



Національна академія наук України
Інститут проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича



Силабус (робоча програма) навчальної дисципліни
АТОМІСТИЧНІ РОЗРАХУНКИ В ФІЗИЧНОМУ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ
ATOMISTIC CALCULATIONS IN MATERIALS PHYSICS

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	10 - Природничі науки
Спеціальність	105 - Прикладна фізика та наноматеріали
Освітня програма	Прикладна фізика та наноматеріали - Applied physics and nanomaterials;
Статус дисципліни	дисципліна вільного вибору
Форма навчання	денна (очна), он-лайн/офф-лайн
Рік підготовки, семестр	2 курс навчання, осінній семестр
Обсяг дисципліни	3 кредити ECTS, 90 годин
Семестровий контроль/ контрольні заходи	залік
Розклад занять	лекція – раз на тиждень (32 години); самостійна робота 58 год., у тому числі на виконання індивідуальних/домашніх завдань 28 год
Мова викладання	українська
Інформація про викладачів	к.х.н., доц., зав. від. Васільєв Олександр Олексійович, o.vasiliev@ipms.kyiv.ua
Розміщення курсу	Google Workspace for Education; доступ за запрошенням викладача

Програма навчальної дисципліни

1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Застосування комп'ютерних алгоритмів для атомістичного моделювання набуває все більш широкого вжитку для пришвидшення відкриття нових матеріалів, розвідки їх фізичних властивостей та особливостей поведінки за різних умов. З їх використанням шлях від ідеї до ринку може бути скорочено з десятиліть до років і навіть місяців. Активний розвиток атомістичних розрахунків за принципами квантової механіки за теорією функціоналу електронної густини зробив можливим таке використання комп'ютерних алгоритмів для прогнозування властивостей простих систем з точністю зіставною з експериментом. Революційний розвиток методів машинного навчання, в тому числі штучних нейронних мереж, та їх адаптація до проблем матеріалознавства робить подібні розрахунки доступними для систем недоступних раніше розмірів та рівня складності. Тому

розрахункові зусилля займають все більш вагоме місце у сталій дослідницькій діяльності провідних матеріалознавчих лабораторій та підприємств світу.

Предмет освітньої компоненти - основні теоретичні засади та практичні реалізації найбільш поширених методів розрахунку фізичних властивостей матеріалів із застосуванням положень квантової-механіки та елементів машинного навчання.

Метою освітньої компоненти є формування у здобувачів вищої освіти (з.в.о.) рівня PhD базові знання та вміння необхідні для ефективного аналізу передової наукової літератури в галузі розрахунку та прогнозування властивостей матеріалів з принципів квантової механіки, застосування атомістичного моделювання та розрахунків для супроводу власних експериментальних робіт з розробки та впровадження нових матеріалів, ефективного використання у власних розробках розрахункових відомостей, накопичених світовою науковою спільнотою в галузі атомістичного моделювання матеріалів у відкритих базах даних, а також формування наступних *компетентностей*:

Інтегральна компетентність:

Здатність продукувати нові ідеї, розв'язувати комплексні проблеми професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності у сфері прикладної фізики та наноматеріалів, застосовувати методологію наукової та педагогічної діяльності, проводити власне наукове дослідження, результати якого мають наукову новизну, теоретичне та практичне значення.

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність до освоєння і системного аналізу через наукове сприйняття і критичне осмислення нових знань.

ЗК02. Здатність до критичного аналізу і креативного синтезу нових ідей.

ЗК03. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК06. Здатність оцінювати соціальну значимість результатів своєї діяльності, бути відповідальним громадянином, усвідомлювати рівні можливостей та гендерні проблеми. проекту або вирішення наукової проблеми.

ЗК07. Здатність дотримуватися етичних норм та авторського права при проведенні наукових досліджень, діяти на основі принципів академічної доброчесності, а також ставитися із повагою до національних та культурних традицій, способів роботи і мислення інших.

Фахові компетентності:

ФК01. Здатність самостійно здійснювати наукову діяльність у галузі прикладної фізики з використанням новітніх наукових теорій, методів та інноваційних технологій.

ФК03. Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі прикладної фізики та наноматеріалів з урахуванням міжгалузевих зв'язків для забезпечення потреб у високоефективних матеріалах, енерго- та ресурсозберігаючих технологіях.

ФК04. Здатність переосмислити наявне та створити нове цілісне знання та/або професійну практику та реалізувати проекти, включаючи власні дослідження, в сфері прикладної фізики та наноматеріалів та споріднених галузях.

ФК05. Спроможність спілкуватись в галузі прикладної фізики та наноматеріалів в діалоговому режимі в різномовному середовищі для ефективного публічного представлення та захисту отриманих наукових результатів на вітчизняних та міжнародних наукових форумах, конференціях і семінарах.

ФК06. Здатність до ініціювання інноваційних комплексних технічних проєктів, лідерства та повної автономності під час їх реалізації.

ФК08. Здатність до постійного самовдосконалення у професійній сфері, відповідальність за навчання інших при проведенні науково-педагогічної діяльності та наукових досліджень в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК09. Здатність до генерації нових ідей, самостійного планування та здійснення наукової діяльності, адаптації та впровадження інноваційних технологій з урахуванням експлуатаційних вимог.

Програмні результати навчання. Після засвоєння освітньої компоненти аспіранти мають продемонструвати такі результати навчання:

РН01. Проявляти наукові погляди та підходи при оцінюванні варіантів створення нових перспективних матеріалів з заданим рівнем властивостей.

РН02. Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі прикладної фізики та наноматеріалів бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності на межі предметних галузей.

РН03. Інтегрувати існуючі методики та методи досліджень та адаптувати їх для розв'язання наукових завдань при проведенні дисертаційних досліджень.

РН05. Описати закономірності та принципи виготовлення і застосування сучасних багатофункціональних матеріалів (особливо наноматеріалів) у виробничому комплексі.

РН11. Використовувати сучасні інформаційні джерела національного та міжнародного рівня для оцінки стану вивченості об'єкту досліджень і актуальності наукової проблеми.

РН18. Дотримуватись етичних норм, враховувати авторське право та норми академічної доброчесності при проведенні наукових досліджень, презентації їх результатів та у науково-педагогічній діяльності.

РН19. Знайти оригінальне інноваційне рішення, направлене на розв'язання конкретної науково-технічної проблеми.

2. Місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою

Перелік освітніх компонент, знань та умінь, володіння якими необхідні аспіранту для успішного засвоєння освітньої компоненти:

Пререквізити:	
Основи матеріалознавства	Знання основ матеріалознавства як міждисциплінарної галузі науки, що вивчає залежність між складом, структурою та властивостями матеріалів у взаємозв'язку з технологією їх отримання, умовами експлуатації та вартістю та вміння аналізувати зазначені взаємозв'язки
Вища математика	Знання основ лінійної алгебри, математичного аналізу, математичної статистики та вміння аналізувати вирази та залежності, описані за методологією зазначених розділів

Основи фізики твердого тіла	Знання будови твердих тіл на атомному рівні, її впливу на вібраційні, електронні, механічні властивості
Фізична хімія	Знання квантово-механічних засад будови речовини, законів термодинаміки
Інформатика	Знання операційних систем на рівні впевненого користувача, базові вміння користування командним рядком, програмування на мовах високого рівня абстракції
Постреквізити:	
Наукова складова	Планування і виконання розрахункових досліджень з використанням сучасних методів та методик атомістичного моделювання матеріалів, критичний аналіз результатів теоретичних досліджень.

3. Зміст освітньої компоненти

Тема 1. Основи атомістичної інформатики матеріалів

- Основні поняття, мета та задачі атомістичної інформатики матеріалів, її міждисциплінарний характер
- Огляд основних опорних понять з дотичних дисциплін: фізичного матеріалознавства, фізики твердого тіла, хімії, математики, інформатики.

Тема 2. Базовий інструментарій атомістичної інформатики матеріалів

- Пакетний менеджер *conda*;
- Програмне середовище *Jupyter Notebook*;
- Базові поняття та основи роботи з мовою програмування *Python*.

Тема 3. Програмне середовище для атомістичного моделювання *Atomic Simulation Environment (ASE)*

- Основний функціонал та можливості *ASE*;
- Базові об'єкти атомістичних моделей *ASE*: *Atom* та *Atoms*;
- Створення атомістичних моделей в *ASE*, основні операції з ними (геометричні перетворення, хімічне конструювання, візуалізація).

Тема 4. Основні теоретичні положення теорії функціоналу електронної густини (*DFT*)

- Рівняння Шрьодінгера для багатьох тіл та основні методи його наближеного вирішення;
- Теорія функціоналу електронної густини;
- Розрахунок самоузгодженого поля;
- Можливості та обмеження щодо застосування *DFT*.

Тема 5. Основи роботи з пакетом програм *Quantum Espresso*

- Загальні відомості про пакет програм *Quantum Espresso*;
- Інтеграція *Quantum Espresso* та *ASE*;
- Ключові параметри розрахунку та вибір їх оптимальних значень;
- Підготовка вхідних даних та здійснення розрахунку.

Тема 6. Рівноважна структура матеріалів з *DFT*: теоретичні основи

- Наближення «фіксованих ядер» Борна-Оппенгайма;
- Сили, що діють на атоми;
- Мінімізація сил, що діють на атоми методом градієнтного спуску;

- Типи структурної мінімізації.

Тема 7. Оптимізація структури матеріалу у Quantum Espresso. Розрахункові спектри дифракції X-променів (рентгенівської дифракції)

- Підготовка вхідних даних для оптимізації структури з Quantum Espresso;
- Здійснення оптимізації та аналіз її результатів;
- Генерування теоретичних спектрів рентгенівської дифракції для оптимізованих структур (ASE).

Тема 8. Електронна зонна структура з DFT: теоретичні основи

- Енергії та хвильові функції Кона-Шема;
- Розрахунок електронної зонної структури за DFT.

Тема 9. Розрахунок електронної зонної структури з Quantum Espresso

- Підготовка вхідних даних;
- Самоузгоджений та несамоузгоджений розрахунок;
- Обробка та візуалізація результатів розрахунку.

Тема 10. Вібраційні властивості речовин з DFT: теоретичні основи

- Теорія збурення функціоналу електронної густини;
- Дисперсія фононів по зоні Бріллюена – опорні дані для інфра-червоної та раманівської спектроскопії;
- Густина фононних станів;
- Температурні залежності теплоємності, ентальпії речовини та вібраційної ентропії.

Тема 11. Розрахунок вібраційних властивостей з Quantum Espresso та thermo_pw

- Підготовка вхідних даних для розрахунку за теорією збурення електронної густини;
- Візуалізація та аналіз результатів розрахунку фононного спектру;
- Розрахунок температурних залежностей вібраційних термодинамічних властивостей;

Тема 12. Поза основами: складні розрахунки з DFT

- Молекулярна динаміка;
- Електронні властивості та зонна будова речовин;
- Діелектричні та магнітні властивості.

Тема 13. Методи машинного навчання в матеріалознавстві

- Базові принципи машинного навчання;
- Загальний огляд та класифікація методів машинного навчання;
- Застосування класичного машинного навчання в атомістичному моделюванні матеріалів;
- Застосування нейронних мереж (глибокого машинного навчання) в атомістичному моделюванні матеріалів.

Тема 14. Атомістичне моделювання твердих розчинів з використанням класичного машинного навчання

- Моделі кластерного розкладу;
- Метод машинного навчання LASSO для лінійної регресії у моделях кластерного розкладу;
- Застосування машинного навчання для побудови моделей кластерного розкладу з програмним модулем icet;

- Підготовка набору тренування-валідації з DFT;
- Тренування моделі та оцінка її ефективності;
- Застосування моделі (енергії змішування та упорядкування в твердих розчинах).

Тема 15. Міжатомні потенціали машинного навчання для атомістичного моделювання складних систем значного розміру

- Нейронні мережі як міжатомні потенціали;
- Продуктивні високоточні міжатомні потенціали машинного навчання з пакетом програм NequIP;
- Підготовка набору тренування-валідації з DFT;
- Тренування моделі та оцінка її ефективності;
- Застосування моделі (швидка оптимізація структури та молекулярна динаміка).

Тема 16. Відкриті масивні бази даних результатів атомістичного моделювання матеріалів

- Бази даних Materials Project, Aflow, NOMAD;
- Пошук та узагальнення інформації у базах даних (веб інтерфейс);
- Застосування вбудованих засобів машинного навчання
- Пакетне отримання даних з OPTIMADE API

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у відкритому доступі у мережі інтернет, у бібліотеці інституту, а також можуть бути надані в електронному вигляді. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні.

Базова література:

1. Giustino F. Materials modelling using density functional theory: properties and predictions. 1st ed. Oxford: Oxford University Press; 2014.
2. Документація Jupyter Notebook: <https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/>
3. Документація Atomic Simulation Environment: <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>
4. Документація Quantum Espresso: https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide/
5. Документація icet: <https://icet.materialsmodeling.org/>
6. Vasiliev OO. Thermodynamic Properties of Tungsten Disulfide from First Principles in Quasi-Harmonic Approximation. Powder Metall Met Ceram. 2021;59:576–84. <http://link.springer.com/10.1007/s11106-021-00185-6>
7. Vasiliev O, Muratov V, Mazur P, Bilyi V, Karpets M, Bekenev V, et al. Silicon in intericosahedra chains of boron carbide. Journal of the European Ceramic Society. 2022;42:5515–21. Available from: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0955221922004095>
8. Документація NequIP: <https://nequip.readthedocs.io/en/latest/>
9. Документація OPTIMADE API: <https://www.optimade.org/documentation>

Додаткова література:

10. Ohno K, Esfarjani K, Kawazoe Y. Computational Materials Science. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2018. Available from: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-662-56542-1>
11. Документація conda: <https://docs.conda.io/en/latest/>
12. Основи мови програмування Python: <https://www.kaggle.com/learn/python>
13. Vasiliev O, Bilyi V. Specifics of Al substitution into boron carbide: A DFT study. Open Ceramics. 2024; 20:100695. Available from: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2666539524001597>
14. Géron A. Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, Inc; 2019.
15. База даних Materials Project: <https://materialsproject.org/>
16. База даних Aflow: <https://www.aflowlib.org/>
17. База даних NOMAD: <https://nomad-lab.eu/nomad-lab/>
18. Andersen CW, Armiento R, Blokhin E, Conduit GJ, Dwaraknath S, Evans ML, et al. OPTIMADE, an API for exchanging materials data. Sci Data. 2021;8:217.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Передбачено комплексний підхід, що поєднує лекції та розширене опрацювання матеріалу через самостійну роботу. При читанні лекцій застосовується ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені в Google Workspace for Education. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

6. Самостійна робота

Самостійна робота включає повторення лекційного матеріалу та виконання інтерактивних тестових завдань, результативне вирішення яких вимагає роботи з рекомендованою літературою. Це дозволяє розширити та поглибити знання з дисципліни та забезпечити підготовку до заліку.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Відвідування занять, які можуть проводитись як он-лайн, так і офф-лайн, є обов'язковим. У випадку відсутності на занятті аспіранти зобов'язані повідомити викладача заздалегідь і надати документальне підтвердження причини відсутності, якщо це можливо. Під час лекцій проводиться інтерактивне опитування за її матеріалами, яке відіграє роль стимулюючого чинника для дискусії, підвищення зацікавленості та контролю відвідування лекції. У час між лекціями проводиться інтерактивне тестування за матеріалами попередньої лекції з метою стимулювання та спрямування самостійної роботи та визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою.

Під час сигналу повітряної тривоги заняття негайно припиняється, а всі учасники навчального процесу повинні пройти в найближче укриття. За наявності технічної

можливості, заняття продовжується у разі констатації настання безпечних умов для усіх учасників. В іншому випадку, для завершення заняття організується додатковий час.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів. Заохочувальні бали можуть нараховуватись викладачем за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітньої компоненти або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату, та нараховуються під час складання заліку. Сума заохочувальних балів не може перевищувати 10% від рейтингової шкали. Штрафні бали в рамках програми не передбачені.

Політика дедлайнів та перескладань. Дедлайни здачі завдань та контрольних робіт є обов'язковими. У разі поважних причин, аспіранти можуть звернутись до викладача для можливої зміни продовження термінів. Запити на продовження дедлайну повинні бути подані заздалегідь.

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

В рамках навчальної дисципліни передбачено кілька видів контролю та систему рейтингування результатів навчання, а саме:

Поточний контроль: інтерактивні опитування під час лекцій та інтерактивні тестові завдання для самостійного опрацювання.

Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання

Рейтинг слухача дисципліни розраховується на підставі результатів виконання ним наступних активностей:

- інтерактивні тестування під час лекцій (експрес-тестування);
- інтерактивні тестові завдання за матеріалами лекцій (тематичні тестування).

Максимальна оцінка за кожну активність становить 100 балів. Бали за активності нараховуються пропорційно до кількості правильних відповідей у тестуванні.

Внесок певного виду активностей у підсумкову оцінку враховується із застосуванням відповідних вагових коефіцієнтів:

- експрес-тестування: $w_l=0,2$;
- тематичні тестування: $w_t=0,8$.

Умовою допуску до заліку є виконання не менше 2/3 тематичних тестувань протягом семестру.

Підсумкова оцінка формується на підставі **семестрового рейтингу** слухача, який розраховується за формулою:

$$R_C = \frac{w_l}{N_l} \sum m_l + \frac{w_t}{N_t} \sum m_t + 0.1 \cdot m_+,$$

де w_l, w_t – вагові коефіцієнти для експрес-тестувань та тематичних тестувань, відповідно; N_l, N_t – кількість лекцій та тематичних тестів у семестрі, відповідно; m_l, m_t – кількість балів, отриманих слухачем за окрему активність для експрес-тестів та тематичних тестів, відповідно; m_+ -- заохочувальні бали, нараховані за 100-бальною шкалою.

У разі бажання слухача підвищити підсумкову оцінку, він може пройти усну співбесіду за лекційними матеріалами під час заліку. Результат співбесіди R_l оцінюється за 100-бальною шкалою, а підсумкова оцінка розраховується за формулою:

$$R = 0.6R_C + 0.4R_I.$$

Відповідність між кількістю балів, оцінкою за національною шкалою та шкалою ECTS наведена в таблиці:

Кількість балів	Шкала ECTS	Оцінка за національною шкалою
95-100	A	Відмінно
85-94	B	Добре
75-84	C	
65-74	D	Задовільно
60-64	E	
Менше 60	FX	Незадовільно
Не виконані умови допуску		Не допущено

9. Додаткова інформація з освітньої компоненти

Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

Складено: завідувач відділу, кандидат хімічних наук, доцент О.О. Васільєв

Ухвалено Вченою радою Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича Національної академії наук України (протокол №10 від «06» серпня 2024 р.).