

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

Затверджено
на засіданні кафедри фізики металів
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 7 від 26 червня 2023 р.)

Завідувач кафедри  проф. Степан МУДРИЙ

Силабус з навчальної дисципліни
«Комп'ютерна інженерія матеріалів різної розмірності»,
що викладається в межах
ОПП «Комп'ютерні технології в прикладній фізиці»
першого (бакалаврського) рівня вищої освіти
для здобувачів зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

Львів 2023

Назва дисципліни	Комп'ютерна інженерія матеріалів різної розмірності
Адреса викладання дисципліни	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, м. Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Фізичний факультет, кафедра фізики металів
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань - 10 Природничі науки Спеціальність - 105 Прикладна фізика та наноматеріали
Викладачі дисципліни	Штаблавий Ігор Іванович, д.ф.-м.н., професор кафедри фізики металів
Контактна інформація викладачів	ihor.shtablavyi@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/shtablavyj-i-i
Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через MS Teams. Для погодження часу он-лайн консультацій слід писати на електронну пошту викладача або дзвонити.
Сторінка дисципліни	https://physics.lnu.edu.ua/course/kompiuterna-inzheneriia-materialiv
Інформація про дисципліну	«Комп'ютерна інженерія матеріалів різної розмірності» є нормативною дисципліною для підготовки бакалавра за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали», що викладається в сьомому семестрі в обсязі трьох кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація дисципліни	Курс розроблено таким чином, щоб надати учасникам необхідні знання, уміння, навички, загальні та фахові компетентності для розв'язання комплексних проблем у галузі комп'ютерного моделювання нових матеріалів на атомному рівні. Тому у курсі представлено як теоретичний матеріал, необхідний для розвитку навичок комп'ютерного моделювання матеріалів різної розмірності, так і лабораторні роботи, які потрібні для отримання практичних навичок пов'язаних з моделюванням матеріалів методом молекулярної динаміки.
Мета та цілі дисципліни	Метою даної дисципліни є формування в студентів глибоких знань про комп'ютерні методи дослідження та інженерії матеріалів. Основна увага звертається на з'ясування питань зв'язку атомної структури та властивостей матеріалів в різних агрегатних станах. Метою лабораторних робіт з комп'ютерної інженерії матеріалів різної розмірності є дати можливість практично освоїти методи дослідження структури та властивостей металів методами комп'ютерного моделювання. Цілі: Навчити студентів використовувати засоби програмування для побудови тривимірних атомних конфігурацій; самостійно моделювати структуру матеріалів методами молекулярної динаміки, Монте-Карло та реконструкції атомної будови за даними дифракційних експериментів; здійснювати аналіз побудованих моделей та розрахунок властивостей матеріалів на їхній основі.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 1. Wm. G. Hoover Molecular Dynamics Springer-Verlag, 1986, 145 p. 2. D. C. Rapaport The art of molecular dynamic simulation Cambridge university press, 1995, 400 p. 3. M. P. Allen, D. J. Tildesley Computer simulations of liquids, Clarendon Press, Oxford, 1997, 385 p. 4. M. E. J. Newman, G. T. Barkema MonteCarlo methods in statistical physics Oxford: Clarendon Press 2001, 494 p. 5. Michael Rieth Nano-Engineering in Science and Technology. An introduction to the world of nano-design, World Scientific Publishing, 2003, 163 p.

	<p>6. J. Guo, P. Ji, L. Jiang, G. Lin Y. Meng, Femtosecond laser sintering Al nanoparticles: A multiscale investigation of combined molecular dynamics simulation and two-temperature model // Powder Technology, 407, 117682. 2022.</p> <p>Допоміжна:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Sidney Yip Handbook of materials modeling. –Springer, 2005, 1372 p. 2. K. Peng, H. Huang, H. Xu, Y. Kong, L. Zhu, Z. Liu. A molecular dynamics study of laser melting of densely packed stainless steel powders. – International Journal of Mechanical Sciences, 243, 108034 2023. <p>Інформаційні ресурси:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (офіційний сайт) https://www.lammps.org/ 2. LAMMPS Documentation (30 Jul 2021 version) https://docs.lammps.org/Manual.html 3. Wikipedia. http://www.wikipedia.org
Тривалість курсу	Один семестр
Обсяг курсу	90 годин, з яких 48 годин аудиторних занять, з них 16 годин лекцій, 32 години лабораторних робіт та 42 години самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>Курс формує такі загальні (ЗК) та спеціальні компетентності (СП):</p> <p>Загальні компетентності:</p> <p>ЗК 1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.</p> <p>ЗК 2. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово.</p> <p>ЗК 3. Здатність спілкуватися іноземною мовою.</p> <p>ЗК 5. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.</p> <p>ЗК 6. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.</p> <p>ЗК 10. Навички здійснення безпечної діяльності.</p> <p>Спеціальні компетентності:</p> <p>СК 1. Здатність виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.</p> <p>СК 4. Здатність брати участь у впровадженні результатів досліджень та розробок.</p> <p>СК 5. Здатність самостійно опановувати нову апаратуру та технології, в тому числі із суміжних галузей, для розв'язання виробничих задач.</p> <p>СК 6. Здатність використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу фізичних систем.</p> <p>СК 7. Здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання в професійній діяльності.</p> <p>Програмні результати навчання:</p> <p>ПРН 01. Використовувати знання в галузі прикладної фізики та наноматеріалів, інформаційних технологій для виконання наукових досліджень та розв'язання виробничих задач.</p> <p>ПРН 03. Застосовувати ефективні технології, інструменти та методи експериментального дослідження властивостей речовин і матеріалів, включаючи наноматеріали, при розв'язанні практичних проблем прикладної фізики.</p> <p>ПРН 04. Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для</p>

	<p>дослідження фізичних явищ, розробки приладів і наукоємних технологій.</p> <p>ПРН 05. Вибирати ефективні методи та інструментальні засоби проведення досліджень у галузі прикладної фізики.</p> <p>ПРН 07. Класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково технічну інформацію в галузі прикладної фізики.</p> <p>ПРН 09. Презентувати результати досліджень і розробок фахівцям і нефахівцям, аргументувати власну позицію.</p> <p>ПРН 10. Планувати й організовувати результативну професійну діяльність індивідуально і як член команди при розробці та реалізації наукових і прикладних проектів.</p> <p>ПРН 11. Знати цілі сталого розвитку та можливості своєї професійної сфери для їх досягнення, в тому числі в Україні.</p> <p>ПРН 12. Розуміти закономірності розвитку прикладної фізики, її місце в розвитку техніки, технологій і суспільства, у тому числі в розв'язанні екологічних проблем.</p> <p>ПРН 16. Вміти формалізувати фізичні задачі для реалізації комп'ютерного експерименту.</p> <p>У результаті вивчення цієї дисципліни студент буде знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> – атомну будову речовини в різних агрегатних станах та методику її топологічного опису; – типи хімічної взаємодії між атомами та їх опис з допомогою потенціалів взаємодії; – основні методи моделювання структури матеріалів; – методику аналізу моделей з метою вивчення властивостей матеріалів. <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> – використовувати засоби програмування для побудови тривимірних атомних конфігурацій; – самостійно моделювати структуру матеріалів методами молекулярної динаміки, Монте-Карло та реконструкції атомної будови за даними дифракційних експериментів; – здійснювати аналіз побудованих моделей та розрахунок властивостей матеріалів на їхній основі.
Ключові слова	Атомна структура, міжатомна взаємодія, комп'ютерне моделювання, метод молекулярної динаміки, наноматеріали, фізичні властивості
Формат курсу	Очний
	Проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем
Теми	Наведено у таблиці 1
Підсумковий контроль, форма	Залік в кінці семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з загальних курсів фізики, квантової механіки, програмування.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентації, лекції, дискусії.
Необхідне обладнання	Персональний комп'ютер, операційні системи (Windows, Linux), загальноживані комп'ютерні програми, проектор, програмне забезпечення для моделювання та візуалізації матеріалів на атомному рівні (пакет LAMMPS)

Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)

Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою.

Поточний контроль:

- оцінювання роботи студентів на лабораторних заняттях (чотири лабораторні роботи по 15 балів, максимальна кількість балів **60**)

Шкала оцінювання лабораторної роботи

Бали	Критерії оцінювання
12-15	Здобувач самостійно виконав лабораторну роботу відповідно до ходу роботи в повному обсязі, отримав правильні дані, грамотно обробив результати. Склавши письмовий звіт з виконання роботи, зробив обґрунтований висновок. На захисті продемонстрував глибокий рівень знань з тематичної лабораторної роботи. Більш високим рівнем вважається виконання роботи (за можливості) за самостійно складеним оригінальним планом і обґрунтування його вибору.
8-11	Студент самостійно виконав роботу відповідно до ходу роботи, отримав валідні дані, обробив з незначними математичними помилками результати роботи, склав письмовий звіт з виконання роботи, самостійно робить висновки, на захисті продемонстрував достатній рівень знань.
4-7	Студент виконав роботу відповідно до ходу роботи. Одержані результати дають можливість сформулювати правильні висновки або їх частину. Під час математичної обробки та оформлення роботи допущено помилки. На захисті тематичної лабораторної роботи продемонстровано задовільний рівень знань.
1-3	Студент провів роботу з допомогою лаборанта/викладача, частково обробив результат, склав письмовий звіт з виконання роботи без належного оформлення, на захисті продемонстрував базовий рівень знань.
0	Здобувач не представив до захисту звіт з відповідної тематичної лабораторної роботи.

– один колоквиум з теоретичного матеріалу (максимальна кількість балів **40**)

Шкала оцінювання контрольного заміру

Кількість балів	% правильних відповідей
40	96-100
38	91-95
36	86-90
34	81-85
32	76-80
30	71-75
28	66-70
26	61-65
24	56-60
22	51-55
20	46-50
18	41-45
16	36-40
14	31-35
12	26-30
10	21-25
8	16-20
6	11-15
4	6-10
2	1-5
0	0

Оцінювання письмового контрольного заміру (0–40 балів) враховує рівень сформованості знань та вмінь на проміжному етапі вивчення навчальної дисципліни (модуль), відповідно 40 балів студент отримує за 100–96% правильних відповідей, 38 балів – 95–91% прав. відпов., 36 балів – 90–86% прав. відпов., 34 бали – 85–81% прав. відпов., 32 бали – 80–76% прав. відпов., 30 балів – 75–71% прав. відпов., 28 балів – 70–66% прав. відпов., 26 балів – 65–61% прав. відпов., 24 бали – 60–56% прав. відпов., 22 бали – 55–51% прав. відпов., 20 балів – 50–46% прав. відп., 18 балів – 45–41% прав. відпов., 16 балів – 40–36% прав. відпов., 14 балів – 35–31% прав. відпов., 12 балів – 30–26% прав. відпов., 10 балів – 25–21% прав. відпов., 8 балів – 20–16% прав. відпов., 6 балів – 15–11% прав. відпов., 4 бали – 10–6% прав. відпов., 2 бали – 5–1% прав. відпов., 0 балів – 0% прав. відпов.

У разі відсутності студента під час проведення лабораторних занять чи на контрольних замірах з поважних причин йому надається право на відпрацювання. У всіх інших випадках відсутність здобувача автоматично зараховується йому як незадовільна оцінка (0 балів) за відповідну тематичну лабораторну роботу чи контрольний замір. Незадовільну оцінку студент має право перескласти. Додатковий термін перездачі призначає викладач.

Додаткові бали можна отримати за результатами **неформального та/або інформального навчання** по тематиці даного курсу. Визнання та зарахування результатів такого навчання відбувається у відповідності до наданих документів про неформальне та/або інформальне навчання.

Підсумковий контроль здійснюється підсумовуванням накопичених балів протягом семестру. Підсумкова максимальна кількість балів 100.

Академічна доброчесність: Очікується, що роботи студентів будуть їх оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Відсутність посилань на використані джерела, фабрикування джерел, списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів плагіату чи обману.

Відвідання занять є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції та лабораторні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків визначених для виконання усіх видів письмових робіт, передбачених курсом.

Література. Уся література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.

Політика виставлення балів. Враховуються бали, набрані на лабораторних роботах в процесі поточного контролю і на колоквіумі. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час лабораторних занять; недопустимість пропусків та запізнь на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях не пов'язаних з навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.

Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.

Питання на колоквиум	<ol style="list-style-type: none"> 1. Квантовомеханічне обґрунтування поняття міжатомного потенціалу. 2. Парні потенціали. 3. Потенціал Ленарда-Джонса. 4. Основи теорії функціоналу густини багатоелектронних систем. 5. Міжатомні потенціали, які ґрунтуються на теорії функціоналу густини. Метод втіленого атома. 6. Міжатомні потенціали для сплавів. 7. Потенціали для ковалентних кристалів. 8. Способи опису кристалічної структури для створення комп'ютерних моделей. 9. Опис структури неупорядкованих систем для комп'ютерного моделювання. 10. Метод мінімізації енергії. 11. Фізичні основи методу молекулярної динаміки. 12. Огляд основних завдань, що вирішуються за допомогою МД. 13. Обмеження класичної МД. 14. Ініціалізація систем для моделювання в МД. Періодичні граничні умови. 15. Алгоритми чисельного інтегрування рівнянь руху. 16. Алгоритм Верле. 17. Розрахунок потенціальної та кінетичної енергій методом МД. 18. Розрахунок температури методом МД. 19. Калорична крива. Визначення температури плавлення твердих тіл методом МД. 20. Розрахунок тиску в молекулярній динаміці. 21. Розрахунок атомних напружень в молекулярній динаміці. 22. Класифікація видів ансамблів і методів їх моделювання. 23. Молекулярна динаміка при постійній температурі. 24. Молекулярна динаміка при постійному тиску.
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1

Схема курсу «Комп'ютерна інженерія матеріалів різної розмірності»

Тиждень	Тема занять	Форма діяльності та обсяг годин	Література	Термін виконання
1–2	Тема 1. Міжчастинкова взаємодія в твердих та рідких тілах.	Лекції — 2 год. лабораторні — 4 год. самостійна робота — 9 год.	Б-5, І-1, 2	2 тижні
3–4	Тема 2. Атомна структура матеріалів.	Лекції — 2 год. лабораторні — 4 год. самостійна робота — 9 год.	Б-1, 5, Д-1, І-1,2	2 тижні
5–8	Тема 3. Метод молекулярної динаміки.	Лекції — 4 год. лабораторні — 8 год. самостійна робота — 10 год.	Б-1, 2, 3, 5, Д-1, І-1, 2	4 тижні
9–10	Тема 4. Побудова атомних моделей за дифракційними даними про структуру.	Лекції — 2 год. лабораторні — 4 год. самостійна робота — 10 год.	Б-4	2 тижні
11–12	Тема 5. Аналіз властивостей наносистем на основі комп'ютерних експериментів.	Лекції — 2 год. лабораторні — 4 год. самостійна робота — 10 год.	Б-5, Д-6, І-2	2 тижні
13–16	Тема 6. Наноінженерія матеріалів. Основні методи та можливості.	Лекції — 4 год. лабораторні — 7 год. колоквиум — 1 год. самостійна робота — 10 год.	Б-5, Д-6, І-2	4 тижні