

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізики металів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Теорія та моделювання наноструктур

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
(шифр і назва)
спеціальність 104 Фізика та астрономія
(шифр і назва спеціальності)
освітній ступінь магістр
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)
освітня програма Фізика наносистем
(назва освітньої програми)
вид дисципліни обов'язкова *OK20*

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	третій
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі: завідувач кафедри Курилюк Василь Васильович

Пролонговано: на 2023/2024 н.р. *(підпис, ПІБ, дата)* «31» 08 2023р.

на 2024/2025 н.р. *(підпис, ПІБ, дата)* «18» 06 2024р.

на 2025/2026 н.р. *(підпис, ПІБ, дата)* «29» 08 2025р.

КИЇВ – 2022

Розробник: Курилюк Василь Васильович, к.ф.-м.н., доцент, завідувач кафедри фізики металів.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізики металів


(підпис)

(Курилюк В.В.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 8 від «20» травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 11 від «10» червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії


(підпис)

(Оліх О.Я.)
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

1. Мета дисципліни – ознайомлення з основними теоретичними моделями та методами моделювання фізичних процесів в низькорозмірних твердотільних структурах та формування базових навиків для їх реалізації в програмних пакетах.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики, квантової механіки, фізики твердого тіла та фізичного матеріалознавства для освоєння теоретичних питань з курсу «Теорія та моделювання наноструктур».

2. Вміти застосовувати набуті раніше знання з курсів математичного аналізу, диференціальних рівнянь, математичної фізики, загальної фізики, квантової механіки, статистичної фізики, фізики твердого тіла, фізичного матеріалознавства та комп'ютерних технологій для розв'язку практичних завдань з курсу «Теорія та моделювання наноструктур».

3. Володіти елементарними навиками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференціальних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.

3. Анотація навчальної дисципліни: В рамках курсу «Теорія та моделювання наноструктур» розглядаються сучасні теоретичні підходи та методи для розрахунку фізичних властивостей наноматеріалів і проводиться ознайомлення студентів з програмними пакетами молекулярної динаміки LAMMPS та скінченних елементів FlexPDE для реалізації розрахунків. Мета вивчення дисципліни – оволодіння студентами сучасними теоретичними моделями та методами моделювання фізичних властивостей і процесів в твердотільних наноструктурах. Навчальна задача курсу полягає в формуванні базових навиків роботи з комп'ютерними програмами для моделювання наноструктурних матеріалів. Результатом навчання є система набутих знань про сучасні теоретичні підходи і комп'ютерні методи фізики наноструктур та вміння їх практичної реалізації у відповідних програмних пакетах. Методи викладання: лекції, самостійна робота. Методи оцінювання: модульна контрольна робота, опитування під час лекцій, практичні завдання.

4. Завдання (навчальні цілі) – формування базових навиків роботи з комп'ютерними програмами для моделювання наноструктурних матеріалів.

Згідно вимог Стандарту вищої освіти України (другий (магістерський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія») дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних **компетентностей**:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми дослідницького та інноваційного характеру у фізиці та астрономії.

Загальних:

ЗК01. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

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

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

ЗК04. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК08. Здатність використовувати основні методи програмування та моделювання у фізиці.

Фахових:

СК01. Здатність використовувати закони та принципи фізики у поєднанні із потрібними математичними інструментами для опису природних явищ.

СК02. Здатність формулювати, аналізувати та синтезувати рішення наукових проблем в області фізики.

СК05. Здатність сприймати новоздобуті знання в області фізики та астрономії та інтегрувати їх із уже наявними, а також самостійно опановувати знання і навички, необхідні для розв'язання складних задач і проблем у нових для себе деталізованих предметних областях фізики та астрономії й дотичних до них міждисциплінарних областях.

СК08. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в області фізики, вибрати відповідні методи для їх розв'язання, беручи до уваги наявні ресурси.

СК12. Здатність застосовувати теорії опису фізичних властивостей наносистем різних типів.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати основи сучасних теоретичних підходів для опису фізичних процесів в наноструктурах, сучасні методи моделювання наноструктур та принципи їх реалізації в програмних пакетах.	Лекції, самостійна робота	Опитування під час лекцій, модульна контрольна робота	20
2.1	Вміти створювати типові програмні скрипти в пакетах молекулярної динаміки LAMMPS та скінченних елементів FlexPDE для розв'язку практичних задач.	Лекції, самостійна робота	Опитування під час лекцій, перевірка програмних кодів в пакетах LAMMPS та FlexPDE	20

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Результати навчання дисципліни			1.1	2.1
Програмні результати навчання				
РН01. Використовувати концептуальні та спеціалізовані знання і розуміння актуальних проблем і досягнень обраних напрямів сучасної теоретичної і експериментальної фізики для розв'язання складних задач і практичних проблем.			+	
РН02. Проводити експериментальні та теоретичні дослідження з фізики та астрономії, аналізувати отримані результати в контексті існуючих теорій, робити аргументовані висновки (включаючи оцінювання ступеня невизначеності) та пропозиції щодо подальших досліджень.				+
РН04. Обирати і використовувати відповідні методи обробки та аналізу даних фізичних досліджень і оцінювання їх достовірності.				+
РН05. Здійснювати феноменологічний та теоретичний опис досліджуваних фізичних явищ, об'єктів і процесів.			+	
РН10. Відшукувати інформацію і дані, необхідні для розв'язання складних задач фізики, використовуючи різні джерела, зокрема, наукові видання, наукові бази даних тощо, оцінювати та критично аналізувати отримані інформацію та дані.			+	

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 за темами 1-5: РН 1.1 – 12 балів / 8 балів
2. Опитування під час лекцій: РН 1.1 – 8 балів / 4 бали
3. Перевірка програмних кодів в пакетах LAMMPS та FlexPDE за темами 6-13: РН 2.1 – 20 балів / 12 балів

- підсумкове оцінювання у формі іспиту.

Іспит проводиться в письмовій формі. Кожен екзаменаційний білет містить два теоретичні питання з необхідністю розгорнутої відповіді. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом за складання іспиту дорівнює 60. Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 36 балів. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 24 бали.

7.2 Організація оцінювання:

Модульна контрольна робота 1 проводиться по завершенні тематичних лекцій.

Опитування студентів в процесі лекцій проводиться упродовж семестру.

Перевірка програмних кодів в пакетах LAMMPS та FlexPDE за темами 6-12 проводиться по завершенні тематичних лекцій.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій

№ п/п	Номер і назва теми	Кількість годин		
		лекції	семінари/ практичні/ лабораторні	Самостійна робота
Частина 1. Сучасні методи моделювання наноструктур				
1	Тема 1. Особливості фізичних властивостей наноструктур. Електрон в низькорозмірних системах. Квантово-розмірний ефект. Поверхневі ефекти в наноструктурах. Особливості структури та електронних, оптичних, механічних, магнітних, теплових і електричних властивостей нанорозмірних матеріалів. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Фізичні механізми формування властивостей наноматеріалів.	4		8
2	Тема 2. Методи <i>ab initio</i> для моделювання наноструктур. Загальний гамільтоніан кристалу, адіабатичне наближення. Визначник Слеттера. Метод Хартрі-Фока. Базисні функції. Рівняння Хартрі-Фока-Рутана. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Основи методу функціоналу густини.	2		8
3	Тема 3. Напівемпіричні методи для моделювання наноструктур. Теоретичні основи методу сильного зв'язку. Інтеграл перекриття. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Основи k-p методу.	2		4
4	Тема 4. Атомістичні методи моделювання наноструктур. Фізичні основи методу молекулярної динаміки. Потенціали міжатомної взаємодії. Основи методу Монте-Карло. Алгоритм Метрополіса. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Моделювання різних термодинамічних ансамблів в молекулярній динаміці.	4		4
5	Тема 5. Методи розрахунку в наближенні суцільного середовища. Варіаційний принцип Релея-Рітца та Гальоркіна. Основи методу скінченних елементів. Типи елементів, функції форми. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Формування глобальної матриці та врахування граничних умов в методі скінченних елементів.	2		4
	Модульна контрольна робота			
Частина 2. Основи моделювання наноструктур в програмних пакетах LAMMPS та FlexPDE				
6	Тема 6. Основи моделювання наноструктур в програмному пакеті молекулярної динаміки LAMMPS. Огляд команд пакету LAMMPS та правила написання програмного коду. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Основи роботи з програмним пакетом візуалізації OVITO.	4		8

7	Тема 7. Принципи моделювання механічних властивостей наноструктур методом молекулярної динаміки. Розрахунок кривої напруження-деформація для квантової нитки в програмному пакеті LAMMPS. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Молекулярно-динамічний розрахунок механічних деформацій в структурах з квантовими точками.	2		4
8	Тема 8. Моделювання процесів теплоперенесення в наноструктурах методом молекулярної динаміки. Розрахунок коефіцієнта теплопровідності графенових стрічок в середовищі LAMMPS. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Розрахунок коефіцієнта теплопровідності квантових ниток за допомогою пакету LAMMPS.	2		4
9	Тема 9. Принципи моделювання наноструктур в програмному пакеті методу скінченних елементів FlexPDE. Основні команди пакету FlexPDE, синтаксис та правила написання програмного скрипта. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Визначення геометрії та граничних умов для структур різної розмірності в пакеті FlexPDE.	2		4
10	Тема 10. Енергетичні рівні електрона в потенціальній ямі різної форми. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона в прямокутній, параболічній та трикутній потенціальній ямі за допомогою програмного середовища FlexPDE. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Моделювання електронного спектру квантових ниток різної геометрії в пакеті FlexPDE.	2		4
11	Тема 11. Розв'язок рівнянь теорії пружності засобами FlexPDE. Моделювання пружно-напруженого стану наноструктур з квантовими точками в пакеті FlexPDE. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Вплив пружних деформацій на властивості гетероструктур з квантовими точками.	2		4
12	Тема 12. Моделювання процесів теплоперенесення методом скінченних елементів. Розрахунок температурних полів в наноструктурах при імпульсному опроміненні за допомогою FlexPDE. С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Особливості розв'язку нестационарних задач в пакеті FlexPDE.	2		4
	ВСЬОГО	30		60

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Самостійна робота - **60 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Курилюк В.В. Методична розробка з курсу «Теорія та моделювання наноструктур» – Вінниця: ТОВ «Нілан-ЛТД», 2017. – 28 с. [бібліотека кафедри]
2. Thissen J.M. Computational Physics. – Cambridge University Press., 1999. – 558 p. [бібліотека кафедри]
3. Martin R. Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambridge, 2004. – 624 P. [бібліотека кафедри]
4. Di Sia P. Mathematics and Physics for Nanotechnology: Technical Tools and Modelling. - Singapore: Jenny Stanford Publishing, 2019. — 242 p. [бібліотека кафедри]
5. Chandel V., Wang G., and Talha M. Advances in modelling and analysis of nanostructures: a review // Nanotechnol Rev. – 2020. – Vol. 9. – P. 230–258. [електронний ресурс <https://doi.org/10.1515/ntrev-2020-0020>]
6. Васильєв О. Програмування мовою Python. – Навчальна книга – Богдан. – 2018. – 504 с. [бібліотека кафедри]

Додаткова:

1. Заячук Д.М. Нанотехнології і наноструктури. – Львів: видавництво університету «Львівська політехніка», 2009. – 580 с.
2. Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology V.1-10 / Ed. by M. Rieth and W. Schommers. – Am. Sci. Publ. – 2006. – 8000 P.
3. Delerue C., Lannoo M. Nanostructures: Theory and Modelling.- Springer, Nanosciences and Technology Series, 2004. – 304 P.

10. Додаткові ресурси

1. www.lammps.sandia.gov/
2. www.pdesolutions.com/