

## ОПИС/Силабус дисципліни/модуля

<b>Коротка назва університету / підрозділу</b> дата (місяць / рік)	НУ «Запорізька політехніка» 08/2021
<b>Назва модулю / дисципліни</b>	Основи моделювання наносистем
<b>Код:</b>	ОМНС

Властивості і технології формування наноструктур, що складаються з  $10^2$ - $10^6$  атомів, з характерними розмірами  $10^{-9}$  –  $10^{-7}$  м становлять один з головних напрямів сучасних досліджень. При цьому, модельні експерименти з наноструктурами мають не тільки власну дослідницьку цінність, але економлять ресурси і час. Дисципліна охоплює найбільш значимі методи і фізичні процеси, а саме методи молекулярної динаміки (МД) і Монте-Карло (МК), континуальні рівняння радіаційно-стимульованого масоперенесення, а також сферу взаємодії енергетичних іонів з твердотільними поверхнями.

Енергетичні пучки іонів є складовою частиною засобів мікро- і нанотехнологій виробництва та контролю елементної бази електронних пристроїв – модифікації фізико-хімічних властивостей поверхні і об'єму, осадження багатосарових систем з газової фази у супроводі іонного бомбардування, різних видів компонентного та структурного аналізу. Атомні каскади зіткнень моделювалися МД методом, який базується на розв'язанні класичних рівнянь руху атомів з обчисленням сил взаємодії, що відповідають атомним потенціалам.

Таким чином, дисципліна “**Основи моделювання наносистем**” дає уявлення про методи і проблематику моделювання в області нанотехнологій, які є важливою умовою застосування *методів системного аналізу* у цій сфері. Відмітимо, що Нобелівська Премія з фізики за 2021 рік була присуджена “... to Syukuro Manabe, Klaus Hasselmann and Giorgio Parisi “for groundbreaking contributions to our understanding of **complex physical systems**.””

<b>Викладачі</b>	<b>Підрозділ університету</b>
Корніч Григорій Володимирович	Кафедра системного аналізу та обчислювальної математики

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

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

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

<b>ECTS (Кредити модуля)</b>	<b>Загальна кількість годин</b>	<b>Аудиторні години</b>	<b>Самостійна робота</b>
4,5	135	45	90
<b>Мета навчання дисципліни (модуля): компетенції надбані внаслідок вивчення дисципліни (модуля)</b>			
<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ 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.</li> <li>➤ 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.</li> <li>➤ Розуміння стану і проблематики використання штучних нейронних мереж для моделювання міжатомних взаємодій.</li> <li>➤ Моделювання атомних нанокластерів та утворення тонких плівок. Переваги та недоліки різних методів моделювання. Поняття та актуальність прискорених методів молекулярної динаміки, масштабування модельного часу.</li> <li>➤ Особливості кластерного аналізу великих масивів результатів моделювання, ідентифікація структури результуючих даних.</li> <li>➤ Розуміння можливості адаптації та альтернативного застосування методів моделювання наносистем до моделювання систем іншої природи.</li> </ul>			
<b>Результати навчання в термінах компетенцій</b>		<b>Методи навчання (теорія, лабораторні, практичні)</b>	<b>Контроль якості (письмовий екзамен, усний екзамен, звіт)</b>
<p>– вільно володіти державною мовою та спілкуватися іноземною мовою;</p> <p>– 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;</p> <p>– 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;</p> <p>– розуміти універсальність, здатність до адаптації і застосування засвоєних методів моделювання наносистем для розв'язання задач іншої природи.</p>		<p>Використання у лекціях та на лабораторних заняттях</p> <p>Теоретичні знання, отриманні під час лекції та консультацій</p> <p>Самостійне та під керівництвом викладача рішення задач</p> <p>Самостійне та під керівництвом викладача рішення задач</p>	<p>Окремого оцінювання не передбачено</p> <p>Окреме оцінювання не проводиться</p> <p>Оцінюються під час модульного контролю та екзамену</p> <p>Окреме оцінювання не проводиться</p>

Теми курсу	Аудиторні заняття						Час та завдання на самостійну роботу	
	Лекцій	Інші види	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 МК, метод МД.	4					16	12	
Тема 2. Основи теорії лінійних зіткнувальних каскадів атомів. Лінійність, як загальний 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.	4					16	12	
Тема 3. Континуальні рівняння масоперенесення. Іонне перемішування, дифузія по радіаційним вакансіям та міжвузловим атомам. Ефекти Кіркендала. Розмірні дефекти. Рівняння таких типів в задачах іншої природи.	4				4	20	12	Лабораторна робота 1
Тема 4. Методи МК, моделювання термоактивованих процесів методом МК. Ідеологія підходу МК до задач іншої природи.	4				4	20	12	Лабораторна робота 2
Тема 5. Метод класичної МД. Парні та багаточастинкові потенціали міжатомної взаємодії. Потенціали притягання та відштовхування. Штучні нейронні мережі. Чисельні методи та умови розв'язання рівнянь руху атомів.	4					16	12	

Тема 6. Метод класичної МД (продовження). Періодичні граничні умови та кібернетичні термостати. Моделювання температурних кристалів. Метод списку “найближчих сусідів”.	4				6	25	15	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 поверхневих/вільних нанокластерів. Поняття прискорених методів МД та їх актуальність. Масштабування модельного часу.	6	1				22	15	
<b>Усього годин</b>	<b>30</b>	<b>1</b>			<b>14</b>	<b>135</b>	<b>90</b>	

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		задовільно
	70-74		
	60-69		
	35-59		
0-34	незадовільно з обов’язковим повторним вивченням дисципліни		

Автор	Рік	Назва	інформація видання	Видавництво / онлайн доступ
<b>Обов’язкова література</b>				
Г.В. Корніч	2019	Поверхня твердого тіла при бомбардуванні низькоенергетичними іонами: моделювання і аналіз атомної системи.	Монографія	Запоріжжя: НУ “Запорізька політехніка” – 2019.- 302 с. ISBN 978-617-529-240-2 <a href="http://eir.zp.edu.ua/handle/123456789/7624">http://eir.zp.edu.ua/handle/123456789/7624</a>
Habasaki J.	2020	Molecular Dynamics of	Навчаль-	Jenny Stanford

		Nanostructures and Nanoionics. Simulation in Complex Systems.	ний посібник	Publishing.- 2020.- 338 p. ISBN 9789814800778 .
Snehanshu Pal, Bankim Chandra Ray.	2020	Molecular Dynamics Simulation of Nanostructured Materials. An Understanding of Mechanical Behavior	Навчальний посібник	CRC Press.- 2020.- 334 p. ISBN 9780367029821.
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. Широкоград, В.І. Кіпріч	2021	Основи моделювання наносистем	Методичні вказівки	Запоріжжя: НУ "Запорізька політехніка", 2021. – 21 с. <a href="http://eir.zntu.edu.ua/handle/123456789/7771">http://eir.zntu.edu.ua/handle/123456789/7771</a>
<b>Додаткова література</b>				
Behrisch R. (Р. Беріш, П. Зигмунд, М.Робинсон, Х.Андерсен та ін.)	1981 (1984)	Sputtering by Particle Bombardment I (Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск I)	Тематический сборник	Springer-Verlag Berlin Heidelberg.- 1981.- 284 p. ISBN 978-3-662-30888-2 . DOI 10.1007/3-540-10521-2. (Пер. с англ./ Под ред. Р. Беріша.- М.: Мир.- 1984. – 336 с.)
Behrisch R. P. (Беріш, Г. Бетц, Г. Венер та ін.)	1983 (1986)	Sputtering by Particle Bombardment II (Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск II)	Тематический сборник	Springer-Verlag Berlin Heidelberg.- 1983.- 394 p. ISBN 978-3-662-31169-1. DOI 10.1007/3-540-12593-0. (Р. Беріш.- М.: Мир.- 1986. – 486 с.)
Eckstein W. (В. Екштайн)	1991 (1995)	Computer simulation of ion-solid interactions (Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела)	Монографія	Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1991.- 296 p. ISBN 978-3-642-73515-8, DOI 10.1007/978-3-642-73513-4 (М.: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	Період. журнал, Вид. Elsevier	Materials Today Commun.-23 101107-12. <a href="https://doi.org/10.1016/">https://doi.org/10.1016/</a>

		Ar13 projectiles		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. <a href="https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.002">https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.002</a>
Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G.	2017	Simulation of the interaction of bipartite bimetallic clusters with low-energy argon clusters	Період. журнал, Вид. Springer	Physics of the Solid State.- 59(1).- 2017.- 198-208. <a href="https://doi.org/10.1134/S1063783417010292">https://doi.org/10.1134/S1063783417010292</a>
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. <a href="http://doi.org/10.1134/S1063785016070282">http://doi.org/10.1134/S1063785016070282</a> .
Kornich G.V., Betz G., Kornich V.G., Shulga V.I., Yermolenko O.A.	2011	Synergism in sputtering of copper nanoclusters on graphite substrate at low energy Cu <sub>2</sub> bombardment	Періодичний журнал, Вид. Elsevier	Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 269 (14)- 2011.- 1600-1603. <a href="https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.11.088">https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.11.088</a>
Duda E.V., Kornich G.V..	2019	On the Combination of Methods of Temperature-Accelerated Dynamics and Hyperdynamics	Періодичний журнал, Вид. Springer	J. of Sur. Invest.: X-ray, Synchrot. and Neutron Tech.- 13(4) – 2019.- 667-669. <a href="http://doi.org/10.1134/S1027451019030066">http://doi.org/10.1134/S1027451019030066</a>
Duda E.V., Kornich G.V..	2020	Hyperdynamics Simulation of the Diffusion of a Vacancy in a Crystal	Періодичний журнал, Вид. Springer	J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrot. Neutron Tech.- V.14(6) – 2020.- 1205-1207. <a href="http://doi.org/10.1134/S1027451020050043">http://doi.org/10.1134/S1027451020050043</a> ).
Дуда Е.В., Корнич Г.В	2020	Моделирование диффузии вакансии в кристалле методом температурно-ускоренной динамики	ІМФ ім. Г.В. Курдюмова, НАНУ	Металофізика та Новітні Технології.- 42(3) 2020 341-350. <a href="https://doi.org/10.15407/mfint.42.03.0341">https://doi.org/10.15407/mfint.42.03.0341</a> .
Kornich G.V., Betz G., Zaporojtschenko V.I., Bazhin A.I.	2003	Simulation of ion sputtering of copper clusters from single crystal graphite surface	Пер. журнал, Вид. Springer	Tech. Phys.Let.- 2003.- 29(11).- 938-940. <a href="https://doi.org/10.1134/1.1631370">https://doi.org/10.1134/1.1631370</a>
Kornich G.V., Betz G., King B.V.	1996	Molecular dynamics simulation of low energy ion beam mixing	Періодичний журнал, Вид. Elsevier	NIMB.- 1996.- V.115, N1-4.- P.461-467. <a href="https://doi.org/10.1016/0168-583X(95)01439-X">https://doi.org/10.1016/0168-583X(95)01439-X</a>