



МЕТОДИ КЛАСИЧНОЇ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другій (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>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, весінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>5 (150), 36 лекцій, 18 лаб., 96 - срс</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Екзамен, модульна контрольна робота</i>
Розклад занять	<i>http://rozklad.kpi.ua/</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор : д.ф.-м.н., с.н.с. Саріков Андрій Вікторович, andrey.sarikov@gmail.com Лабораторні: : д.ф.-м.н., с.н.с. Саріков Андрій Вікторович, andrey.sarikov@gmail.com</i>
Розміщення курсу	<i>Посилання на методичне забезпечення:</i>

Програма навчальної дисципліни

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

Навчальна дисципліна «Методи класичної молекулярної динаміки» належить до циклу професійної підготовки фахівців фізичних спеціальностей. **Метою** навчальної дисципліни є формування у студентів здатностей проводити комп'ютерне моделювання фізичних процесів за допомогою методів класичної молекулярної динаміки. **Предметом** дисципліни є навчання і підготовка фахівця з напрямку підготовки 104 «Фізика та астрономія», який зможе користуватись методами молекулярної динаміки в процесі вирішення фізичних задач. **Завданнями** даної дисципліни є формування у студентів знань стосовно принципів, що лежать в основі методу молекулярної динаміки, можливостей, характеристик та особливостей застосування методу молекулярної динаміки й інтерпретації отриманих результатів, основи роботи з програмним забезпеченням для моделювання методом класичної молекулярної динаміки LAMMPS та основи роботи з програмним забезпеченням для візуалізації та розрахунку характеристик досліджуваних об'єктів OVITO.

Навчальна дисципліна формує у студентів наступні *загальні та фахові компетентності*:

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях

ЗК02. . Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК04. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК06. Здатність виявляти, ставити та вирішувати проблеми.

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 новоздобуті знання в області фізики та/або астрономії та інтегрувати їх із уже наявними, а також самостійно опанувати 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.

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі **програмні результати навчання**:

ПРН01 Вміти 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 Вміти проводити експериментальні та/або теоретичні дослідження з фізики та/або 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 Вміти обирати ефективні математичні методи та інформаційні технології та застосовувати їх для здійснення досліджень та/або інновацій в області фізики та/або астрономії.

ПРН11 Уміти 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.

Отримані практичні навички та засвоєні теоретичні знання під час вивчення навчальної дисципліни «Методи класичної молекулярної динаміки» можна використовувати в подальшому для виконання прикладних та фундаментальних наукових досліджень, що формують нові природничо-наукові знання.

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

Отримані практичні навички та засвоєні теоретичні знання під час вивчення навчальної дисципліни можна використовувати в подальшому для виконання прикладних та фундаментальних наукових досліджень, що формують нові природничо-наукові знання, при аналізі отриманих результатів, отриманих під час проходження практики та написанні магістерської дисертації.

В структурно-логічній схемі програми підготовки фахівця дисципліну забезпечують наступні дисципліни та кредитні модулі: "Інформатика та програмування", "Математичний аналіз", "Загальна фізика". Дисципліна забезпечує наступні навчальні дисципліни "Підготовка магістерської дисертації".

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Вступна лекція

Тема 2. Моделювання на різних масштабах

Тема 3. Кристали та дефекти у кристалах

Тема 4. Вступ до методу молекулярної динаміки

Тема 5. Програмне забезпечення LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) для

моделювання методом молекулярної динаміки

Тема 6. Основи роботи зі скриптами LAMMPS

Тема 7. Основи роботи з програмним забезпеченням для візуалізації та аналізу Open Visualization Tool (OVITO)

Тема 8. Команди додаткового меню OVITO

Тема 9. Введення та виведення інформації при роботі з LAMMPS

Тема 10. Потенціали, що описують міжатомну взаємодію при моделюванні методом молекулярної динаміки

Тема 11. Реалізація потенціалів в LAMMPS

Тема 12. Контроль температури при моделюванні методом молекулярної динаміки

Тема 13. Граничні умови при моделюванні методом молекулярної динаміки

Тема 14. Початкові умови при моделюванні методом молекулярної динаміки

Тема 15. Способи модифікації кристалічної структури комірки за допомогою програмного забезпечення OVITO

Тема 16. Робота зі змінними та виразами в LAMMPS та OVITO

Тема 17. Розрахунок характеристик досліджуваного об'єкта при моделюванні методом молекулярної динаміки

Тема 18. Розширені можливості при моделюванні методом молекулярної динаміки

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література:

1. A. Martini, Short course on molecular dynamics simulation, <https://nanohub.org/resources/7570>.
2. M. P. Allen, Introduction to molecular dynamics simulation, in: Computational soft matter: From synthetic polymers to proteins. Lecture notes / N. Attig, K. Binder, H. Grubmüller, K. Kremer (Eds.), John von Neumann Institute for Computing, Jülich, NIC Series, Vol. 23, 2004, p. 1-28.
3. <https://docs.lammps.org/Manual.html>.
4. <https://www.ovito.org/docs/current/>; <https://www.ovito.org/docs/current/python/>.
5. M. Hjørth-Jensen, Computational Physics, University of Oslo, 2006, 375 p.

Додаткова література:

6. S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
7. A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the open visualization tool, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2010).
8. J. P. Hirth and J. Lothe, Theory of Dislocations, Malabar: Krieger Publishing Company, 1982.
9. D. Frenkel and B. Smit, Understanding molecular simulation, San Diego, San Francisco, New York, Boston, London, Sydney, Tokyo: Academic Press, 2002, 638 p.
10. A. Sarikov, A. Marzegalli, L. Barbisan, F. Montalenti, and L. Miglio, Structure and stability of partial dislocation complexes in 3C-SiC by molecular dynamics simulations, Materials **12**, 3027 (2019).
11. A. Sarikov, A. Marzegalli, L. Barbisan, E. Scalise, F. Montalenti, and L. Miglio, Molecular dynamics simulations of extended defects and their evolution in 3C-SiC by different potentials, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **28**, 015002 (2020).
12. E. Scalise, A. Sarikov, L. Barbisan, A. Marzegalli, D. B. Migas, F. Montalenti, and L. Miglio, Thermodynamic driving force in the formation of hexagonal-diamond Si and Ge nanowires, Appl. Surf. Sci. **545**, 148948 (2021).
13. A. Sarikov, A. Marzegalli, L. Barbisan, M. Zimbone, C. Bongiorno, M. Mauceri, D. Crippa, F. La Via, and L. Miglio, Mechanism of stacking fault annihilation in 3C-SiC epitaxially grown on Si(001) by molecular dynamics simulations, CrystEngComm **23**, 1566 (2021).
14. Monte Carlo simulations lecture course by Kai Nordlund, <http://beam.helsinki.fi/~knordlund/mc/>.

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

В рамках дисципліни заплановано проведення лекційних, лабораторних занять та самостійної роботи студентів. Теми дисципліни взаємозв'язані, матеріал вивчається в логічній послідовності. На лекційних заняттях розкриваються найбільш суттєві теоретичні питання, які дозволяють забезпечити студентам можливість глибокого самостійного вивчення всього програмного матеріалу. Теми та порядок виконання лабораторних занять сформовано в логічній послідовності і повністю узгоджуються з метою дисципліни. Лекційні та лабораторні знання поглиблюються шляхом самостійної роботи з використанням рекомендованої літератури та глобальної мережі Internet. Заняття проводяться у комп'ютерній лабораторії (у разі очного режиму навчання) та із застосуванням програми віддаленого доступу до ПК у лабораторії через Anydesk (у разі дистанційного режиму навчання). Лекції проводяться у вигляді презентації теоретичного матеріалу з використанням мультимедіа-проектора. Лабораторні заняття з відповідної теми проводяться з використанням ПК. Модульна контрольна робота проводиться на атестаційних тижнях у комп'ютерній лабораторії. Велика частина методичних матеріалів міститься у вищевказаній методичній літературі.

Лекційні заняття

№ з/п	Назва теми та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів з посиланням на літературу)
1	<p>Вступна лекція</p> <p><i>Задачі та мета курсу. Структура курсу. Використання моделювання при розв'язанні наукових задач. Термодинамічні ансамблі та їхні характеристики. Моделювання термодинамічних ансамблів.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [9, 14]</p>
2	<p>Моделювання на різних масштабах</p> <p><i>Методи моделювання на різних масштабах: з перших принципів, молекулярної динаміки, Монте-Карло, чисельного моделювання. Задачі, що розв'язують з використанням методів моделювання на різних масштабах. Обмеження зазначених методів за модельованим часом, розміром модельованої системи, надійністю отриманих результатів та використанням обчислювальних ресурсів. Взаємне використання результатів, отриманих різними методами.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [9, 14]</p>
3	<p>Кристали та дефекти у кристалах</p> <p><i>Ідеальна кристалічна ґратка. Типи дефектів у кристалах. Точкові дефекти. Генерація та рекомбінація точкових дефектів. Рівноважні концентрації точкових дефектів. Дислокації та дефекти пакування. Основні характеристики дислокацій. Когерентні та некогерентні границі двійникових областей. Антифазні границі. Вплив дефектів на характеристики кристалів.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [8]</p>
4	<p>Вступ до методу молекулярної динаміки</p> <p><i>Ідея, що лежить в основі методу молекулярної динаміки. Схема моделювання методом молекулярної динаміки. Поняття про потенціали, що описують взаємодію між атомами. Молекулярна динаміка класична та з перших принципів. Інтерпретація результатів, отриманих моделюванням методом молекулярної динаміки. Алгоритми інтегрування рівнянь руху у методі молекулярної динаміки. Вибір часового кроку.</i></p>

	<p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [9]</p>
5	<p>Програмне забезпечення LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) для моделювання методом молекулярної динаміки</p> <p><i>Програмне забезпечення LAMMPS: сайт, дистрибутиви, опис, довідка, можливості, платформи, особливості. Встановлення LAMMPS у різних операційних системах. Бібліотеки розширення LAMMPS у системах Linux. Сумісність бібліотек з різними версіями LAMMPS. Запуск скрипта на виконання у різних системах. Бібліотека прикладів скриптів LAMMPS як частина дистрибутиву.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [6]</p>
6	<p>Основи роботи зі скриптами LAMMPS</p> <p><i>Структура файлу скрипта та мова програмування. Основні команди LAMMPS. Послідовність команд у скрипті. Створення комірок з різними кристалічними структурами та різними орієнтаціями. Мінімізація енергії комірки. Алгоритми мінімізації енергії. Команди fix. Запис результатів моделювання у dmp-файл. Стандартна структура dmp-файлу.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [6]</p>
7	<p>Основи роботи з програмним забезпеченням для візуалізації та аналізу Open Visualization Tool (OVITO)</p> <p><i>Програмне забезпечення OVITO, офіційний сайт. Безкоштовні та платні версії. Формати файлів. Програмні сценарії. Робота з dmp-файлами. Візуалізація послідовності станів досліджуваної системи.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [7]</p>
8	<p>Команди додаткового меню OVITO</p> <p><i>Групи команд аналізу, виділення кольором, модифікації та вибору. Засоби створення графічних та відео файлів. Команди аналізу характеристик дислокацій та атомів. Команди керування представленням на екрані.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [7]</p>
9	<p>Введення та виведення інформації при роботі з LAMMPS</p> <p><i>Файли даних та dmp-файли. Структура файлу даних. Використання файлів даних для ініціалізації структури досліджуваного об'єкта. Структура кастомізованого dmp-файлу. Керування виведенням інформації на екран та записом у dmp-файл. Використання інформації, що міститься у dmp-файлі, системою OVITO.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [6]</p>
10	<p>Потенціали, що описують міжатомну взаємодію при моделюванні методом молекулярної динаміки</p> <p><i>Види та характеристики потенціалів. Форми представлення потенціалів: математичні вирази, таблиці, алгоритми розрахунків. Потенціали, що ґрунтуються на машинному навчанні. Математична структура класичних потенціалів, параметризація. Швидкодія та коректність результатів, отриманих при використанні різних потенціалів. Вибір потенціалів для моделювання конкретної задачі.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [9-11]</p>

11	<p>Реалізація потенціалів в LAMMPS</p> <p><i>Стандартний набір потенціалів LAMMPS. Структура файлу класичного потенціалу. Створення файлу класичного потенціалу у форматі LAMMPS з використанням параметрів, опублікованих у науковій літературі. Різні форми представлення потенціалів у наукових роботах. Можливості розширення стандартного набору потенціалів LAMMPS.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [6]</p>
12	<p>Контроль температури при моделюванні методом молекулярної динаміки</p> <p><i>Методи контролю температури при моделюванні методом молекулярної динаміки. Перенормування швидкостей атомів. Контроль температури із застосуванням термостатів. Види термостатів: Берендсена, Андерсена, Носе-Гувера. Контроль температури модельованої системи у LAMMPS. Моделювання різних ансамблів у LAMMPS.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [9]</p>
13	<p>Граничні умови при моделюванні методом молекулярної динаміки</p> <p><i>Види граничних умов, особливості їх використання. Вибір розміру комірки для моделювання з урахуванням граничних умов. Особливості використання різних потенціалів для моделювання границі. Аналітичний потенціал з упорядкуванням зв'язків, потенціал Вашішти та адаптивний потенціал Гаусса. Робота з групами атомів в LAMMPS.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [9, 12, 13]</p>
14	<p>Початкові умови при моделюванні методом молекулярної динаміки</p> <p><i>Початкові розташування атомів та початкові швидкості. Створення комірок аморфної фази. Особливості встановлення початкової температури при моделюванні у системі LAMMPS. Побудова списків сусідніх атомів.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [6, 9]</p>
15	<p>Способи модифікації кристалічної структури комірки за допомогою програмного забезпечення OVITO</p> <p><i>Використання скриптів на мові Python при роботі з OVITO. Математичний алгоритм вставлення дислокацій в кристалічну ґратку. Реалізація зазначеного алгоритма у вигляді скрипта на мові Python для OVITO. Програмний сценарій реалізації зазначеного алгоритма в OVITO. Алгоритм ідентифікації дислокаційної структури кристалу в OVITO. Створення інших типів дефектів у кристалічних комірках в системі OVITO.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [7, 8]</p>
16	<p>Робота зі змінними, виразами та циклами в LAMMPS та OVITO</p> <p><i>Типи змінних у LAMMPS та особливості їх синтаксису. Вирази та обчислення у LAMMPS. Реалізація алгоритму створення дислокацій у кристалі у скрипті LAMMPS. Робота з циклами у LAMMPS. Послідовності <i>dmp</i>-файлів. Змінні, вирази та обчислення в OVITO.</i></p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [6, 7]</p>
17	<p>Розрахунок характеристик досліджуваного об'єкта при моделюванні методом молекулярної динаміки</p> <p><i>Термодинамічні характеристики. Пружні характеристики. Температура плавлення. Розрахунок характеристик досліджуваного об'єкта при використанні LAMMPS. Команди <i>compute</i>. Стандартні змінні LAMMPS. Зберігання розрахованих значень характеристик у <i>dmp</i>-файл. Аналіз та використання розрахованих характеристик засобами OVITO.</i></p>

	Основна література: [1-5]. Додаткова література: [6, 9]
18	<p>Розширені можливості при моделюванні методом молекулярної динаміки</p> <p>Метод натягнутої гумової стрічки (Nudged Elastic Band). Обмеження методу молекулярної динаміки та способи розширення його можливостей. Метадинаміка.</p> <p>Основна література: [1-5]. Додаткова література: [9]</p>

Лабораторні заняття

№ з/п	Назва теми (перелік завдань, які виконуються під керівництвом викладача)
1	<p>Основи роботи з програмним забезпеченням LAMMPS та OVITO</p> <p><i>Аналіз скрипта LAMMPS, наданого викладачем. Запуск скрипта на виконання. Редагування скрипта. Візуалізація отриманих результатів з використанням програмного забезпечення OVITO.</i></p>
2	<p>Робота зі скриптом LAMMPS</p> <p><i>Створення кристалічних комірок з різними кристалографічними орієнтаціями. Мінімізація енергії. Визначення сталої ґратки кристалу, ґрунтуючись на мінімальному значенні його енергії. Виведення результатів на екран. Робота з невизначеними змінними.</i></p>
3	<p>Команди додаткового меню OVITO</p> <p><i>Використання команд додаткового меню OVITO для керування візуальним представленням комірки на екрані або її редагування. Створення файлів даних. Зберігання та читання програмних сценаріїв.</i></p>
4	<p>Створення файлу потенціалу у форматі LAMMPS</p> <p><i>Використання параметрів, опублікованих в науковій літературі, для створення файлу аналітичного потенціалу з упорядкуванням зв'язків формату LAMMPS для GaAs.</i></p>
5	<p>Створення кристалічних комірок з дислокаціями</p> <p><i>Використання скрипта на мові Python та програмного сценарію в середовищі OVITO для створення дислокацій з різними характеристиками у кристалічній комірці. Аналіз дислокацій засобами OVITO.</i></p>
6	<p>Моделювання поведінки дислокацій у кристалах при високотемпературних відпалах</p> <p><i>Робота з групами атомів в LAMMPS. Робота з жорсткими, періодичними та вільними граничними умовами. Моделювання утворення дислокаційного комплексу Ломера-Коттрелла в 3C-SiC в процесі еволюції часткових дислокацій Шоклі при високотемпературних відпалах. Робота з виразами та змінними в OVITO. Розрахунок деформації та пружної енергії вихідної системи та системи з утвореним дислокаційним комплексом Ломера-Коттрелла.</i></p>
7	<p>Розрахунок характеристик досліджуваного об'єкта при моделюванні методом молекулярної динаміки</p> <p><i>Кастомізація dump-файлу. Моделювання коефіцієнта термічного розширення кристала.</i></p>
8	<p>Робота з циклами в LAMMPS</p> <p><i>Програмування циклів. Моделювання температурної залежності об'єму кристала. Визначення температури плавлення.</i></p>

9	Залік
---	-------

6. Самостійна робота студента

№ з/п	Назва теми , що виноситься на самостійне опрацювання (завдання на СРС)	Кількість годин СРС
1	<p>Основи роботи з LAMMPS</p> <p>Шляхом редагування скрипта LAMMPS створити комірки з різними кристалічними структурами, кристалографічними орієнтаціями, з різних речовин з відповідними сталими ґратки, що задаються безпосередньо у файлі скрипта або вводяться при виконанні скрипта, з різними розмірами. Застосувати різні потенціали зі стандартного набору LAMMPS. Провести мінімізацію енергії комірок, змінюючи значення параметрів команди мінімізації, з аналізом часу виконання команди. Провести модельовані відпали комірок у різних ансамблях при різних значеннях кроку за часом та температури. Варіювати параметри швидкості виведення результатів на екран та запису у dump-файл. Проаналізувати характер еволюції значень температури та повної енергії системи у процесі відпалів. Проаналізувати швидкість релаксації температури модельованої системи до значення температури відпалу залежно від її початкового значення.</p>	24
2	<p>Основи роботи з OVITO</p> <p>Робота з виглядом комірки на екрані: повертати, переміщувати, змінювати видимі розміри, змінювати налаштування представлення комірки на екрані, виділяти області комірки для візуалізації, застосовувати кольори для позначення атомів та груп атомів.</p> <p>Редагування комірки: використовувати команди вибору атомів та груп атомів вручну та з використанням булевих виразів, інвертувати вибір атомів, видаляти атоми, групи атомів та області комірки, змінювати геометричні характеристики комірки (розмір, викривлення тощо), формувати суперкомірки з використанням команди створення періодичних зображень. Знаходити координати атомів, відстані між атомами та кути. Зберігати комірки у файли даних. Створювати програмні сценарії. Створювати файли зображень та відео.</p>	24
3	<p>Створення дефектів у кристалічній ґратці</p> <p>Використовуючи засоби редагування комірок програмного забезпечення OVITO, створити комірки кристалів, що містять точкові дефекти (вакансії, міжвузлові атоми, пари Френкеля), порожнини правильної форми, включення іншої фази, антифазні границі. Ознайомитися з типами дислокацій, притаманних кубічній кристалічній структурі. Використовуючи програмний сценарій та алгоритм вставлення дислокацій, реалізований у мові Python для OVITO, створити кристалічні комірки кубічної модифікації з типовими дислокаціями.</p>	24
4	<p>Моделювання еволюції структури дефектного кристала при високотемпературних відпалах</p> <p>Створити комірки 3C-SiC, що містять пари часткових дислокацій Шоклі з протилежними векторами Бюргерса. Промодельовати процес анігіляції дислокацій. Порівняти швидкість процесу для дислокацій з векторами Бюргерса під кутами 30° та 90° до лінії дислокації. Порівняти швидкість еволюції системи при застосуванні різних потенціалів.</p> <p>Створити комірки 3C-SiC з парами дислокацій для моделювання процесу</p>	24

<p>утворення стабільних дислокаційних комплексів. Забезпечити періодичність границь комірки у всіх напрямках. Промодельовати процес утворення стабільних дислокаційних комплексів в 3C-SiC. Скласти карту деформацій та розподілу пружної енергії у вихідних комірках та у комірках з утвореними дислокаційними комплексами з використанням OVITO.</p>	
--	--

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Правила відвідування занять

Студентам рекомендується відвідувати заняття.

Правила поведінки на заняттях

Під час занять студенти можуть використовувати засоби зв'язку для пошуку інформації по темі заняття в мережі Інтернет.

Правила захисту самостійних та домашніх контрольних робіт студентів

Виконані самостійні, лабораторні, модульні контрольні роботи студентів завантажуються у відповідні розділи дистанційного курсу.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів

Несвоєчасна (пізніше на 1 тиждень) здача самостійної роботи студента без поважної причини -1 бал
Несвоєчасний (пізніше на 1 тиждень) захист МКР без поважної причини -1.5 бали.

Виконання завдання підвищеної складності +10 балів (максимум 5 завдань по 2 бали за кожне)

Політика дедлайнів та перескладань

Дедлайн захисту лабораторних робіт — 2 тижні після видачі завдання.

Політика щодо академічної доброчесності

Політика та принципи академічної доброчесності визначені у розділі 3 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

Норми етичної поведінки

Норми етичної поведінки студентів і працівників визначені у розділі 2 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського».

Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

Процедура оскарження результатів контрольних заходів

Студенти мають можливість підняти будь-яке питання, яке стосується процедури контрольних заходів та очікувати, що воно буде розглянуто згідно із наперед визначеними процедурами. Студенти мають право оскаржити результати контрольних заходів, але обов'язково аргументовано, пояснивши з яким критерієм не погоджуються відповідно до оціночного листа та/або зауважень.

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

Поточний контроль: лабораторні роботи, модульна контрольна робота

Лабораторні роботи сформовано так, що їх завдання сприяють навичкам роботи з методами класичної молекулярної динаміки, що є важливим для їх подальшого застосування під час роботи над магістерськими дисертаціями та у майбутній науковій роботі.

Модульна контрольна робота проводиться у формі двох контрольних робіт на ПК у комп'ютерній

аудиторії під час атестаційних тижнів (у разі очного навчання).

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

Критерій		Перша атестація	Друга атестація	
Термін атестації		8-ий тиждень	14-ий тиждень	
Умови отримання атестації	Поточний рейтинг		≥ 8.1 балів	≥ 16.2 балів
	Поточний контрольний захід	Лабораторні роботи 1-4	+	+
	Поточний контрольний захід	Лабораторні роботи 5-8	-	+
	Поточний контрольний захід	Модульна контрольна робота №1	+	+
	Поточний контрольний захід	Модульна контрольна робота №2	-	+

Семестровий контроль: *екзамен*

Умови допуску до семестрового контролю.

Обов'язкові:

Виконані лабораторні роботи

Виконана модульна контрольна робота

Необов'язкові:

Виконані самостійні роботи

Позитивний результат першої та другої атестації

Система рейтингових балів

РСО з даної дисципліни, складається з двох складових:

- стартової – призначена для оцінювання заходів поточного контролю впродовж семестру;
- екзаменаційної – призначена для оцінювання окремих запитань (завдань) на екзамені.

Стартові бали формуються як сума рейтингових балів, отриманих здобувачем за результатами заходів поточного контролю, заохочувальних та штрафних балів.

Після оцінювання відповідей здобувача на екзамені (виконання екзаменаційної контрольної роботи) викладач підсумовує стартові бали та бали за екзамен, зводить до рейтингової оцінки та переводить до оцінок за університетською шкалою

Розрахунок шкали рейтингу:

№ з/п	Контрольний захід семестр	%	Ваговий бал	Кіль-ть	Всього
1	Виконання та захист лабораторних робіт	28	3.5	8	28
2	Виконання та захист самостійних робіт студента	12	3	4	12
3	Модульна контрольна робота	10	5	2	10
4	Екзамен	50	50	1	50
	Всього				100

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською 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)

Типові питання, які виносяться на екзамен.

1. Моделювання термодинамічних ансамблів.
2. Методи моделювання на різних масштабах.
3. Види дефектів у кристалах.
4. Загальна схема моделювання методом молекулярної динаміки.
5. Алгоритми інтегрування рівнянь руху у методі молекулярної динаміки.
6. Класичні потенціали, що описують взаємодію між атомами.
7. Способи задання вихідних положень атомів при моделюванні методом молекулярної динаміки.
8. Види граничних умов при моделюванні методом молекулярної динаміки.
9. Способи контролю температури при моделюванні методом молекулярної динаміки.
10. Розрахунок термодинамічних характеристик модельованої системи.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено доцентом, д.ф.-м.н. Саріковим Андрієм Вікторовичем

Ухвалено кафедрою загальної фізики та моделювання фізичних процесів (протокол № 06-24 від 11.06.2024)

Погоджено Методичною комісією фізико-математичного факультету (протокол № 10 від 25.06.2024)