

Код та назва дисципліни	2-E5-104-2 Основи комп'ютерного матеріалознавства/ Fundamentals of Computational Materials Science
Рекомендується для галузі знань (спеціальності, освітньої програми)	Для спеціальностей E5, E6, G5
Кафедра	Експериментальної та теоретичної фізики
П.І.П. НПП (за можливості)	доцент, к.ф.-м.н. Кушнерьов Олександр Ігорович
Рівень ВО	Другий (магістерський)
Курс, семестр (в якому буде викладатись)	Курс: 1, семестр: парний
Мова викладання	Українська
Пререквізити (передумови вивчення дисципліни)	Знання з загальної фізики
Чому це цікаво/треба вивчати	- Комп'ютерне моделювання дозволяє досліджувати властивості матеріалів на атомному та молекулярному рівнях, що неможливо побачити "на око". - Дає змогу вивчати структуру, динаміку, фазові переходи, дефекти – без дорогих експериментів. - Замість тривалих циклів випробувань можна віртуально передбачати, які матеріали будуть найкращими для конкретних умов. Це економить час, ресурси і кошти в науці та промисловості. - Ви навчитесь використовувати методи чисельного моделювання: - молекулярна динаміка - метод Монте-Карло - перші принципи (DFT) - Отримаєте досвід роботи з науковим програмним забезпеченням (LAMMPS, VASP, Quantum ESPRESSO, тощо). - У сучасному матеріалознавстві активно застосовують машинне навчання для пошуку нових матеріалів і прогнозування їхніх властивостей. - Курси дають змогу почати опановувати data science у контексті матеріалів. - Фахівці, які поєднують матеріалознавство, фізику і комп'ютерні технології, затребувані в: - наукових установах - R&D-відділах компаній - високотехнологічній промисловості (аерокосмічній, електронній, енергетичній) - Комп'ютерне матеріалознавство – це частина глобального тренду "Materials by Design", коли нові матеріали створюють не шляхом випадкового підбору, а цілеспрямованого цифрового проєктування.
Перелік тем з дисципліни	Комп'ютерне моделювання у матеріалознавстві. Роль фізичних моделей у теоретичному дослідженні.

	• Квантовомеханічні моделі матеріалів. Методи моделювання ab initio. • Комп'ютерне моделювання фазових перетворень та фазових діаграм. Метод CALPHAD. • Проблема пошуку рівноважних станів. Суть алгоритму Метрополіса и алгоритму термостата. Періодичні граничні умови. Кінетичне моделювання за методом Монте-Карло. • Алгоритми Ейлера, Ейлера-Кромера та Верле числового розв'язування рівняння руху. Програми моделювання газу дисків або кульок. • Моделювання нанокристалів та нанооб'єктів. Програмний пакет LAMMPS. • Молекулярно-динамічне моделювання процесів деформації та руйнування матеріалів. • Молекулярно-динамічне моделювання фазових переходів та процесів кристалізації. Моделювання росту кристала. • Пакети програм для моделювання властивостей матеріалів VASP та ABINIT. • Основні функціональні можливості програмного пакету візуалізації та аналізу OVITO.
Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)	• Моделювати матеріали на різних рівнях • Використовувати атомістичні методи (молекулярна динаміка, DFT) для: прогнозування структури, енергії, механічних і термодинамічних властивостей; вивчення фазових переходів, дефектів, міжатомних взаємодій. • Будувати віртуальні експерименти, які доповнюють або замінюють реальні. • Розробляти нові матеріали, проектувати сплави, наноструктури, функціональні матеріали за допомогою чисельних методів. • Аналізувати і візуалізувати результати • Вміти працювати з науковим програмним забезпеченням (LAMMPS, VASP, Quantum ESPRESSO, тощо). • Використовувати алгоритми штучного інтелекту та машинного навчання в матеріалознавстві. • Застосовувати комп'ютерне моделювання в проектах, пов'язаних з: нанотехнологіями, енергетичними матеріалами, електронікою, тощо • Розуміти принципи відкритої науки та використання онлайн-баз даних матеріалів (Materials Project, AFLOW).
Чого можна навчитися (результати навчання)	Курс формує здатність застосувати ЕОМ для розв'язку задач росту кристалів, дослідження процесів плавлення та твердіння кристалічних та аморфних матеріалів, використовувати програмний комплекс для молекулярно-динамічного моделювання Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), використовувати на практиці отримані знання для дослідження властивостей кристалів, розробки нових матеріалів із заданими властивостями для створення нових приладів і технічних пристроїв

Інформаційне забезпечення	Конспект лекцій Комплект презентацій
Види навчальних занять (лекції, практичні, семінарські, лабораторні заняття тощо)	Лекції (36 год.), лабораторні заняття (18 год)
Вид семестрового контролю	Диф. залік
Максимальна кількість здобувачів	30

Декан факультету _____ Ігор Гомілко