

ОПИС/Сілабус дисципліни/модуля

Коротка назва університету / підрозділу дата (місяць / рік)	НУ «Запорізька політехніка» 08/2020
Назва модулю / дисципліни	Основи моделювання наносистем
Код:	ОМНС

Викладачі	Підрозділ університету
Корніч Григорій Володимирович	Кафедра системного аналізу та обчислювальної математики

Рівень навчання (ВА/МА)	Рівень модулю/дисципліни (номер семестру)	Тип модулю/дисципліни (обов'язковий / вибірковий)
Другий (магістрський)	1	Вибірковий

Форма навчання (лекції / лабораторні / практичні)	Тривалість (тижнів/місяців)	Мова викладання
лекції / лабораторні	14	Українська

Зв'язок з іншими дисциплінами	
Попередні: – Математичні основи та методи системного аналізу, загальна фізика, методи теоретичної фізики, програмування та алгоритмічні мови;	Супутні (якщо потрібно): –

ECTS (Кредити модуля)	Загальна кількість годин	Аудиторні години	Самостійна робота
3	90	30	60

Мета навчання дисципліни (модуля): компетенції надбані внаслідок вивчення дисципліни (модуля)

- Формування у студентів уявлень про сучасні методи моделювання наносистем. Континуальні методи, що засновані на рівняннях масоперенесення; атомно-дискретні ймовірнісні методи Монте Карло; атомно-дискретні методи молекулярної динаміки, що засновані на класичних рівняннях руху атомів. Загальна структура та взаємний зв'язок методів моделювання наносистем.
- Моделювання взаємодії енергетичних атомних частинок з твердотільними поверхнями, основні уявлення теорії лінійних зіткнувальних каскадів атомів, розуміння “лінійності” та роль відповідного наближення для здобуття реальних результатів.
- Розуміння стану і проблематики використання штучних нейронних мереж для моделювання міжатомних взаємодій.
- Моделювання атомних нанокластерів та утворення тонких плівок. Переваги та недоліки різних методів моделювання. Поняття та актуальність прискорених методів молекулярної динаміки, масштабування модельного часу.
- Особливості кластерного аналізу великих масивів результатів моделювання, ідентифікація структури результуючих даних.
- Розуміння можливості адаптації та альтернативного застосування методів моделювання наносистем до моделювання систем іншої природи.

Результати навчання в термінах компетенцій	Методи навчання (теорія, лабораторні, практичні)	Контроль якості (письмовий екзамen, усний екзамen, звіт)
– вільно володіти державною мовою та спілкуватися іноземною мовою; – здатність генерувати нові ідеї, самостійно здобувати за допомогою інформаційних технологій, використовувати в практичній діяльності фундаментальні фізичні закони, нові знання і вміння, безпосередньо пов'язані з методами моделювання нанорозмірних об'єктів, уявляти структурний взаємозв'язок цих методів; – здатність виконувати аналітичні викладки, чисельні розрахунки та програмування окремих фрагментів цих методів у галузі професійної діяльності, ефективно розв'язувати задачі та поставленні завдання, системно аналізувати здобуті результати; – розуміти універсальність, здатність до адаптації і застосування засвоєних методів моделювання наносистем для розв'язання задач іншої природи.	Використання у лекціях та на лабораторних заняттях Теоретичні знання, отриманні під час лекції та консультацій Самостійне та під керівництвом викладача рішення задач Самостійне та під керівництвом викладача рішення задач	Окремого оцінювання не передбачено Окреме оцінювання не проводиться Оцінюються під час модульного контролю та екзамену Окреме оцінювання не проводиться

Теми курсу	Аудиторні заняття						Час та завдання на самостійну роботу	
	Лекцій	Консультацій	Семінарів	Практичні заняття	Лабораторні роботи	Загалом, годин	Самостійна робота	Завдання
Вступ. Тема 1. Нанорозмірні системи. Сутність моделювання. Континуальне та атомно-дискретне моделювання. Транспортні та дифузійно-подібні рівняння масоперенесення, метод Монте Карло, метод молекулярної динаміки.	2					10	8	
Тема 2. Основи теорії лінійних зіткнувальних каскадів атомів. Лінійність, як загаль-	2					10	8	

ний підхід, що спрощує. Пружні та непружні втрати енергії первинних бомбардуючих частинок у мішені. Коефіцієнти розпилення та відбиття. Кластерний аналіз кутових особливостей іонного розпилення кристалів, а саме плям Венера.								
Тема 3. Континуальні рівняння масоперенесення. Іонне перемішування, дифузія по радіаційним вакансіям та міжвузловим атомам. Прямий та зворотній ефекти Кіркендала. Розмірні дефекти. Застосування рівнянь таких типів в задачах іншої природи.	2				4	14	8	Лабораторна робота 1
Тема 4. Методи Монте Карло, моделювання термічно-активованих процесів методом Монте Карло. Ідеологія підходу Монте Карло до розв'язання задач іншої природи.	2				4	14	8	Лабораторна робота 2
Тема 5. Метод класичної молекулярної динаміки. Парні та багаточастинкові потенціали міжатомної взаємодії. Потенціали притягання та відштовхування. Штучні нейронні мережі. Чисельні методи та умови розв'язання рівнянь руху атомів.	2					11	9	
Тема 6. Метод класичної молекулярної динаміки (продовження). Періодичні граничні умови та кібернетичні термостати. Моделювання температурних кристалів. Метод списку "найближчих сусідів".	2				6	17	9	Лабораторна робота 3
Тема 7. Моделювання плоских поверхонь, атомних кластерів та тонких плівок. Континуальний та атомно-дискретні підходи. Кластерний аналіз: ідентифікація особливостей розсіювання, розпилення, плавлення пове-	2	2				14	10	

рхневих/вільних нанокластерів. Поняття прискорених методів молекулярної динаміки та їх актуальність. Масштабування модельного часу.								
Усього годин	14	2			14	90	60	

Стратегія оцінювання	Вага, %	Термін	Критерії оцінювання
Модульна конт. робота	65	впродовж семестру	Письмове опитування
Виконання лабораторних робіт	15		Лабораторна робота з тем 1-3
	10		Лабораторна робота з теми 4
	10		Лабораторна робота з тем 5-6
Складання екзамену	90 – 100	після модулю	відмінно
	85-89		добре
	75-84		
	70-74		задовільно
	60-69		
	35-59		незадовільно з можливістю повторного складання
	0-34		незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

Автор	Рік	Назва	інформація видання	Видавництво / он-лайн доступ
Обов'язкова література				
Г.В. Корніч	2019	Поверхня твердого тіла при бомбардуванні низькоенергетичними іонами: моделювання і аналіз атомної системи.	Монографія	Запоріжжя: Національний університет “Запорізька політехніка” – 2019.- 302 с. ISBN 978-617-529-240-2
В.Г. Дубровский	2009	Теория формирования эпитаксиальных наноструктур	Монографія	М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.- 352 с. ISBN 978-5-9221-1069-3
Г.В.Корніч, Н.І. Біла, А.І. Денисенко, О.О. Подковаліхіна	2015	Чисельний аналіз систем з розподіленими параметрами інструментами MATLAB	Навчальний посібник	Запоріжжя, Вид. “Кругозор”, 2015. – 128 с. ISBN 978-966-2602-91-III
Укл.: Г.В. Корніч, О.В. Кривцун, О.О.Подковаліхіна, Д.В.Ширококорд.	2019	Основи моделювання наносистем	Методичні вказівки	Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 18 с.
Додаткова література				
Р. Бериш, П. Зигмунд, М.Робинсон,	1984	Распыление твердых тел ионной бомбарди-	Тематический	Пер. с англ./ Под ред. Р. Бериша.- Москва:

Х.Андерсен та ін.		ровкой. Выпуск I.	сборник	Мир.- 1984. – 336 с.
Р. Бериш, Г. Бетц, Г. Венер та ін.	1986	Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск II.	Тематический сборник	Пер. с англ./ Под ред. Р. Бериша.- Москва: Мир.- 1986. – 486 с.
В. Экштайн	1995	Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела	Монография	Пер. с англ.- Москва: Мир.- 1995.- 320 с.
J.M. Haile	1992	Molecular dynamics simulation - elementary methods	Учебное пособие	New York: Wiley-Interscience.1992-386p.
Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G.	2020	Evolution of the Ni-Al Janus-like clusters under the impacts of low-energy Ar and Ar13 projectiles	Період. журнал, Вид. Elsevier	Materials Today Commun.-23 101107-12. https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101107
Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G.	2019	Formation of the core-shell structures from bimetallic Janus-like nanoclusters under low-energy Ar and Ar13 impacts: MD study	Періодичний журнал, Вид. Elsevier	Computational Materials Science.- 159(3) 2019 110-119. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.002
Shyrokorad D.V., Kornich G.V.	2016	A Neural Network Method for Restoring the Initial Impurity Concentration Distribution from Data of Ion Sputter Depth Profiling	Періодичний журнал, Вид. Springer	Technical Physics Letters. V.42(7) – 2016.-720-722. http://doi.org/10.1134/S1063785016070282 .