESSO та інших відповідних пакетів. • Аналізувати результати моделювання, оцінюючи енергію, сили, електронну структуру, дифузію та механічні властивості. • Критично оцінювати точність і достовірність комп'ютерних моделей шляхом порівняння з експериментальними даними та літературою. 	
Обсяг дисципліни	<p>Кількість кредитів – 3</p> <p>Загальна кількість годин – 90 год:</p> <ul style="list-style-type: none"> • лекції – 30 год; • практичні заняття – 10 год; • лабораторні роботи – 4 год; • самостійна робота – 44 год 	
Форма контролю	Залік	
Опис навчальної дисципліни		
Лекційні заняття		
№ з/п	Назви тем	К-ть годин
РОЗДІЛ 1. Вступ та теоретичні основи		

1	Тема 1. Вступ до комп'ютерного матеріалознавства. Історія, задачі, роль моделювання у фізиці твердого тіла. Класи методів – <i>ab initio</i> , молекулярна динаміка, Монте-Карло, континуальні підходи	2
2	Тема 2. Фундаментальні рівняння атомного рівня. Квантово-механічне описання електронної будови. Рівняння Шредінгера, апроксимації Борна-Оппенгеймера	2
3	Тема 3. Методи квантово-механічних розрахунків. Основи теорії функціонала густини (DFT), псевдопотенціали, базиси, енергетичні функціонали. Приклади програмних пакетів (VASP, Quantum ESPRESSO, ABINIT)	2
РОЗДІЛ 2. Описання міжатомної взаємодії		
4	Тема 4. Емпіричні потенціали для металів. Підходи EAM, MEAM, Finnis–Sinclair, Gupta. Параметризація, валідація, межі застосування	2
5	Тема 5. Побудова та масштабування потенціалів. Практика створення між-атомних потенціалів для сплавів Fe–Cr–Al, Ni–Fe, Ti–Al. Критерії перенормування та перевірки	2
РОЗДІЛ 3. Молекулярна динаміка		
6	Тема 6. Основи класичної молекулярної динаміки. Інтегратори, канонічні ансамблі (NVE, NVT, NPT), контроль температури та тиску	2
7	Тема 7. Реалізація MD у програмних пакетах. Приклад: LAMMPS – структура вхідних файлів, потенціали, розрахунок енергії, температури, сил	2
8	Тема 8. Моделювання фізичних властивостей металів. Розрахунок густини, коефіцієнтів теплового розширення, пружних констант, дифузії, кореляцій	2
9	Тема 9. Дефекти кристалічної структури та їх динаміка. Вакансії, дислокації, міжвузлові атоми, зернові межі. Дифузія і сегрегація в сплавах	2
РОЗДІЛ 4. Взаємодія атомів з середовищем		
10	Тема 10. Окиснення та корозія металів у MD-моделях. Врахування адсорбції, реакцій з O ₂ , H ₂ O, H. Приклади реактивних потенціалів (ReaxFF, COMB)	2
11	Тема 11. Поверхневі явища та наноструктури. Розрахунок поверхневої енергії, змочування, кластеризації. Вплив домішок	2
РОЗДІЛ 5. <i>Ab initio</i> динаміка та мультифізичні підходи		
12	Тема 12. <i>Ab initio</i> молекулярна динаміка (AIMD). Принципи Car-Parrinello MD, порівняння з класичною MD. Приклади застосування до металевих систем	2
13	Тема 13. Комбінування DFT і MD. Підхід QM/MM, методи машинного навчання для побудови потенціалів (ML potentials, neural network potentials)	2
РОЗДІЛ 6. Практичні застосування		
14	Тема 14. Моделювання структурних та кінетичних процесів у сплавах. Фазові переходи, утворення оксидних плівок, дифузія домішок, зміцнення. Приклади дослідницьких задач для PhD	2
15	Тема 15. Дослідження радіаційних пошкоджень матеріалів. Моделювання каскадних зміщень атомів, вивчення еволюції дефектної структури	2
Разом (год)		30

Практичні заняття		
№ з/п	Назви тем	К-ть годин
1	Геометрія кристалічної решітки. Елементи кристалографії	2
2	Спектральна густина нормальних коливань. Фоони. Теорії теплоємності кристалічної решітки	2
3	Статистики Максвелла-Больцмана, Фермі-Дірака, Бозе-Ейнштейна. Вироджені та невироджені системи. Особливості та описання електронного газу в металі. Ефективна маса. Кінетичне рівняння Больцмана	2
4	Установка пакетів LAMMPS та Quantum Espresso, структура та запуск сценаріїв	2
5	Автоматизація молекулярно-динамічного та ab initio моделювання, обробка одержаних результатів	2
Разом (год)		10
Лабораторні заняття		
№ з/п	Назви тем	К-ть годин
1	Визначення сталих кристалічної ґратки та енергії утворення дефектів у металах	2
2	Моделювання процесу деформації металевого сплаву та визначення межі міцності матеріалу	2
Разом (год)		4
Самостійна робота (опрацювання тем, які не входять до плану аудиторних занять)		
№ з/п	Назви тем	К-ть годин
1	Основи аналітичної механіки. Рівняння руху Лагранжа та Гамільтона	6
2	Розповсюдження хвиль у періодичних структурах. Обернена решітка.	4
3	Моделювання дифракції електронів за допомогою пакета LAMMPS	4
4	Зонна теорія твердих тіл. Типи хімічного зв'язку в кристалах	6
5	Нормальні коливання кристалічної решітки. Метод квазічастинок у фізиці твердого тіла	6
6	Особливості та описання електронного газу у твердих тілах. Ефективна маса. Кінетичне рівняння Больцмана	6
7	Основи статистичної термодинаміки. Термодинамічні потенціали. Співвідношення Максвелла	6
8	Визначення пружних сталих металів за допомогою Quantum Espresso	6
Разом (год)		44

ОЦІНЮВАННЯ ЗА ОСВІТНІМ КОМПОНЕНТОМ

Сумативне оцінювання

1.1. Для оцінювання очікуваних результатів навчання передбачено

№	Методи сумативного оцінювання	Бали / Вага у загальній оцінці	Дата складання
1	Практичні заняття	35 балів / 35%	Згідно графіка навчального процесу
2	Лабораторні заняття	30 балів / 30%	
3	Атестація (тест множинного вибору)	20 балів / 20%	
4	Виконання індивідуальних завдань	15 балів / 15%	

1.2. Критерії оцінювання

№	Вид діяльності	Оцінювання
1	Практичні заняття (5 занять)	Нарахування балів відбувається по шкалі: <ul style="list-style-type: none">• відмінні відповіді 6-7 балів;• добрі відповіді 5 балів;• задовільні, достатні відповіді 4 бали. Максимум: 35 балів
2	Лабораторні заняття (2 заняття)	Нарахування балів відбувається по шкалі: <ul style="list-style-type: none">• відмінні відповіді 13-15 балів;• добрі відповіді 10-12 балів;• задовільні, достатні відповіді 8-9 балів. Максимум: 30 балів
3	Атестація (тест множинного вибору) (2 тести)	Залежить від кількості вірних відповідей на тест: <ul style="list-style-type: none">• 90 – 100% правильних відповідей 5 балів;• 80 – 89% правильних відповідей 4 бали;• 70 – 79% правильних відповідей 3 бали;• 60 – 69% правильних відповідей 2 бали;• 50 – 59% правильних відповідей 1 бал;• <50% правильних відповідей 0 балів. Максимум: 20 балів
4	Виконання індивідуальних завдань (3 завдання)	Нарахування балів відбувається по шкалі: <ul style="list-style-type: none">• завдання виконано, аспірант добре орієнтується в матеріалі 5 балів;• завдання виконані з незначними помилками, аспірант не достатньо орієнтується в теоретичному матеріалі 3-4 бали;• завдання виконане не в повній мірі, аспірант не достатньо орієнтується в матеріалі 1-2 бали;• завдання не виконане або виконане не вірно 0 балів. Максимум: 15 балів

Політика оскарження результатів оцінювання

Здобувач має право оскаржити результати оцінювання, звернувшись до викладача протягом 3-х робочих днів після оголошення балів.

У разі незгоди з рішенням викладача, апеляція розглядається комісією згідно з “Положення про апеляцію результатів підсумкового контролю знань здобувачів вищої освіти в ПФ НАН України”.

Методичне забезпечення

1. Тексти та конспекти лекцій
2. Методичні розробки для аспірантів з практичних та лабораторних занять
3. Доступ та опрацювання он-лайн ресурсів

Рекомендована література Базова

1. Давидов О.С. Квантова механіка: підручник.– К.: ВД “Академперіодика”, 2012. – 708 с.
2. Вакарчук І.О. Квантова механіка: підручник / І.О.Вакарчук.– 4-те вид., доп.– Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. – 872 с.
3. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки: навч. посібник.– Київ, «Либідь», 2002. – 392 с.
4. Болеста І.М. Фізика твердого тіла. Львів: вид-во ЛНУ ім. І. Франка.– 2003.- 480 с.
5. Подопрігора Н.В. Фізика твердого тіла: навчальний посібник для студентів фізичних спеціальностей педагогічних університетів / Подопрігора Н.В., Садовий М.І., Трифонова О.М.– Кіровоград: ПП «Центр оперативної поліграфії «Авангард», 2014.– 416 с.
6. Поплавко Ю. М. Фізика твердого тіла: підручник. В 2-х томах. / Ю. М. Поплавко.– Київ :КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017.– Том 1: Структура, квазічастинки, метали, магнетики.– 415 с.
7. Курик М. В., Цмоць В. М. Фізика твердого тіла. – Київ: Вища школа.- 1984.- 247 с.
8. Єрмолаєв О.М., Рашба Г.І. Вступ до статистичної фізики і термодинаміки: Навчальний посібник.– Х.: ХНУ, 2004.– 516 с.

Інтернет-ресурси

9. <https://www.lammps.org>
10. <https://www.quantum-espresso.org>

Допоміжна

1. Kittel, Charles; McEuen, Paul (2018). Introduction to solid state physics (Global ed.,9th ed.). New Jersey: Wiley. p. 692. ISBN 978-1-119-45416-8. OCLC 1097548279
2. Проценко І.Ю., Шумакова Н.І., Овчаренко Ю.М. Фізика твердого тіла. Навчальний посібник. – Суми: Вид-во СумДУ, 2002, 76 с.

Академічна доброчесність

Здобувач вищої освіти повинен дотримуватись Етичного кодексу ученого України. Дотримання академічної доброчесності здобувачами освіти передбачає: самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання (для осіб з особливими освітніми потребами ця вимога застосовується з урахуванням їхніх індивідуальних потреб і можливостей); посилання на джерела інформації у разі використання ідей, розробок, тверджень, відомостей; дотримання норм законодавства про авторське право і сум права; надання достовірної інформації

про результати власної навчальної (наукової, творчої) діяльності, використані методики досліджень і джерела інформації.

У випадку порушення академічної доброчесності – реагування відповідно до «Положення про академічну доброчесність в ІПФ НАН України».

Політика використання ІІІ

Використання ІІІ регулюється «Положенням про академічну доброчесність наукових працівників та здобувачів вищої освіти в ІПФ НАН України». Зокрема, дозволяється використання ІІІ для пошуку ідей або редагування тексту, проте фінальний результат має бути оригінальним. Пряме копіювання згенерованого тексту без посилань вважатиметься порушенням академічної доброчесності.

Зворотній зв'язок

Наприкінці курсу проводиться анонімне анкетування здобувачів щодо якості викладання та відповідності змісту дисципліни їхнім очікуванням.