



МЕЗОСКОПІЧНА ФІЗИКА ТА КОМП'ЮТЕРНЕ КОНСТРУЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ

Робоча програма освітнього компоненту (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	<i>13 Механічна інженерія</i>
Спеціальність	<i>132 Матеріалознавство</i>
Освітня програма	<i>Інжиніринг та комп'ютерне моделювання в матеріалознавстві</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>очна(денна), змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>5 (150 год)</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Екзамен, модульна контрольна робота (МКР)</i>
Розклад занять	http://rozklad.kpi.ua/
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: <i>д.ф-м.н, проф., Філатов О. В., tallman_ua@ukr.net</i> Практичні / Семінарські: <i>н. п.</i> Лабораторні: <i>д.ф-м.н, проф., Філатов О. В., tallman_ua@ukr.net</i>
Розміщення курсу	https://classroom.google.com/c/MjQ3OTA5MDQyNDI3

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Навчальна дисципліна "Мезоскопічна фізика та комп'ютерне конструювання матеріалів" відноситься до спеціальних дисциплін, яка вивчає закономірності зміни властивостей матеріалів, в тому числі металевих і на основі вуглецю, зі зміною їх розміру та дослідження таких фізичних властивостей за допомогою атомістичного моделювання. Дисципліна закріплює знання та формує навички, необхідні інженеру-матеріалознавцю для майбутньої наукової та практичної діяльності. По своїй суті цей курс є поєднанням професійної теоретичної і інструментально-практичної підготовки магістра-матеріалознавця.

Кредитний модуль крім теоретичної підготовки має інструктивно-прикладний характер з наданням практичних навичок роботи на ПК під час виконання циклу комп'ютерних практикумів, які охоплюють вивчення фізичних властивостей мезоскопічних систем за допомогою моделювання.

Дисципліна належить до дисциплін професійної та практичної підготовки (за вибором студентів) циклу професійної підготовки.

Предмет вивчення – фізичні властивості та використання мезоскопічних систем, методи їх дослідження, як експериментальні, так і комп'ютерне моделювання, для розв'язання задач професійної діяльності.

Особливість подання цієї проблематики студентам освітньої програми: подання матеріалу супроводжується багатьма прикладами використання нових властивостей матеріалів на мезоскопічному і нанометровому рівні в практиці і науці.

Метою кредитного модулю є формування у студентів компетентностей у відповідності до ОПП, а саме:

Код компетентності	Зміст компетентності
K3.01	Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
K3.02	Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
СК.01	Здатність виявляти та ставити проблеми в сфері матеріалознавства, приймати ефективні рішення для їх вирішення.
СК.02	Здатність планувати та проводити дослідження в сфері матеріалознавства у лабораторних та виробничих умовах на відповідному рівні з використанням сучасних методів і методик експерименту.
СК.03	Здатність розробляти нові методи і методики досліджень, базуючись на знанні методології наукового дослідження та особливості проблеми, що вирішується.
СК.05	Здатність до критичного аналізу та прогнозування характеристик нових та існуючих матеріалів, параметрів процесів їх отримання і обробки та використання у виробках (або у виробничих умовах).
СК.06	Здатність розуміти та використовувати математичні та числові методи моделювання властивостей, явищ та процесів.
СК.08	Здатність зрозуміло і недвозначно доносити власні знання, висновки та аргументацію з питань матеріалознавства і дотичних проблем до фахівців і нефахівців, зокрема до осіб, що навчаються.
СК.09	Здатність обґрунтовано здійснювати вибір технологій виготовлення, оброблення, випробування матеріалів і виробів, для конкретних умов експлуатації.
СК.13	Здатність розробляти та моделювати нові та вдосконалювати діючі технології термічної, хіміко-термічної, променевої обробки для забезпечення необхідних властивостей виробів.
СК.16	Здатність на основі аналізу поставленої задачі по дослідженню матеріалів, виробів та покриттів з них вибрати необхідні методи, методики та апаратний комплекс.

- **Основні завдання навчальної дисципліни.**
- Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі програмні результати навчання:

PH1	Розуміти та застосовувати принципи системного аналізу, причинно-наслідкових зв'язків між значущими факторами та науковими і технічними рішеннями в контексті існуючих теорій
PH2	Виявляти, формулювати і вирішувати матеріалознавчі проблеми і задачі
PH4	Застосовувати сучасні інформаційні технології та спеціалізоване програмне забезпечення для розв'язання складних задач матеріалознавства
PH6	Наукові навички у галузі інженерії для того, щоб успішно проводити наукові дослідження як під керівництвом так і самостійно
PH10	Навички презентації наукового матеріалу та аргументів для добре інформованої аудиторії
PH11	Використовувати сучасні методи для виявлення, постановки та розв'язування винахідницьких задач в галузі матеріалознавства
PH13	Планувати і виконувати експериментальні матеріалознавчі дослідження, обирати відповідні обладнання та методики, здійснювати статистичну обробку і статистичний аналіз результатів експериментів, обґрунтовувати висновки
PH15	Проектувати нові матеріали, розробляти, досліджувати та використовувати фізичні та математичні моделі матеріалів та процесів

PH 20	Розробляти і застосовувати новітні методи і методики досліджень матеріалів та процесів в галузі матеріалознавства з урахуванням особливості проблем, що вирішуються
PH 21	Застосовувати сучасні математичні методи, цифрові технології та спеціалізоване програмне забезпечення для розв'язання складних задач і проблем матеріалознавства
PH 24	Аналізувати та прогнозувати характер стійкості та руйнування матеріалів
PH 25	Знати фундаментальні основи нанотехнологій для створення та вирощання наноматеріалів
PH 27	Уміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для термодинамічних розрахунків

Після вивчення дисципліни студент може вирішувати наступні типові задачі діяльності:

01.ПФ.Е.03.ЗП.Н.05 - Самостійно, або в складі групи фахівців використовуючи відповідний математичний апарат, за допомогою спеціалізованого комп'ютерного забезпечення вміти проводити відповідні розрахунки при обробці результатів досліджень

01.ПФ.Е.04.ЗР.Р.08 - Працюючи самостійно, або в складі групи фахівців, використовуючи відповідне програмне забезпечення та експлуатаційні параметри й фізико-механічні характеристики матеріалів за допомогою віртуального моделювання та матеріалознавчого аналізу вміти виявити причини несправності непрацюючих деталей, вузлів, механізмів чи систем

02.ПФ.Е.17.ПР.Р.24 - Самостійно використовуючи нормативно-технічну документацію, патентний фонд та інші джерела інформації за допомогою відповідного програмного забезпечення вміти розробляти нові й удосконалювати діючі методи проведення лабораторних аналізів, випробувань і досліджень, надавати допомогу з їх освоєння.

02.ПФ.Д.08.ЗР.Р.12 - Самостійно використовуючи інформаційні технології та прикладне програмне забезпечення за допомогою відповідних технологій вміти розробити та налагодити комп'ютерні програми

08.ПФ.С.01.ПП.Н.02 - У складі групи фахівців використовуючи новітні методики за допомогою відповідних приладів та устаткування вміти визначати хімічний склад та структуру матеріалів у відповідності до теми досліджень

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

– дисципліна базується на курсах: «Інформатика, обчислювальна техніка, програмування та числові методи», «Фізика» (шифри блоків змістових модулів 02.02.03, 02.02.05, 02.02.06, 02.02.14 - 02.02.18), «Вища математика» (шифри блоків змістових модулів 02.01.01 – 02.01.06), «Фізика металів» (шифри блоків змістових модулів 03.24.02, 03.24.07, 03.24.14), «Кристалографія, кристалохімія та мінералогія» (шифри блоків змістових модулів 03.07.01, 03.07.02), «Фізична хімія» (шифри блоків змістових модулів 02. 06. 01 – 02.06.03).

– дисципліна є базовою для виконання дипломної роботи, якщо вона пов'язана з використанням або дослідженням наноструктурованих, мезоскопічних матеріалів або моделюванням їх властивостей.

3. Зміст навчальної дисципліни

Вступ.

Розділ 1. Молекулярно-динамічне моделювання

Тема 1.1. Загальні поняття про МД, потенціали

Тема 1.2. Практична реалізація алгоритмів МД

Контрольна робота (частина 1)

Розділ 2. Мезоскопічна фізика

Тема 2.1. Основні поняття мезофізики

Тема 2.2 Методи приготування і дослідження мезоскопічних зразків

Тема 2.3. Використання мезоскопічних об'єктів в електроніці

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література

1. О. В. Філатов. Мезоскопічна фізика та моделювання матеріалів: методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт для студентів напряму підготовки 6.050403 „Інженерне матеріалознавство”. – К.: НТУУ „КПІ”, 2015. - 28 с.

https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/15231/1/MR_Lab_praktykum.pdf

2. Назаров О.М., Нищенко М.М. Наноструктури та нанотехнології: Навчальний посібник.- К.: НАУ, 2010.- 256с.

3. D. C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation, Cambridge university press, 2004.

4. June Gunn Lee. Computational Materials Science. AN INTRODUCTION. London New York CRC Press is an imprint of the Taylor & Francis Group, 2017, 351 p.

Інформаційні ресурси

5. XMD - Molecular Dynamics for Metals and Ceramics <http://xmd.sourceforge.net/>

6. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator <http://lammps.sandia.gov/>

7. Molecular visualization

program: <https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>

8. Інтерактивне ознайомлення з МД моделюванням: <http://physics.weber.edu/schroeder/md/>

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття (36 годин, 18 занять)

№ з/п	Назва теми лекції та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів, посилання на літературу та завдання на СРС)
1	Лекція 1. Задачі, розв'язувані МД. Загальний опис алгоритму моделювання методом класичної МД. Література: [5] с.14-19; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
2	Лекція 2. Мікроканонічний ансамбль (NVE). Канонічний ансамбль (NVT). Ізотермічно - ізобарний ансамбль (NPT). Література: [5] с.549-554;

	Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
3	Лекція 3. Потенціали для МД моделювання. Література: [6]; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
4	Лекція 4. Вибір кроку за часом. Література: [5] с.557-561; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
5	Лекція 5. Граничні умови. Багатомасштабні підходи. Література: [5] с.24-40; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
6	Лекція 6. Практична реалізація алгоритмів МД. Література: [5] с.36-38; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
7	Лекція 7. Визначення коефіцієнтів дифузії методом МД. Вибір початкових умов. Література: [1] с.23-27 Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
8	Лекція 8. Визначення коефіцієнтів дифузії за різних механізмів. Література: [1] с.23-27; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
9	Лекція 9. Теплові властивості наночастинок. Література: [1] с.15-17; [5] с.569-597 Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Підготуватися до контрольної роботи. Опанувати конспект лекції
10	Лекція 10. Модульна контрольна робота (частина 1) Література: Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Підготуватися до контрольної роботи. Опанувати конспект лекції
11	Лекція 11. Характерний розмір об'єктів, досліджуваних у мезофізиці. Приклад прояву мезоскопічних ефектів. Література: [2] с.12-16; [3] с.7-12; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
12	Лекція 12. Квантові ями, точки, нитки. Література: [2] с.21-32; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
13	Лекція 13. Як створюються квантові структури. Самозбирання. Література: [2] с.32 - 42; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
14	Лекція 14. Принцип створення потенційної ями в напівпровідниках. Література: [2] с.22 - 26; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
15	Лекція 15. Літографічний спосіб. Література: [2] с.136 - 141; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
16	Лекція 16. Поняття про спітроніку. Література [2] с.30-33. Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Опанувати конспект лекції
17	Лекція 17. Вуглецеві наноструктури Література: [2] с.69- 118; Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Підготуватися до контрольної роботи. Опанувати конспект лекції
18	Лекція 18. Модульна контрольна робота (частина 2) Література:

	Завдання на самостійну роботу студентів (СРС). Підготуватися до контрольної роботи. Опанувати конспект лекції
--	--

Комп'ютерні практикуми (лабораторні роботи)

Мета комп'ютерних практикумів полягає у формуванні у студентів практичних навичок і умінь роботи зі спеціалізованим програмним забезпеченням **(36 годин, 18 занять)**

№ з/п	Назва комп'ютерного практикуму	Кількість ауд. годин
1,2	Налаштування програмного забезпечення, безпека роботи на комп'ютері Мета роботи: Встановити програми XMD та VMD. Основна література: [1] – с. 1-7.	4
3,4	Лабораторна робота 1. Моделювання кристалічної будови металів або сплавів з точковими дефектами в програмі XMD і візуалізація її в програмі VMD. Мета роботи: Опанувати методику роботи в програмах XMD та VMD. Набути практичного досвіду моделювання кристалічної будови матеріалів з вакансіями та домішковими атомами. Основна література: [1] – с. 7-12. Завдання на СРС. Підготувати протокол. Опанувати теоретичні відомості. Виконати необхідні розрахунки. Зробити висновки	4
5,6	Лабораторна робота 2. Температурна залежність амплітуди коливань атомів у вузлах кристалічної ґратки. Мета роботи: Опанувати методику розрахунку амплітуди теплових коливань. Набути практичного досвіду моделювання температурної залежності амплітуди гармонічних коливань атомів у вузлах кристалічної ґратки. Основна література: [1] – с. 12 - 15 Завдання на СРС. Підготувати протокол. Опанувати теоретичні відомості. Виконати необхідні розрахунки. Зробити висновки	4
7,8	Лабораторна робота 3. Вплив розміру наночастинки на теплові властивості матеріалу Мета роботи: Опанувати методику розрахунку рівня теплових властивостей матеріалу. Набути практичного досвіду моделювання їх зміни в залежності від розміру зерен матеріалу. Основна література: [1] – с. 15-17 Завдання на СРС. Підготувати протокол. Опанувати теоретичні відомості. Виконати необхідні розрахунки. Зробити висновки	4
9,10	Лабораторна робота 4. Вивчення структури металів за допомогою функції радіального розподілу атомів. Мета роботи: Опанувати методику розрахунку функції радіального розподілу атомів. Набути практичного досвіду моделювання структури металів за допомогою ФРРА. Основна література: [1] – с. 17-20 Завдання на СРС. Підготувати протокол. Опанувати теоретичні відомості. Виконати необхідні розрахунки Зробити висновки	4

11, 12, 13, 14	Лабораторна робота 5. Структурні зміни в нанокристалі при деформації розтягу Мета роботи: Опанувати методику розрахунку параметрів напружено-деформованого стану при одновісному розтязі. Набути практичного досвіду моделювання структурних змін в металах при випробуваннях на розтяг. Основна література: [1] – с. 20-23 Завдання на СРС. Підготувати протокол. Опанувати теоретичні відомості. Виконати необхідні розрахунки. Зробити висновки	8
15, 16, 17, 18	Лабораторна робота 6. Знаходження коефіцієнту самодифузії в металах Мета роботи: Опанувати методику розрахунку коефіцієнтів самодифузії в металах. Набути практичного досвіду моделювання процесу масо переносу. Основна література: [1] – с. 23-27 Завдання на СРС. Підготувати протокол. Опанувати теоретичні відомості. Виконати необхідні розрахунки. Зробити висновки	8

6. Самостійна робота студента

Вид самостійної роботи студента	Кількість робіт	Норма часу на роботу, год.	Термін часу, год.
Засвоєння додаткових до лекцій питань	8	1	8
Підготовка до лабораторних робіт та опрацювання результатів	9	4	36
Підготовка до МКР	1	7	7
Підготовка до екзамену	1	30	30
		Всього	81

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

1. При очній формі навчання лекційні заняття проводяться в аудиторіях згідно розкладу занять. При змішаній формі навчання лекційні заняття можуть проводитись дистанційно, для цього використовується платформа ZOOM, Meet і слухачу необхідно організувати собі таку можливість самостійно. Рекомендується використовувати матеріали, розміщені викладачем в Google Classroom (за посиланням <https://classroom.google.com/u/1/c/MjQ3OTA5MDQyNDI3>).

2. При очній формі навчання лабораторні роботи проводяться в комп'ютерному класі також згідно розкладу занять, в якому необхідно дотримуватись правил техніки безпеки. Допускається використання власних ноутбуків. При змішаній формі навчання лабораторні роботи можуть проводитись дистанційно і слухачу необхідно самостійно забезпечити себе ПК, доступом до інтернету та встановити необхідне програмне забезпечення.

3. У разі запізнення на заняття слухачу необхідно приєднатись до нього як змога менше заважаючи іншим і процесу проведення заняття. У випадку часткового або повного пропуску лекційних занять слухачу необхідно дізнатись пропущені питання і опрацювати їх самостійно. У випадку пропуску лабораторних робіт слухачу необхідно домовитись з викладачем і відпрацювати їх, наприклад на консультаціях (заплановані в об'ємі 1 пари на тиждень).

4. Користуватись мобільними телефонами на парах заборонено, як виняток – з дозволу викладача. Звук на мобільних телефонах повинен бути вимкнений. Телефонні розмови під час

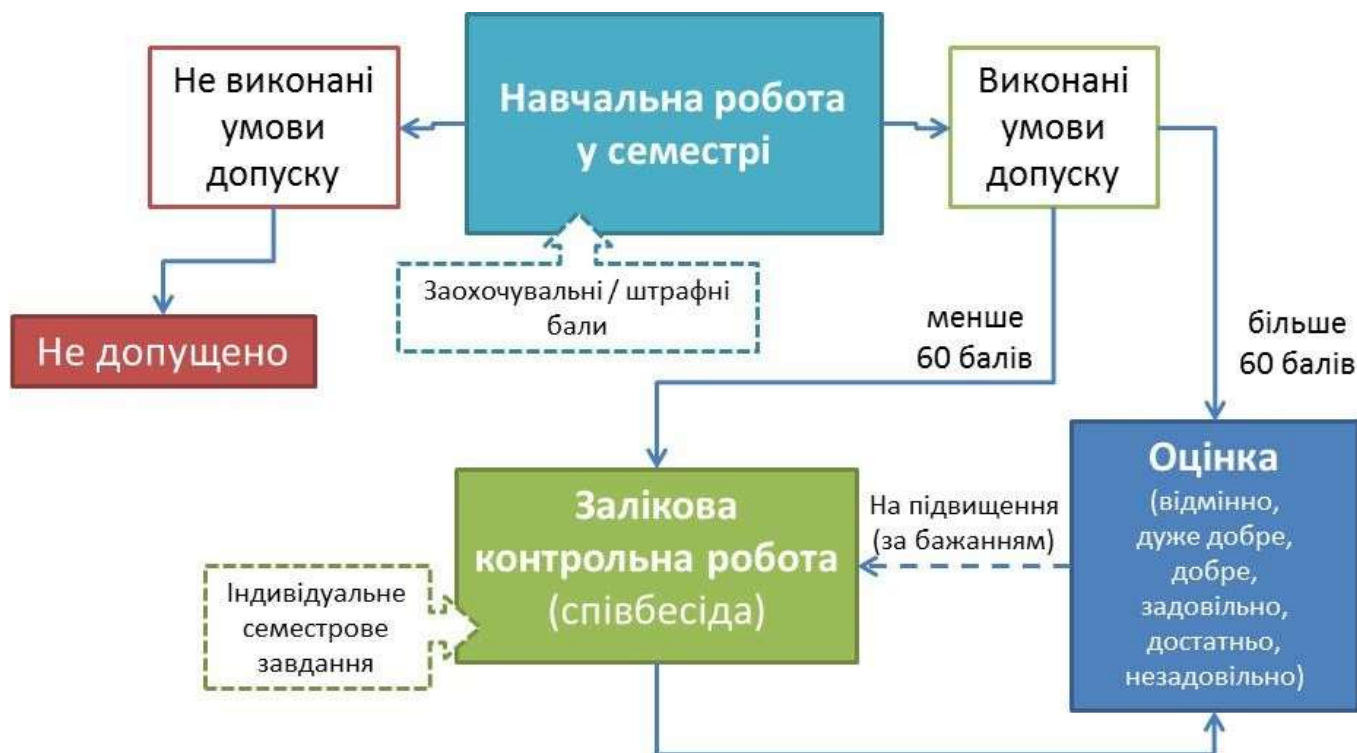
аудиторних занять неприпустимі, у разі невідкладних дзвонків слухачу необхідно вийти із аудиторії і провести розмову там.

5. Контрольні роботи та залік проводяться за окремими правилами які викладач повинен довести до слухачів на попередньому занятті і які залежать від форми проведення навчання.

6. В усіх інших питаннях слухач повинен керуватися Правилами внутрішнього розпорядку КПІ ім. Ігоря Сікорського та Положенням про академічну доброчесність КПІ ім. Ігоря Сікорського. Під час контрольних робіт, лабораторних робіт та заліку студент може користуватися будь-якою літературою і доступом до Інтернет. Під час заліку студент може використати не більше двох перерв для обдумування відповідей на питання.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Оцінювання результатів навчання слухачів відбувається за схемою:



Контрольні заходи:

1. Поточний контроль: захист лабораторних робіт.
2. Календарний контроль: МКР, провадиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: екзамен.

Таблиця видів контролю та максимальної кількості балів за них.

Вид контролю	Кількість	Максимальна кількість балів на 1	Максимальна кількість балів
Захист лабораторних робіт	8	5	40
МКР	2 частини	10	20
Екзамен	1	40	40
Всього			100

Оцінювання захисту лабораторних робіт:

Критерії	Бали
до оформлення роботи немає зауважень, надані правильні відповіді при захисті роботи	5

є неприципові зауваження до оформлення роботи та/або дані відповіді з помилками при захисті роботи	3-4
є принципові зауваження до оформлення роботи та/або не дані відповіді (дані неправильні) при захисті роботи	робота не здана
несвоєчасний захист роботи	-1

МКР відбувається у вигляді проходження тесту який складається з 10 питань. За кожну правильну відповідь студент отримує один бал. Якщо сумарна кількість правильних відповідей менше 6, МКР вважається не зданою, при цьому бали не нараховуються.

Умовою допуску до заліку є виконання всіх лабораторних робіт, здані всі частини МКР. Семестровий рейтинг можна підвищити за рахунок заохочувальних балів (максимум на 10) шляхом виконання додаткових індивідуальних завдань (видає викладач).

Здобувачі, які виконали всі умови допуску до заліку та мають рейтингову оцінку 60 і більше балів, отримують відповідну до набраного рейтингу оцінку без додаткових випробувань.

Зі здобувачами, які виконали всі умови допуску до заліку та мають рейтингову оцінку менше 60 балів, а також з тими здобувачами, хто бажає підвищити свою рейтингову оцінку, на останньому за розкладом занятті з дисципліни в семестрі викладач проводить семестровий контроль у вигляді залікової контрольної роботи або співбесіди.

Після виконання залікової контрольної роботи, якщо оцінка за залікову контрольну роботу більша ніж за рейтингом, здобувач отримує оцінку за результатами залікової контрольної роботи. Якщо оцінка за залікову контрольну роботу менша ніж за рейтингом, застосовується «жорстка» РСО – попередній рейтинг здобувача скасовується і він отримує оцінку з урахуванням результатів залікової контрольної роботи.

На екзамені слухачу необхідно дати розгорнуті відповіді на 4 питання, кожне з яких оцінюється за наступними критеріями:

Критерії	Бали
правильна відповідь, можливо з несуттєвими зауваженнями, повнота відповіді більша 90%	9-10
є не принципові зауваження, повнота відповіді більша 75%	7-8
є принципові зауваження, але можна вважати що суть питання розкрита, повнота відповіді не менша 60%	6
суть питання не розкрита та/або повнота відповіді менша 60%	0
не перше перескладання	-1

У випадку коли сумарна оцінка за залік менше 24 балів, залік вважається не зданим, при цьому бали не нараховуються. Для перескладання екзамену є дві додаткові спроби.

Отриманні слухачем рейтингові бали переводять в університетські оцінки за шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік питань, які виносяться на захист лабораторних робіт і МКР (яка складається з двох частин) наведений в додатках до силабусу. Питання на семестровий контроль складаються із питань для захисту лабораторних робіт і МКР. Можлива заміна частини запропонованих комп'ютерних

практикумів виконанням інших практикумів в інших програмних пакетах за погодженням з викладачем.

Засоби змішаного навчання. При вивченні даної дисципліни використовуються навчальні матеріали, методичка https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/15231/1/MR_Lab_praktykum.pdf в електронному вигляді, які розміщені в classroom.google за посиланням <https://classroom.google.com/u/1/c/MjQ3OTA5MDQyNDI3>. Такий підхід забезпечує можливість віддаленого доступу, тобто з навчальних аудиторій, гуртожитка, за межами Києва тощо.

Спілкування з викладачем через Telegram, Viber, електронну пошту.

Перелік запитань до контрольних робіт та семестрового контролю наведено в Додатку.

Робочу програму освітнього компоненту (силабус):

Складено: д. ф-м. н., проф. Філатовим Олександром Валентиновичем

Ухвалено кафедрою Фізичного матеріалознавства та термічної обробки НН ІМЗ ім. Є.О. Патона (протокол № 32 від 21 червня 2024 р.)

Погоджено Методичною комісією НН ІМЗ ім. Є.О. Патона (протокол № 12 від 28 червня 2024 р.)

Перелік питань по курсу МЕЗОСКОПІЧНА ФІЗИКА ТА КОМП'ЮТЕРНЕ КОНСТРУЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ

Питання до семестрового контролю з дисципліни.

- Різновиди методів моделювання
- Задачі, розв'язувані молекулярною динамікою.
- Загальний опис алгоритму моделювання методом класичної МД.
- Мікроканонічний ансамбль (NVE)
- Канонічний ансамбль (NVT)
- Ізотермічно - ізобарний ансамбль (NPT)
- Потенціали для МД моделювання
- Емпіричні потенціали
- Парні потенціали
- Багаточасткові потенціали
- Неемпіричні (Ab-initio) методи
- Гібрид QM/MM
- Великочасткові і спрощені представлення
- Алгоритми короткодіючої взаємодії
- Алгоритми дальнодіючої взаємодії
- Стратегії распаралелювання
- Основне програмне забезпечення для МД
- Супутнє програмне забезпечення
- Вибір кроку за часом
- Граничні умови
- Практична реалізація алгоритмів МД
- Визначення коефіцієнтів дифузії в МД
- Вибір початкових умов в МД
- Вибір числа часток в досліджуваній системі
- Визначення функції радіального розподілу атомів
- Зміщення атомів поблизу точкового дефекту
- Дослідження теплових властивостей нанокристалів
- Дослідження фазових переходів наночастинок

- Співвідношення невизначеностей
- Тунельний ефект
- Спін електрона
- Максимальна частота коливань атомів у металі.
- Класичні і квантові закони руху електронів
- Як створюються квантові структури
- Самозборка.
- Квантові ями, точки, нитки.
- Застосування квантових напівпровідникових наноструктур в електроніці
- Резонансний тунельний діод
- Лазери на квантових ямах
- Флуктуація енергії малих часток
- Характерний розмір об'єктів, досліджуваних у мезофізиці.
- Приклад прояву мезоскопічних ефектів.
- Методи приготування мезоскопічних зразків.
- Методи створення періодичних структур.

- Межа роздільної здатності літографічного способу.
- Чому квантові точки називають «штучними атомами».
- Скануючий тунельний мікроскоп
- Атомний силовий мікроскоп.
- Характерний масштаб електронних енергій у квантових структурах.
- Принцип створення потенційної ями в напівпровідниках.
- Приклади застосування квантових структур.
- Чому розмір квантової крапки впливає на спектр її випромінювання.
- Флуктуації енергії наночастинок.