

Метою викладання навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання, розрахунки і прогнозування фізичних властивостей наноматеріалів і композитів» є ознайомити студентів з основними проблемами та напрямками розвитку сучасних комп'ютерних методів дослідження та моделювання наноматеріалів, нанокластерів та застосування їх для дослідження властивостей матеріалів, створення матеріалів із наперед заданими параметрами та прогнозування особливостей застосування таких наноматеріалів в сучасних технологіях, використання цих методів у суміжних науках таких як хімія та фізика твердого тіла, фізичне матеріалознавство, фізика наноматеріалів і композитів, фізика поверхні. Курс лабораторних робіт «Комп'ютерне моделювання, розрахунки і прогнозування фізичних властивостей наноматеріалів і композитів» є невід'ємною частиною фахової підготовки студентів спеціальності «Прикладна фізика та наноматеріали» за освітнім рівнем Магістр. В курсі розглядаються сучасні методи моделювання структури нанопокриттів, нанокластерів та наночастинок методами молекулярної динаміки та «ab initio» розрахунки електронної будови нанокластерів за 3 допомогою програмного пакету HyperChem або інших аналогів, таких як LAMMPS, Gaussian, тощо. Виконання практикуму передбачає ознайомлення студентів з довідником що до роботи з програмним забезпеченням. Основними завданнями вивчення дисципліни «Комп'ютерне моделювання, розрахунки і прогнозування фізичних властивостей наноматеріалів і композитів» є засвоїти основні напрямки розвитку методів дослідження матеріалів та вимоги до ефективності цих методів досліджень, їхньої точності та відповідності сучасним вимогам до фізики наноматеріалів. Студент при вивченні цього курсу готується до самостійного застосування сучасних методів у науково-дослідних та науково-технічних роботах.