

**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД  
ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**

**КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ**

Затверджую

Перший проректор

\_\_\_\_\_ О.Г. Бондар

**НАВЧАЛЬНА ПРОГРАМА**

**МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ТА ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ  
НАНОЧАСТИНОК ТА КОМПОЗИТІВ НА ЇХ ОСНОВІ**

(за вимогами кредитно-модульної системи)

**Освітньо-кваліфікаційний рівень:** спеціаліст

**Напрямок підготовки:** 6.0402 – фіз.-мат. науки

**Спеціальність:** 7.(8).040204 – прикладна фізика

**Статус курсу:** спеціальний курс

Укладач програми ст. викладач кафедри прикладної фізики Багрійчук О.С.

**Затверджено**

на засіданні кафедри

Протокол №\_\_\_ від\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ зав. кафедри

## I. ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

Комп'ютерне моделювання складає невід'ємну частку сучасної фундаментальної та прикладної науки, яка по важливості наближається до традиційних експериментальних та теоретичних методів. Тому вміння «розраховувати» входить до обов'язкового репертуару наукових співробітників та викладачів. Філософію цього курсу можна виразити китайським прислів'ям «Я чую і забуваю, я бачу і запам'ятовую, я роблю і постигаю».

Курс лабораторних робіт «**Моделювання структури та фізичних властивостей наночастинок та композитів на їх основі**» є невід'ємною частиною фахової підготовки студентів спеціальності «**Прикладна фізика**» за освітнім рівнем **Магістр**. Мета курсу – викласти теорію та практику комп'ютерного моделювання структури та прогнозування фізичних властивостей нанооб'єктів для оптимізації функціональних матеріалів на їх основі.

В курсі розглядаються сучасні методи моделювання структури нанопокриттів, нанокластерів та наночастинок методами молекулярної динаміки та «ab initio» розрахунки електронної будови нанокластерів. Основний акцент робиться на дослідженні магнітних властивостей наночастинок та композитів на їх основі. Для проведення лабораторних робіт використовується програмне забезпечення з відкритим кодом (open source): OOMMF (Object Oriented Micromagnetic Framework), OOF: Finite Element Analysis of Microstructure, Magpar, GMSH: a tree-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities та інше, яке працює під управлінням операційної системи Linux. Виконання практикуму передбачає попереднє ознайомлення студентів з фізичними та математичними принципами роботи вище зазначеного програмного забезпечення.

## II. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОГО КУРСУ

**Мета курсу** - викласти теорію та практику комп'ютерного моделювання структури та прогнозування фізичних властивостей нанооб'єктів для оптимізації функціональних матеріалів на їх основі.

**Основні завдання курсу:**

- викласти концепцію застосування комп'ютерного моделювання та прогнозування фізичних властивостей нанооб'єктів;
- розглянути особливості застосування методів кінцевих різниць та кінцевих елементів в розрахунках механічних та магнітних властивостей функціональних наноматеріалів;
- провести моделювання рівноважної геометрії нанокластерів та наночастинок;
- провести розрахунок магнітних властивостей ізольованих наночастинок різної форми, а також композитів на їх основі.

**Знати** – основні положення та зміст теорії, а також результати експериментальних та теоретичних досліджень структури магнітних доменів у феромагнітних матеріалах.

**Вміти** – використовувати отримані знання при самостійних дослідженнях в області фізики ультрадисперсних систем. Професійно інтерпретувати данні науково-дослідної роботи на рівні експерта в сфері професійної діяльності.

## III. МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ ЗВ'ЯЗКИ

Для засвоєння курсу «**Моделювання структури та фізичних властивостей наночастинок та композитів на їх основі**» студенти повинні мати підготовку по слідуєчим курсам фізики, хімії та математики: фізика твердого тіла та ультра дисперсних середовищ, електро- та термодинаміка, фізика та хімія поверхні, математичний аналіз та теорія ймовірностей, векторна та тензорна алгебра, чисельні методи.

## IV. ЗМІСТ КУРСУ

### **Модуль 1. Застосування методу кінцевих різниць для моделювання фізичних властивостей наноструктур.**

Практичне заняття №1. Ознайомлення з основними командами Open Source операційних систем Linux та FreeBSD.

*Інсталяція базової операційної системи на ПЕОМ. Інсталяція додаткових програм користувача із gpt пакетів. Компіляція програм із вихідних текстів. Опції оптимізації програмного коду в компіляторі GCC. Компіляція із початкових текстів скриптової мови TCL, графічних бібліотек TK та програми OOMMF компілятором GCC.*

Практичне заняття №2. Графічний інтерфейс програмного комплексу OOMMF (Object Oriented Micromagnetic Framework).

*Консольний та графічний режими роботи програми OOMMF. Навігація, команди та опції вкладок mmArchive, mmDataTable, mmDisp, mmGraph, mmProbEd, mmSolve2D, Oxsii.*

Практичне заняття №3. Основні поняття методу кінцевих різниць.

*Основні поняття методу кінцевих різниць: дискретизація розрахункової області 1D, 2D, 3D кінцевими різницями, схеми перетворення інтегрально-диференціальних рівнянь в системи сильно вироджених алгебраїчних рівнянь.*

Практичне заняття №4. Запис рівнянь теорії мікромагнетизму в термінах кінцевих різниць.

*Складові повної вільної енергії магнітної системи: енергія ізотропного обміну, енергія кристалографічної та наведеної анізотропії, магнітостатична енергія, енергія Зеемана. Ефективне магнітне поле.*

Практичне заняття №5. Числові методи розв'язку мікромагнітних рівнянь.

*Ітераційні та прямі числові методи розв'язку систем рівнянь мікромагнетизму. Однокрокові методи Ейлера, Рунге-Кутта, багатокрокові методи Адамса та обернених диференціалів.*

Практичне заняття №6. Розрахунок магнітостатичного поля у сітковому наближенні.

*Рівняння Лагранжа та Пуассона для скалярного потенціалу магнітостатичного поля. Методи інтегрування крайових задач. Оптимізація часу розрахунків напруженості магнітостатичного поля з використанням швидкого Фур'є перетворення.*

Практичне заняття №7. Методика створення двомірної фізичної моделі наночастинки засобами модуля mmProbEd програми OOMMF.

*Робота з вкладками Material Parameters, Simulation Details, Part Geometry, Initial Mag, Experiment Parameter, Output Specification, Miscellaneous. Задавання матеріальних констант, геометричних розмірів, початкових умов при розрахунках розподілу магнітних моментів.*

Практичне заняття №8. Розрахунок розмагнічуваного стану феромагнітних наночастинок.

*Температура Кюрі. Хаотичний розподіл магнітних моментів. Магнітні структури з відкритим магнітним потоком (flower-state, S-state, C-state) та замкненим магнітним потоком (vortex-state, LL-state, diamond-state).*

Практичне заняття №9. Моделювання процесу намагнічування наночастинок у квазістаціонарному магнітному полі.

*Крива намагнічування. Початкова, повна, диференціальна магнітні сприйнятливості. Втрати енергії на процес намагнічування. Процеси зміщення міждомених стінок та процеси обертання векторів намагніченості.*

Практичне заняття №10. Моделювання процесу перемагнічування наноелементів у постійних магнітних полях.

*Крива магнітного гістерезису. Залишкова намагніченість. Коерцитивна сила. Втрати енергії на статичний гістерезис. Створення програм для визначення параметрів петлі магнітного гістерезису.*

Практичне заняття №11. Моделювання динамічних процесів перемагнічування у постійних, імпульсних, періодичних та обертових магнітних полях різної частоти та амплітуди.

*Феромагнітний резонанс. Згасаюча прецесія магнітних моментів атомів в ефективному полі.*

Практичне заняття №12. Дослідження впливу параметру релаксації на час перемагнічування наночастинок у постійних, імпульсних, періодичних та обертових магнітних полях різної частоти та амплітуди.

*Моди перемагнічування. Магнітостатичні хвилі. Час включення.*

Практичне заняття №13. Вплив величини кристалографічної анізотропії на коерцитивну силу однодоменних частинок.

*Магнітна анізотропія: кристалографічна, наведена, конфігураційна, поверхнева. Когерентне обертання векторів спонтанної намагніченості. Модель Стонера-Вольфарта.*

Практичне заняття №14. Дослідження впливу анізотропії форми наночастинок на їхні магнітні властивості.

*Тензор розмагнічуючих коефіцієнтів. Анізотропія магнітостатичного поля. Ефект саморозмагнічування.*

Практичне заняття №15. Моделювання властивостей тонких феромагнітних плівок.

*Періодичні граничні умови. Наведена анізотропія: легка вісь, легка площина, легкий конус. Доменна структура в ТФП. Зворотні та незворотні процеси зсуву міждоменних стінок.*

Практичне заняття №16. Магнітна структура міждоменних стінок в тонких феромагнітних плівках.

*Класичні міждоменні стінки Блоха та Неєля. Асиметричні та комплексні міждоменні стінки.*



## **Модуль 2. Застосування методу кінцевих елементів для дослідження та прогнозування фізичних властивостей наночастинок довільної форми та композитів на їх основі.**

Практичне заняття №1. Знайомство з Open Source CAD системами та генераторами сітки кінцевих елементів для створення геометричних моделей нанооб'єктів довільної форми.

*Основні поняття методу кінцевих елементів, просторова триангуляція, базисна функція. Запис рівнянь мікромагнетизму в термінах кінцевих елементів. Принципи створення геометричних об'єктів в CAD системі GMSH: a tree-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. Просторова триангуляція створених нанооб'єктів тетрагональними кінцевими елементами, управління густиною кінцево-елементної сітки. Способи візуалізації отриманих результатів в програмах MayaVi та ParaView.*

Практичне заняття №2. Робота з програмою OOF: Finite Element Modeling for Materials Science.

*Створення геометричної моделі нанокompозитів за мікрофотографією, генерація кінцевоелементної сітки, визначення фізичних властивостей структурних одиниць композиційних матеріалів.*

Практичне заняття №3. Побудова геометричної моделі нанокompозиційних матеріалів.

*Побудова геометричних примітивів (куля, еліпсоїд, паралелепіпед) у програмі GMSH. Клонування геометричних об'єктів. Опції генератора сітки кінцевих елементів.*

Практичне заняття №4. Робота з Python-скриптами по перетворенню файлів з координатами кінцевоелементної сітки із формату \*.msh у формат \*.inp.

*Архітектура побудови файлів-таблиць з координатами вузлів сітки кінцевих елементів. Скриптова мова Python: загальні принципи написання скриптів для мікропрограм.*

Практичне заняття №5. Знайомство з програмою Magrar.

*Архітектура та модулі програми Magrar. Структура вхідних та вихідних файлів з даними.*

Практичне заняття №6. Створення фізичних моделей нанокompозитів для дослідження їх магнітних властивостей засобами програми Magrar.

*Файли конфігурації allopt.txt, simname.krn, simname.inp.*

Практичне заняття №7. Розрахунок розмагніченого стану нанокompозитів.

*Критичний розмір однодоменності. Композити на основі однодоменних та квазіодномоненних частинок.*

Практичне заняття №8. Розрахунок кривої намагнічування нанокompозитів.

*Крива намагнічування. Початкова, повна, диференційна магнітні сприйнятливості. Втрати енергії на процес намагнічування. Процеси зміщення міждомоненних стінок та процеси обертання векторів намагніченості.*

Практичне заняття №9. Розрахунок петлі магнітного гістерезису нанокompозиційних матеріалів.

*Крива магнітного гістерезису. Залишкова намагніченість. Коерцитивна сила. Втрати енергії на статичний гістерезис.*

Практичне заняття №10. Динамічна поведінка композитів у магнітних полях постійної напруженості.

*Час перемагнічування. Згасаюча прецесія магнітних моментів. Візуалізація процесів перемагнічування засобами програми ParaView.*

Практичне заняття №11. Моделювання процесів «включення» нанокompозитів у змінних магнітних полях.

*Час перемагнічування. Згасаюча прецесія магнітних моментів. Візуалізація процесів перемагнічування засобами програми ParaView.*

## V. ЛІТЕРАТУРА

### Основна:

1. Суздаев И.П. Нанотехнология: физико- химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов., М.: Ком книга, 2006 г., 592 с.
2. Вонсовский С. Магнетизм. – М.: Наука, 1971. – 1032 с.
3. Кринчик Г. Физика магнитных явлений. – М.: МГУ, 1985. – 336 с.
4. Тикадзуми С. Физика ферромагнетизма. – М.: Наука, 1987. – 420 с.
5. A. Hubert, R. Schafer Magnetic Domains. p.696.

### Додаткова:

1. A. Aharoni, Introduction to the Theory of Ferromagnetism (Oxford, New York, 1996).
2. A. Aharoni, “Demagnetizing Factors for Rectangular Ferromagnetic Prisms,” J. App. Phys. 83, 3432–3434 (1998).
3. D. V. Berkov, K. Ramst<sup>o</sup>ck, and A. Hubert, “Solving Micromagnetic Problems: Towards an Optimal Numerical Method,” Phys. Stat. Sol. (a) 137, 207–222 (1993).
4. W. F. Brown, Jr., Micromagnetics (Krieger, New York, 1978).
5. M. J. Donahue and R. D. McMichael, “Exchange Energy Representations in Computational Micromagnetics,” Physica B 233, 272–278 (1997).
6. M. J. Donahue and D. G. Porter, “OOMMF User’s Guide, Version 1.0,” Technical Report No. NISTIR 6376, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (1999) .
7. J. R. Dormand and P. J. Prince, “A Family of Embedded Runge-Kutta Formulae,” J. Comp. Appl. Math. 6, 19–26 (1980).
8. J. R. Dormand and P. J. Prince, “A Reconsideration of Some Embedded Runge-Kutta Formulae,” J. Comp. Appl. Math. 15, 203–211 (1986).
9. J. Fidler and T. Schrefl, “Micromagnetic modelling — the current state of the art,” J. Phys. D: Appl. Phys. 33, R135–R156 (2000).

10. T. L. Gilbert, "A Lagrangian Formulation of the Gyromagnetic Equation of the Magnetization Field," *Phys. Rev.* 100, 1243 (1955).
11. P. R. Gillette and K. Oshima, "Magnetization Reversal by Rotation," *J. Appl. Phys.* 29, 529–531 (1958).
12. L. Landau and E. Lifshitz, "On the Theory of the Dispersion of Magnetic Permeability in Ferromagnetic Bodies," *Physik. Z. Sowjetunion* 8, 153–169 (1935).
13. R. D. McMichael and M. J. Donahue, "Head to Head Domain Wall Structures in Thin Magnetic Strips," *IEEE Trans. Mag.* 33, 4167–4169 (1997).
14. L. Néel, "Some Theoretical Aspects of Rock Magnetism," *Adv. Phys.* 4, 191–242 (1955).
15. A. J. Newell, W. Williams, and D. J. Dunlop, "A Generalization of the Demagnetizing Tensor for Nonuniform Magnetization," *J. Geophysical Research - Solid Earth* 98, 9551–9555 (1993).
16. D. G. Porter and M. J. Donahue, "Generalization of a Two-Dimensional Micromagnetic Model to Non-Uniform Thickness," *Journal of Applied Physics* 89, 7257–7259 (2001).