

|                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|---------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Код та назва дисципліни                                             | 2-E5-104-2 Основи комп'ютерного матеріалознавства/<br>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                                        | <ul style="list-style-type: none"> <li>Комп'ютерне моделювання дозволяє досліджувати властивості матеріалів на атомному та молекулярному рівнях, що неможливо побачити "на око".</li> <li>Дає змогу вивчати структуру, динаміку, фазові переходи, дефекти – без дорогих експериментів.</li> <li>Замість тривалих циклів випробувань можна віртуально передбачати, які матеріали будуть найкращими для конкретних умов. Це економить час, ресурси і кошти в науці та промисловості.</li> <li>Ви навчитесь використовувати методи чисельного моделювання: <ul style="list-style-type: none"> <li>молекулярна динаміка</li> <li>метод Монте-Карло</li> <li>перші принципи (DFT)</li> </ul> </li> <li>Отримаєте досвід роботи з науковим програмним забезпеченням (LAMMPS, VASP, Quantum ESPRESSO, тощо).</li> <li>У сучасному матеріалознавстві активно застосовують машинне навчання для пошуку нових матеріалів і прогнозування їхніх властивостей.</li> <li>Курси дають змогу почати опановувати data science у контексті матеріалів.</li> <li>Фахівці, які поєднують матеріалознавство, фізику і комп'ютерні технології, затребувані в: <ul style="list-style-type: none"> <li>наукових установах</li> <li>R&amp;D-відділах компаній</li> <li>високотехнологічній промисловості (аерокосмічній, електронній, енергетичній)</li> </ul> </li> <li>Комп'ютерне матеріалознавство – це частина глобального тренду "Materials by Design", коли нові матеріали створюють не шляхом випадкового підбору, а цілеспрямованого цифрового проєктування.</li> </ul> |
| Перелік тем з дисципліни                                            | <ul style="list-style-type: none"> <li>Комп'ютерне моделювання у матеріалознавстві. Роль фізичних моделей у теоретичному дослідженні.</li> </ul>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |

|                                                                      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|----------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                      | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Квантовомеханічні моделі матеріалів. Методи моделювання ab initio.</li> <li>• Комп'ютерне моделювання фазових перетворень та фазових діаграм. Метод CALPHAD.</li> <li>• Проблема пошуку рівноважних станів. Суть алгоритму Метрополіса и алгоритму термостата. Періодичні граничні умови. Кінетичне моделювання за методом Монте-Карло.</li> <li>• Алгоритми Ейлера, Ейлера-Кромера та Верле числового розв'язування рівняння руху. Програми моделювання газу дисків або кульок.</li> <li>• Моделювання нанокристалів та нанооб'єктів. Програмний пакет LAMMPS.</li> <li>• Молекулярно-динамічне моделювання процесів деформації та руйнування матеріалів.</li> <li>• Молекулярно-динамічне моделювання фазових переходів та процесів кристалізації. Моделювання росту кристала.</li> <li>• Пакети програм для моделювання властивостей матеріалів VASP та ABINIT.</li> <li>• Основні функціональні можливості програмного пакету візуалізації та аналізу OVITO.</li> </ul>                                              |
| Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності) | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Моделювати матеріали на різних рівнях</li> <li>• Використовувати атомістичні методи (молекулярна динаміка, DFT) для: прогнозування структури, енергії, механічних і термодинамічних властивостей; вивчення фазових переходів, дефектів, міжатомних взаємодій.</li> <li>• Будувати віртуальні експерименти, які доповнюють або замінюють реальні.</li> <li>• Розробляти нові матеріали, проєктувати сплави, наноструктури, функціональні матеріали за допомогою чисельних методів.</li> <li>• Аналізувати і візуалізувати результати</li> <li>• Вміти працювати з науковим програмним забезпеченням (LAMMPS, VASP, Quantum ESPRESSO, тощо).</li> <li>• Використовувати алгоритми штучного інтелекту та машинного навчання в матеріалознавстві.</li> <li>• Застосовувати комп'ютерне моделювання в проєктах, пов'язаних з: нанотехнологіями, енергетичними матеріалами, електронікою, тощо</li> <li>• Розуміти принципи відкритої науки та використання онлайн-баз даних матеріалів (Materials Project, AFLOW).</li> </ul> |
| 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<br>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                                             |