



КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КОЛЕКТИВНИХ ПРОЦЕСІВ В ТВЕРДОМУ ТІЛІ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	<i>10 Природничі науки</i>
Спеціальність	<i>104 Фізика та астрономія</i>
Освітня програма	<i>Комп'ютерне моделювання фізичних процесів</i>
Статус дисципліни	<i>Нормативна</i>
Форма навчання	<i>Очна (денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>7 кредитів/210 годин</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Екзамен, МКР</i>
Розклад занять	<i>час і місце проведення аудиторних викладені на сайті http://rozklad.kpi.ua/</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор: доктор фізико-математичних наук, професор Горшков В'ячеслав Миколайович, e-mail: vn.gorshkov@gmail.com</i>
Розміщення курсу	<i>Електронний кампус КПІ ім. Ігоря Сікорського</i>

Програма навчальної дисципліни

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

Докорінні зміни в сфері високих технологій - електроніці, інформаційних технологіях, мікроелектроніці - пов'язані з фундаментальними і прикладними дослідженнями, конструюванням і практичним використанням матеріалів і пристроїв, елементи яких мають розміри менше 100 нанометрів. Такі нано-об'єкти мають принципово нові фізичні властивості, які зумовлюють унікальні експлуатаційні характеристики прикладних розробок, створених на базі інтеграції багатьох «первинних» нанорозмірних елементів. Дослідження фізичних властивостей первинних компонент інтегральних схем пов'язані з доволі коштовними експериментами. Особливо, якщо мова йде про оптимізацію параметрів їх робочих характеристик. В той же час бурхливий розвиток обчислювальної техніки дає можливість моделювати досліджувані процеси на базі доволі точних математичних моделей природних явищ. Такі дослідження, крім безперечної прикладної користі, мають ще велику «виховну» цінність. Математичне моделювання розкладає природне явище по самим дрібним «компонентам» і дає можливість спостерігати процеси в мікро/наносвіті наочно після їх візуалізації тими ж комп'ютерними засобами. Це розвиває фізичне мислення студентів, їх образне мислення взагалі і поглиблює сприйняття зв'язків між різними фізичними факторами, що надзвичайно корисно для їх подальшої роботи.

Пакети вже розроблених командами науковців/програмістів відповідних програм значно полегшують проведення фізичних досліджень. Але треба згадати, що ці пакети створені на базі глибоких знань і фізики, і майстерності в програмуванні, яка іноді потребує віртуозності в винахідливості дослідника для забезпечення виконання обчислень в прийнятний час. На розвиток у студентів відповідних якостей націлений даний курс навчання.

В результаті вивчення дисципліни магістрант набуде наступні компетентності, знання та навички (згідно до освітньої програми):

Загальні компетентності:

- ЗК1. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.*
- ЗК2. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.*
- ЗК3. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.*
- ЗК5. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.*
- ЗК7. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні.*

Фахові компетентності:

- ФК01. Здатність використовувати закони та принципи фізики та/або астрономії у поєднанні із потрібними математичними інструментами для опису природних явищ.*
- ФК02. Здатність формулювати, аналізувати та синтезувати рішення наукових проблем в області фізики та/або астрономії.*
- ФК05. Здатність сприймати ново здобуті знання в області фізики та астрономії та інтегрувати їх із уже наявними.*
- ФК08. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в області фізики та астрономії, вибрати відповідні методи для їх розв'язання, беручи до уваги наявні ресурси.*
- ФК09. Здатність самостійно опановувати знання і навички, необхідні для розв'язання складних задач і проблем у нових для себе деталізованих предметних областях фізики та/або астрономії й дотичних до них міждисциплінарних областях.*

Програмні результати навчання:

- ПРН01 Використовувати концептуальні та спеціалізовані знання і розуміння актуальних проблем і досягнень обраних напрямів сучасної теоретичної і експериментальної фізики та/або астрономії для розв'язання складних задач і практичних проблем.*
- ПРН02 Проводити експериментальні та/або теоретичні дослідження з фізики та астрономії, аналізувати отримані результати в контексті існуючих теорій, робити аргументовані висновки (включаючи оцінювання ступеня невизначеності) та пропозиції щодо подальших досліджень*
- ПРН04 Обирати і використовувати відповідні методи обробки та аналізу даних фізичних та/або астрономічних досліджень і оцінювання їх достовірності*
- ПРН05 Здійснювати феноменологічний та теоретичний опис досліджуваних фізичних та/або астрономічних явищ, об'єктів і процесів*
- ПРН06 Обирати ефективні математичні методи та інформаційні технології та застосовувати їх для здійснення досліджень та/або інновацій в області фізики та/або астрономії*
- ПРН11 Застосовувати теорії, принципи і методи фізики та/або астрономії для розв'язання складних міждисциплінарних наукових і прикладних задач*

ПРН12 Розробляти та застосовувати ефективні алгоритми та спеціалізоване програмне забезпечення для дослідження моделей фізичних та/або астрономічних об'єктів і процесів, обробки результатів експериментів і спостережень

ПРН13 Створювати фізичні, математичні і комп'ютерні моделі природних об'єктів та явищ, перевіряти їх адекватність, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, аналізувати обмеження

ПРН17. Вміти програмувати та використовувати різні мови програмування

ПРН19. Вміти моделювати фізичні і не тільки процеси та явища, що виникають в навколишньому світі

ПРН20. Вміти створювати та досліджувати різні фізичні теорії за допомогою моделювання фізичних та астрономічних процесів

При засвоєнні матеріалу дисципліни студенти отримують досвід побудови складних математичних моделей для дослідження фізичних явищ в твердому тілі. Саме колективних явищ, які зумовлені взаємодією великої кількості частино і ніяк не можуть бути редставлені в будь-якому одночастинковому наближенні. Рідко яка фізична проблема має точне вирішення. В кожному конкретному випадку перед дослідником стоїть задача вибору різного роду наближень, які не повинні значно спотворювати кінцевий результат. Відповідно до цих наближень будується (або обирається) математична модель явища (пакет програм) , яка забезпечить і точність результату, і фізичну реальність часу обчислень. Важливою є також проблема цілеспрямованого вибору фізичних параметрів, які керують динамікою досліджуваної систему у бажаному напрямку. Вибір оптимальних параметрів базується на чіткій якісній уяві про взаємодію різних взаємопов'язаних факторів, які визначають хід фізичного процесу в цілому. Дати відповідний досвід в вирішенні перелічених вище проблем (загальних для багатьох розділів фізики) – ціль представленого курсу. Крім того, якщо мова йде про наносистеми, студенти отримують поглиблені знання з квантової механіки багаточастинкових систем, що є конче корисним в вирішенні самих різних задач сучасної фізики.

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

Вивчення даної дисципліни базується на дисципліні «Макроскопічні квантові явища», а також потребує знання матеріалу, який викладається на бакалаврському рівні в рамках дисциплін «Фізика твердого тіла», «Термодинаміка і статистична фізика», «Квантова механіка». Необхідні також знання вищої математики та досвід математичного моделювання і програмування, який студенти отримують під час навчання на бакалаврському рівні. Необхідним також є базовий рівень володіння англійською мовою для читання посібників та оригінальних наукових статей в англомовних журналах.

Знання, отримані магістрантами з дисципліни «Комп'ютерне моделювання колективних процесів в твердому тілі», використовуються при підготовці магістрантами наукових доповідей та наукових статей, при проходженні науково-дослідної практики, а також при захисті дисертації.

3. Зміст навчальної дисципліни

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 210 годин/ 7 кредити ECTS.

Рекомендований розподіл навчального часу

Форма навчання	Всього		Розподіл навчального часу за видами занять						Семестрова атестація
	кредитів	годин	Лекції	Практичні (семінарські) заняття	Лабораторні заняття	СРС			
						Підготовка до екзамену	МКР	Підготовка до	
Денна	7	210	36	24	24	35	8	83	Екзамен

Дисципліна «Комп'ютерне моделювання колективних процесів в твердому тілі» включає наступні теми:

- Тема 1. Стратегія побудови математичної моделі фізичного процесу, характеристика моделей різних типів в залежності від цілей досліджень та прийнятних фізичних наближень. Монте-Карло моделі та моделі типу молекулярної динаміки
- Тема 2. Типи кристалічних ґраток твердих тіл. Елементарна, примітивна комірка кристалічної ґратки, комірка Вігнера-Зейтца. Рух електрона в періодичному полі кристалічної ґратки. Ефективна маса та енергія електрона. Оборотна ґратка в імпульсному просторі. Зона Бріллюена.
- Тема 3. Кінетичне рівняння Больцмана для функції розподілу електронів. Інтеграл зіткнень та його представлення в наближенні часу релаксації.
- Тема 4. Система рівнянь електро-магніто-гідродинаміки для електронно-діркової плазми напівпровідників. Урахування міжзонного пробою (ударної іонізації) та нелінійної рекомбінації носіїв.
- Тема 5. Стискання електрон-діркової плазми власним магнітним полем струму (пінч-ефект). Отримання рівняння для концентрації квазінейтральної плазми. Амбіполярна дифузія та амбіполярний дрейф плазми.
- Тема 6. Явище коливання напруги на взірцях з $n\text{-InSb}$ ($T=77\text{ K}$) в режимі постійного струму. Збудження та поперечний дрейф доменів іонізації. Ефект електрон-діркового розсіювання.
- Тема 7. Стискання електрон-діркової плазми зростаючим зовнішнім магнітним полем (θ -пінч). Рівняння для концентрації плазми в відсутності прояву скін-ефекту
- Тема 8. Дифузія магнітного поля в електрон-діркову плазму та захват цього поля плазмою. Скін-ефект. Формування нейтральних струмових шарів при періодичному у часі зовнішньому магнітному полі.

- Тема 9. Нестійкості в електрон-дірковій плазмі. Домени Ганна у випадку N-подібної вольт-амперної характеристики. Збудження височастотних коливань в електричних полях, в яких дрейфова швидкість електронів насичується.
- Тема 10. Фазові переходи першого та другого роду. Модель Ізінга для переходу з ферромагнітного стану в парамагнітний з підвищенням температури магнетика.
- Тема 11. Динаміка електрона (протона) в магнітному полі. Поздовжня та поперечна релаксація спіна. Принципи роботи магніторезонансної томографії та магніторезонансної мікроскопії.
- Тема 12. Поверхнева енергія наночастинок. Оцінка анізотропії розподілу густини поверхневої енергії методом підрахунку розірваних міжатомних зв'язків на кристалічних гранях різної орієнтації. Термодинаміка наночастинок при трансформації їх поверхні під час переходу з початкового довільного стану до рівноважного.
- Тема 13. Рівноважні форми наночастинок при їх фіксованому об'ємі в припущенні, що вони обмежені кристалічними гранями заданої кристалічної ґратки. Теорема Вульфа. Роль поверхневих кінетичних процесів у встановленні рівноважної форми.
- Тема 14. Термічна нестійкість нанодротів при температурі нижче температури плавлення. Одержання дисперсійного рівняння для малих за амплітудою періодичних модуляцій радіусу нанодроту. Аналіз особливостей розпаду для різних орієнтацій осі нанодроту відносно його внутрішньої кристалічної структури.
- Тема 15. Властивості середовища з негативним індексом заломлення. Оптичні метаматеріали. Подолання дифракційної межі, суперлінза.
- Тема 16. Акустичні метаматеріали- середовища з негативною ефективною масою. Модель акустичного матеріалу – множина вузлів-мультивібраторів зі структурою «маса-в-масі», які утворюють ґратку різного типу симетрії. Дисперсійне рівняння для акустичних хвиль в таких системах. Теорема Блоха. Зони Бріллюена
- Тема 17. Квантові ями, квантові дроти та квантові точки. Чисельний розв'язок лінійних рівнянь Шредингера.
- Тема 18. Чисельний дисипативно-ітераційний розв'язок нелінійних рівнянь Шредингера типу рівнянь Хартрі-Фока. Як приклад, розрахунок рівней енергії і просторового розподілу густини двох-компонентної по масі ультра-легких частинок темної матерії (аксіонів), яка створює гало галактик.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література

1. *Modeling and Computational Methods for Kinetic Equations*, 2009, Series Editor Nicola Bellomo, Springer Science+Business Media, LLC, 359 pages
2. *Monte Carlo methods for applied scientists*. 2015, I. Dimov, World Scientific, 308 pages
3. *Quantum Wells, Wires and Dots*. P. Harrison, A. Valavanis, 2016, John Wiley & Sons, 610 pages
4. *Introductory Solid State Physics with MATLAB Applications*. 2017, Javier E. Hasbun, Trinanjan Datta, CRC Press, 570 pages
5. *Solid State Physics-Problems and Solutions*, Laszlo Mihaly, Michael C. Martin. 2016 John Wiley & Sons, 273 pages

Додаткова література

1. Л.С.Возняк, С.В.Шарин В64 Чисельні методи: Методичний посібник для студентів природничих спеціальностей. –Івано-Франківськ: “Плай”, 2001, –64 с.
2. Л. М. Буката, В. А. Шаповаленко, О. Г. Трофименко. «Чисельні методи та моделювання на ЕОМ: методичні вказівки та керівництва з лабораторних та практичних занять. Модуль 1. Чисельне обчислення функцій, характеристик матриць. Розв'язок нелінійних рівнянь та систем рівнянь. Частина 2.» - 2010.
3. Wave Propagation in Materials for Modern Applications. Edited by Andrey Petrin. 2010 Intech, 552 pages
4. Numerical Problems in Solid State Physics, M.A. Wahab. Narosa, 141 pages
5. Метод молекулярной динамики. А.В. Комолкин, М.Г. Шеляпина. Санкт-Петербург, 2007
6. Computational Physics. David Potter, Imperial College, London, 285 pages, Переклад з англійської - Поттер Д. Вычислительные методы в физике, Мир, 392 стр.
7. Плазма полупроводников. В.В. Владимиров, А.Ф. Волков, Е.З. Мейлихов. Атоиздат, 1995, 259 стр.
8. Костробій П.П., Маркович Б.М., Візнович О.В., Токарчук М.В., Методи математичного моделювання стохастичних систем: Навчальний посібник, Видавництво “Растр-7”, Львів, 2020, 187 с., ISBN 978-617-7997-01-5.
9. Бахрушин В.Є. Математичні основи моделювання систем: Навчальний посібник для студентів. - Запоріжжя: Класичний приватний університет, 2009. - 224 с.
10. Чисельні методи : навчальний посібник / В. М. Задачин, І. Г. Конюшенко. – Х. : Вид. ХНЕУ ім. С. Кузнеця, 2014. – 180 с. (Укр. мов.)
11. Комп'ютерне моделювання динамічних систем. Розділ “Моделювання фізичних систем” : навч. посіб. / І. О. Князь, А. М. Вітренко. — Суми : Сумський державний університет, 2011. — 140 с.
12. Комп'ютерне моделювання систем та процесів. Методи обчислень. Частина I : навчальний посібник Кветний Р.Н., Богач І.В., Бойко О.Р., Софіна О.Ю., Шушура О.М.; за заг. ред. Р.Н. Квотного. – Вінниця: ВНТУ, 2012. – 193 с.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття

№	Назва теми лекції та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів, посилання на літературу та завдання на СРС)
1	<p><i>Тема 1. Загальні принципи побудови математичної моделі фізичного процесу, характеристика моделей різних типів в залежності від цілей досліджень та прийнятних фізичних наближень.</i></p> <div style="text-align: center;"> <p style="text-align: center;"><i>Схема технологічного циклу чисельного експерименту.</i></p> </div>

2	<p>Тема 2. Типи кристалічних ґраток твердих тіл. Елементарна, примітивна комірка кристалічної ґратки, комірка Вігнера-Зейтца. Рух електрона в періодичному полі кристалічної ґратки. Ефективна маса та енергія електрона. Оборотна ґратка в імпульсному просторі. Зона Бріллюена.</p> <p>Симетрія кристалічних ґраток грає важливу роль в визначенні властивостей твердих тіл. При вирішенні практичних задач оперують або елементарними, або примітивними комірками. Важливо чітко уявляти різницю між цими поняттями. Поняття зона Бріллюена в імпульсному просторі також є одним з фундаментальних для представлення зонної структури твердого тіла.</p>
3	<p>Тема 3. Кінетичне рівняння Больцмана для функції розподілу електронів. Інтеграл зіткнень та його представлення в наближенні часу релаксації.</p> <p>Функція розподілу електронів/дірок за імпульсом визначає низку кінетичних параметрів: електропровідність твердого тіла, коефіцієнти дифузії носіїв заряду, коефіцієнт ударної іонізації (міжзонного пробую) та інше. Часто експериментальну ситуацію добре віддзеркалює розв'язок цього рівняння в більш простому вигляді - в наближенні часу релаксації</p>
4	<p>Тема 4. Система рівнянь електро-магніто-гідродинаміки для електронно-діркової плазми напівпровідників. Урахування міжзонного пробую (ударної іонізації) та нелінійної рекомбінації носіїв.</p> <p>Опис динаміки плазми здійснюється на базі рівнянь для її макроскопічних характеристик – рівнянь руху для електронів та дірок, рівнянь безперервності для їх густини. Ця система рівнянь доповнюється рівняннями Максвелла для електричного та магнітного полів.</p>
5	<p>Тема 5. Стискання електрон-діркової плазми власним магнітним полем струму (пінч-ефект). Отримання рівняння для концентрації квазінейтральної плазми. Амбіполярна дифузія та амбіполярний дрейф плазми.</p> <p>Пінч-ефект має дуже повчальну для студентів історію свого відкриття. Дрейф електронів і дірок в схрещених електричному та магнітному полях в центральну зону напівпровідника веде до значного посилення рекомбінаційного випромінювання з цієї зони. Цей ефект використовується в численних застосуваннях – наприклад, створенні мініатюрних рентгенівських апаратів.</p>
6	<p>Явище коливання напруги на взірцях з n-InSb ($T=77\text{ K}$) в режимі постійного струму. Збудження та поперечний дрейф доменів іонізації. Ефект електрон-діркового розсіювання.</p> <p>Стискання електрон-діркової плазми веде до трансформації розподілу власного магнітного поля і густини струму в перерізу напівпровідника та зміну у часі електричного поля. Ці два чинники призводять до формування згустків плазми, які зароджуються на периферії та згодом рекомбінують в центрі напівпровідникового циліндра. При фіксованому струму напруга коливається навколо деякого середнього рівня.</p>
7	<p>Тема 7. Стискання електрон-діркової плазми наростаючим зовнішнім магнітним полем (θ -пінч). Рівняння для концентрації плазми в відсутності прояву скін-ефекту.</p> <p>Ефект стискання плазми схрещеними зовнішнім магнітним полем та</p>

	<i>індукованим ним вихровим електричним полем. В порівнянні з пінч-ефектом, електричні і магнітні помінялись місцями.</i>
8	<i>Тема 8. Дифузія магнітного поля в електрон-діркову плазму та захват цього поля плазмою. Скін-ефект. Формування нейтральних струмових шарів при періодичному у часі зовнішньому магнітному полі. Динаміка θ-пінчу при високих швидкостях зміни магнітного поля або при високій провідності плазми ускладнюється тим, що необхідно отримати взаємопов'язані рівняння для концентрації плазми та магнітного поля, яке стає неоднорідним і перерізі плазмового каналу. На прикладі θ-пінчу в умовах розвитку скін-ефекту моделюються процеси в термоядерній плазмі при пошуку загальних методів її стискання/утримання та запалювання термоядерної реакції.</i>
9	<i>Тема 9. Нестійкості в електрон-дірковій плазмі. Домени Ганна у випадку N-подібної вольт-амперної характеристики. Збудження високочастотних коливань в електричних полях, в яких дрейфова швидкість електронів насичується. Якщо значення електричного поля таке, що при його збільшенні середня швидкість електронів спадає внаслідок міждолинних переходів електронів, то такий стан плазми є нестійким при фіксованому повному струмі в плазмі (струм провідності+ струм зміщення = const) – виникають рухливі домени сильного поля (домени Ганна). Нестійким також є стан в зоні насичення дрейфової швидкості електронів з ростом електричного поля. Нестійкість зумовлена процесами міжзонного пробою в сильних полях і запізненням змін дрейфових швидкостей електронів відносно змін електричного поля – виникає негативна динамічна провідність плазми</i>
10	<i>Тема 10. Фазові переходи першого та другого роду. Модель Ізінга для переходу з феромагнітного стану в парамагнітний з підвищенням температури магнетика. Дати детальну якісну інтерпретацію формальному розриву другої похідної термодинамічного потенціалу Гіббса, який в реальності визначає стрибок теплоємності, магнітного моменту при температурі Кюрі - температурі фазового переходу. Привести оцінку цієї температури. В подальшому в чисельній моделі визначити цю температуру і співставити її з результатом Ізінга та з попередньо виконаною її оцінкою.</i>
11	<i>Тема 11. Динаміка електрона (протона) в магнітному полі. Поздовжня та поперечна релаксація спіна. Принципи роботи магніторезонансної томографії та магніторезонансної мікроскопії. Методика керування орієнтацією магнітного моменту елементарної частинки зовнішніми магнітними полями (flip-flop перемикання орієнтації спіну). В подальшому, вивчення механізму спінового відлуння в чисельній моделі багаточастинкової системи. Ефект спінового відлуння - важливий елемент магніторезонансної томографії.</i>
12	<i>Тема 12. Поверхнева енергія наночастинок. Оцінка анізотропії розподілу густини поверхневої енергії методом підрахунку розірваних міжатомних</i>

	<p>зв'язків на кристалічних гранях різної орієнтації. Термодинаміка наночастинок при трансформації їх поверхні під час переходу з початкового довільного стану до рівноважного.</p> <p>Наночастинки з різною формою (з різними частотними резонансними характеристиками) використовуються в сенсорах, хвильоводах субхвильового діапазону, в медицині та інших галузях. Знання термодинамічних та кінетичних закономірностей їх формування необхідні для роботи з нанооб'єктами.</p>
13	<p>Тема 13. Рівноважні форми наночастинок при їх фіксованому об'ємі в припущенні, що вони обмежені кристалічними гранями заданої кристалічної ґратки. Теорема Вульфа. Роль поверхневих кінетичних процесів у встановленні рівноважної форми.</p> <p>Процеси поверхневої дифузії атомів та обмін поверхні нанокластеру з приповерхневим шаром вільних атомів можуть суттєво смінювати рівноважну конфігурацію наночастинок в порівнянні з конфігурацією Вульфа. Найбільш вражаюча різниця спостерігається для алмазоподібної кристалічної ґратки.</p>
14	<p>Тема 14. Термічна нестійкість нанодротів при температурі нижче температури плавлення. Одержання дисперсійного рівняння для малих за амплітудою періодичних модуляцій радіусу нанодроту. Аналіз особливостей розпаду для різних орієнтацій осі нанодроту відносно його внутрішньої кристалічної структури.</p> <p>Мета теми – дати досвід оригінального аналітичного розгляду нестійкості поверхні нанодроту відносно малих відхилень від рівноваги. Аналіз залежності просторовому періоду розпаду від орієнтації нанодроту потребує глибокого розуміння фізики процесу та ролі в ньому анізотропії густини поверхневої енергії.</p>
15	<p>Тема 15. Властивості середовища з негативним індексом заломлення. Оптичні метаматеріали. Подолання дифракційної межі, суперлінза.</p> <p>Оптичні метаматеріали – штучні середовища зі структурованих елементів, які забезпечують негативні значення діелектричної та магнітної проникності. Їх окремі унікальні властивості будуть в подальшому вивчені при моделюванні проходження хвильового пакету через платівку з негативним коефіцієнтом заломлення.</p>
16	<p>Тема 16. Акустичні метаматеріали - середовища з негативною ефективною масою. Модель акустичного матеріалу – множина вузлів-мультивібраторів зі структурою «маса-в-масі», які утворюють ґратку різного типу симетрії. Дисперсійне рівняння для акустичних хвиль в таких системах. Теорема Блоха. Зони Бріллюена</p> <p>Аналітичний аналіз властивостей акустичних метаматеріалів. Вивчення формування заборонених зон (смуг заблокованих частот акустичних коливань) на простих моделях</p>
17	<p>Тема 17. Квантові ями, квантові дроти та квантові точки. Чисельний розв'язок лінійних рівнянь Шредингера.</p> <p>Дослідження перелічених нанооб'єктів потребує залучення квантової механіки</p>

	<i>і, відповідно, вміння пошуку розв'язків рівняння Шредингера чисельними методами. В подальшому ці методи будуть застосовані при моделюванні так званого «ефекту надбар'єрного відбивання», результати якого піддаються глибокому якісному аналізу.</i>
18	<i>Тема 18. Чисельний дисипативно-ітераційний розв'язок нелінійних рівнянь Шредингера типу рівнянь Хартрі-Фока. Як приклад, розрахунок рівней енергії і просторового розподілу густини двох-компонентної по масі ультра-легких частинок темної матерії (аксіонів), яка створює гало галактик. Нетрадиційний та ефективний метод розв'язку системи нелінійних стаціонарних рівнянь Шредингера, який розроблений вченими КПІ. Описаний та застосований в трьох публікаціях (Modern Physics Letters A, 2019-2020) по фізиці темної матерії</i>

Практичні заняття

№ з/п	Назва теми заняття та перелік основних питань
1	<i>Консервативні різницеві схеми для рівнянь руху заряджених частинок в зовнішньому електричному/магнітному полі. Неявні різницеві схеми для розрахунку динаміки магнітного моменту частинки в зовнішніх магнітних полях у квазикласичному наближенні. Рівняння Блоха.</i>
2	<i>Коливальні адіабатичні обертання спіну керовані частотно -модульованим радіочастотним магнітним полем. Сенс π- та $\pi/2$-імпульсів цього поля</i>
3	<i>Схеми різницевої апроксимації диференціальних рівнянь параболічного типу на часово-просторовій сітці. Схема другого порядку точності по часу – схема Кранка-Ніколса. Розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь з трьох-діагональною матрицею методом прогонки.</i>
4	<i>Історія відкриття пінч-ефекту в напівпровідниках. Хибні концепції магніто-теплого пінча для пояснення осциляцій електричного поля в режимі фіксованого струму. Гвинтова нестійкість каналу пінча в поздовжньому магнітному полі. Аномалії вольт-амперних характеристик напівпровідника при розвитку в ньому пінч-ефекту.</i>
5	<i>Природа феромагнетизму. Долекодюча «диполь-диполь» взаємодія магнітних моментів проти «близькодючої» обмінної взаємодії ферміонів. Фізичні чинники утворення доменів в феромагнетиках.</i>
6	<i>Збудження високочастотних коливань в електричних полях, в яких дрейфова швидкість електронів насичується. Нестійкість зумовлена процесами міжзонного пробою в сильних полях і запізненням змін дрейфових швидкостей відносно змін електричного поля – виникає негативна динамічна провідність плазми на високих частотах. Вивести дисперсійне рівняння для цієї нестійкості для заданного значення $\frac{dV_e}{dE} = \alpha$ (V_e-дрейфова швидкість електронів), коефіцієнт ударної іонізації $g = g_0 \exp(bE)$. Продемонструвати виникнення негативної динамічної провідності в режимі збудження нестійкості.</i>

7-8	<p>Модель Ізінга. Запрограмувати динаміку переходу хаотичного розподілу магнітних моментів до стаціонарного стану при різних температурах. Побудувати залежність загального магнітного моменту і теплоємності системи спінів в цих станах в залежності від температури. Визначити температуру фазового переходу і порівняти це значення з результатом Ізінга. Пояснити причину того, що в деяких розрахунках при низькій температурі (нижче температури Кюрі) магнітний момент стаціонарного стану формується доволі малий за значенням (система переходить в феромагнітний стан, однак зі створенням доменної структури). Розрахунок теплоємності зробити на основі реєстрації флуктуацій загального магнітного моменту системи в квазі-рівноважному стані.</p>
9	<p>Монте-Карло модель розрахунку динаміки нанодротів при підвищенні температури (кристалічна ґратка зберігається). Аналіз фізичних припущень при побудові моделі. Аналіз відповідності моделі принципу детальної рівноваги. Демонстрація її роботи з використання готового комп'ютерного коду (розробка співробітника КПІ, яка стала відомою в світовій науковій літературі)</p>
10	<p>Побудова рівноважних форм наночастинок с різним типом кристалічної ґратки на основі теореми Вульфа. Аналіз можливих відхилень від теоретичних передбачень такого роду внаслідок кінетичних процесів на поверхні наночастинок (поверхнева дифузія, процеси detachment-reattachment). Особливості рівноважних форм для частинок з алмазоподібною кристалічною ґраткою.</p>
11	<p>Акустичні метаматеріали - середовища з негативною ефективною масою. Дослідити акустичні характеристики одновимірного ланцюжка вузлів з двох- та трьох-рівневих «маса-в-масі» мультівібраторів. Отримати дисперсійне рівняння з подальшим його чисельним розв'язком</p>
12	<p>Вивчення квантового «ефекту надбар'єрного відбивання». Зробити оцінки максимального імпульсу частинки, для якого цей ефект ще спостерігається. Дати якісну інтерпретацію залежності коефіцієнту відбивання від ширини хвильового пакету і ширини потенційного бар'єру при його фіксованій висоті.</p>

Лабораторні заняття

№ з/п	Назва теми заняття та перелік основних питань
1	<p>Визначення базисних векторів оборотного простору для гранецентрованих та об'ємцентрованих кристалічних ґраток. Побудова зон Бріллюена для зазначених випадків.</p>
2	<p>Визначення густини поверхневої енергії на різних гранях гранецентрованих та об'ємцентрованих кристалічних ґраток методом підрахунку розірваних зв'язків для атомів, як розташовані на цих гранях. Розрахунок міри анізотропії густини поверхневої енергії.</p>
3	<p>Написання програмного модулю (підпрограми) для розрахунку коливального адіабатичного обертання спіну в сталому зовнішньому магнітному полі та в</p>

	<i>поперечному йому керованому частотно-модульованому радіочастотному (РЧ) магнітному полі. Розрахунок адіабатичних поворотів спіну при π- та $\pi/2$-імпульсах РЧ- поля</i>
<i>4-5</i>	<i>Пінч-ефект. Написання програмного модулю для розрахунку динаміки електрон-діркового плазмового каналу в умовах ударної іонізації (міжзонного пробою). Визначення критичного струму пінчування, часу пінчування і його зв'язок з періодом релаксаційних коливань в каналі пінчу. Динаміка профілю магнітного поля при коливаннях пінчу. Демонстрація руху доменів іонізації від периферії напівпровідника до його центру.</i>
<i>6-7</i>	<i>Написання програмного модулю для розрахунку динаміки електрон-діркового плазмового каналу в зростаючому повздовжньому магнітному полі з урахуванням скін-ефекту. Дослідити захоплення магнітного поля плазмою при періодичному у часі зовнішньому магнітному полі. Предемонструвати утворення нейтральних струмових шарів в циліндричних зонах максимального стискання електрон-діркової плазми.</i>
<i>8-9</i>	<i>Написання програмного модулю для вивчення ефекту спінового-відлуння. (використати модуль, який був створений на занятті №3). Закласти в розрахунок генератор локальних збурень магнітного поля. Розрахувати час затухання максимального магнітного моменту системи спінів після серії π-імпульсів РЧ магнітного поля.</i>
<i>10-12</i>	<i>Чисельний дисипативно-ітераційний розв'язок нелінійних рівнянь Шредингера типу рівнянь Хартрі-Фока. Написати програму розрахунку рівней енергії і просторового розподілу густин двох-компонентної по масі ультра-легких частинок темної матерії (аксіонів) в наближенні середнього поля. Визначити можливість реєстрації того, що темна матерія дійсно є двох-компонентною в залежності від співвідношення загальних мас та відношення мас елементарних частинок для цих двох компонент.</i>

6. Самостійна робота магістранта

Самостійна робота магістранта є основним засобом засвоєння навчального матеріалу у вільний від навчальних занять час і включає:

<i>№ з/п</i>	<i>Вид самостійної роботи</i>	<i>Кількість годин СРС</i>
<i>1</i>	<i>Підготовка до аудиторних занять</i>	<i>83</i>
<i>2</i>	<i>Підготовка до МКР</i>	<i>8</i>
<i>3</i>	<i>Підготовка до екзамену</i>	<i>35</i>

Для виконання МКР та закріплення знань, здобутих під час аудиторних занять, магістрам будуть дані пакети програм розрахунку динаміки спінових систем, поверхні 3-вимірних нанокластерів та нонодротів з різною симетрією кристалічної ґратки, розроблених лекторами та магістрантами КПІ. Загальні принципи побудови цих програм слухачі засвоять на практичних заняттях. На базі цих пакетів магістранти наочно прослідкують цілу низку фізичних процесів, які відкриють несподівані для них самоузгоджені зв'язки між різними фізичними явищами.

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які викладач ставить перед магістрантом:

- - правила відвідування занять: відповідно до Наказу 1-273 від 14.09.2020 р. заборонено оцінювати присутність або відсутність здобувача на аудиторному занятті, в тому числі нараховувати заохочувальні або штрафні бали. Відповідно до РСО даної дисципліни бали нараховують за відповідні види навчальної активності на лекційних та практичних заняттях.
- - правила поведінки на заняттях: студент має можливість отримувати бали за відповідні види навчальної активності на лекційних заняттях, передбачені РСО дисципліни. Використання засобів зв'язку для пошуку інформації на гугл-диску викладача, в інтернеті, в дистанційному курсі на платформі Сікорський здійснюється за умови вказівки викладача;
- - політика дедлайнів та перескладань: якщо магістрант не проходив або не з'явився на МКР (без поважної причини), його результат оцінюється у 0 балів. Перескладання результатів МКР не передбачено;
- - політика щодо академічної доброчесності: Кодекс честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» <https://kpi.ua/files/honorcode.pdf> встановлює загальні моральні принципи, правила етичної поведінки осіб та передбачає політику академічної доброчесності для осіб, що працюють і навчаються в університеті, якими вони мають керуватись у своїй діяльності, в тому числі при вивченні та складанні контрольних заходів з дисципліни «Комп'ютерне моделювання колективних процесів в твердому тілі»;
- - при використанні цифрових засобів зв'язку з викладачем (мобільний зв'язок, електронна пошта, переписка на форумах та у соцмережах тощо) необхідно дотримуватись загальноприйнятих етичних норм, зокрема бути ввічливим та обмежувати спілкування робочим часом викладача.

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

Поточний контроль: опитування за темою заняття, виступи з доповіддю, МКР.

Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.

Семестровий контроль: екзамен.

Умови допуску до семестрового контролю: відсутні.

На першому занятті магістранти ознайомлюються із рейтинговою системою оцінювання (РСО) дисципліни, яка побудована на основі «Положення про систему оцінювання результатів навчання», https://document.kpi.ua/files/2020_1-273.pdf

Рейтинг магістранта з дисципліни складається з балів, які він отримує:

- 1) на практичних заняттях;
- 2) за модульну контрольну роботу (МКР);
- 3) за відповідь на екзамені.

Система рейтингових балів

1) Практичні заняття. Ваговий коефіцієнт дорівнює 5. Максимальна кількість балів, які може отримати магістрант на практичних заняттях становить 20 бали. Нарахування балів на одному практичному занятті:

- відмінні відповіді 5 балів;
- дуже добрі, добрі відповіді 4 бали;
- задовільні, достатні відповіді 3 бали.

2) Модульна контрольна робота (МКР). Ваговий коефіцієнт дорівнює 40. Максимальна кількість балів за контрольну роботу становить $1 \times 40 = 40$ балів. Нарахування балів за контрольну роботу:

- «відмінно», повна відповідь (не менше 90 % потрібної інформації) 36-40 балів;
- «добре», достатньо повна відповідь (не менше 75 % потрібної інформації або незначні неточності) 30 - 35 балів;
- «задовільно», неповна відповідь (не менше 60 % потрібної інформації та деякі помилки) 24 - 29 балів;
- «незадовільно», незадовільна відповідь (менше 60 % потрібної інформації) 0.

3). Екзамен. Критерії оцінювання. Завдання містить два теоретичні питання, кожне з яких оцінюється у 20 балів. Всього $2 \times 20 = 40$ балів.

Нарахування балів за екзаменаційну відповідь:

- повна відповідь (не менше 90 % потрібної інформації) 36-40 балів;
- достатньо повна відповідь (не менше 75 % потрібної інформації) 30-35 балів;
- неповна відповідь (не менше 60 % потрібної інформації) 24-29 балів;
- незадовільна відповідь (менше 60 % потрібної інформації) 0.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

<i>Кількість балів</i>	<i>Оцінка</i>
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 семестровий контроль:

1. Загальна характеристика методів моделювання фізичних явищ при різних типах фізичних припущень/спрощень.
2. Різницеві схеми при інтегруванні рівнянь руху заряджених частинок в електричних та магнітних полях
3. Загальні принципи побудови консервативних різницевих схем для інтегрування диференційних рівнянь.
4. Консервативна схема інтегрування рівнянь руху частинки з магнітним моментом.
5. Дифузія невзаємодіючих частинок. Оптимізація алгоритму моделювання цього процесу.
6. Оцінки часу дифузії частинок в різних геометріях генеруючих/поглинаючих границь системи.

7. Ефекти тіні при осадженні частинок на базовий кластер довільної форми. Загальний математичний формалізм в задачах електростатики і задачах дифузії.
8. Поверхнева дифузія атомів. Характеристики режимів синтезу нанокластерів (квазі-рівноважний, проміжний, квазі-хаотичний)
9. Різницева схема Кранка-Ніколса для рівнянь параболічного типу. Метод прогонки пошуку роз'язку системи лінійних рівнянь для трьох-діагональних матриць. Похибки методу.
10. Чисельний роз'язок квазі-лінійних диференціальних рівнянь.
11. Метод змінних напрямків для рівнянь параболічного типу.
12. Принцип роботи плазмової лінзи, основні припущення при моделюванні її роботи.
13. Методика моделювання particles-in-cells. Походження шумів в ході обчислень
14. Радіус Дебая. Оцінка мінімальної густини частинок в системі для задовільної коректності кінцевого результату.
15. Методика розрахунку електричного поля в плазмовій лінзі.
16. Динаміка спінів в зовнішніх магнітних полях. Продольна та поперечна релаксація.
17. Керування динамікою системи спінів в режимі «спінового відлуння»
18. Принципи магніторезонансної мікроскопії. Резонансний шар.
19. Негативна роль теплових коливань кантилівера в магніторезонансній мікроскопії (якісний аналіз) та методика придушення цих коливань на резонансній частоті Рабі.
20. Загальна характеристика методу досліджень фізичних явищ на основі Монте-Карло моделей.
21. Побудова Монте-Карло моделі синтезу наночастинок и термічному розпаду нанодротів.
22. Роль ефектів тіні при синтезі наночастинок з різною формою.
23. Оцінка анізотропії густини поверхневої енергії методом підрахунку розірваних зв'язків.
24. Динамічні явища на поверхні нанодротів при спонтанній модифікації їх поверхні (розпаді на періодично розташовані фрагменти).
25. Фізичні принципи, які визначають властивості акустичних метаматеріалів.
26. Отримання дисперсійного рівняння для системи мультівібраторів в вузлах кристалічної ґратки (продемонструвати простому прикладі: одновимірна система та двох-елементний вузол-вібратор).
27. Теорема Блоха для акустичних хвиль в метаматеріалі, зона Бріллюена. Графічне відображення роз'язку дисперсійного рівняння для акустичного метаматеріалу в двох- і трьох-вимірному випадках.

Сертифікати проходження дистанційних чи онлайн курсів за відповідною тематикою можуть бути зараховані за умови виконання вимог, наведених у Наказі № 7-177 ВІД 01.10.2020 Р. «Про затвердження положення про визнання в КПІ ім. Ігоря Сікорського результатів навчання, набутих у неформальній/інформальній освіті».

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено професором кафедри загальної фізики та моделювання фізичних процесів доктором фіз.-мат. наук, професором Горшковим В'ячеславом Миколайовичем

Ухвалено кафедрою загальної фізики та моделювання фізичних процесів (протокол № 06-21 від 18.06.2021 р.)

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 11 від 23.06.2021 р.)