

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізики металів



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

Момот О.В.

2019 року

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

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2019/2020
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі: доц. Курилюк Василь Васильович

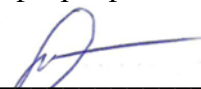
Пролонговано: на 2020/2021 н.р. _____ (підпис, ПІБ, дата) «__»__ 20__ р.

на 20__/20__ н.р. _____ (підпис, ПІБ, дата) «__»__ 20__ р.

КИЇВ – 2019

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

ЗАТВЕРДЖЕНО
Зав. кафедри фізики металів



(підпис)


(Макара В.А.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 14 від «24» квітня 2019 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 21 від «10» травня 2019 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 програмним пакетом молекулярної 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 проекту 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 комплексні проблеми в галузі фізики наносистем, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань.

Загальних:

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу. (ЗК1)
- Навички використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій. (ЗК2)
- Здатність до пошуку, оброблення на аналізу інформації з різних джерел. (ЗК4)
- Здатність працювати в міжнародному науковому просторі. (ЗК5)
- Здатність використовувати професійно-профільовані знання в галузі фізики. (ЗК6)
- Здатність використовувати основні методи програмування та моделювання у фізиці. (ЗК7)
- Здатність застосовувати знання в галузі методів вимірювання у фізиці (ЗК8)

Фахових:

- Здатність застосовувати знання теорій опису фізичних властивостей наносистем різних типів (ФК5).
- Здатність застосовувати знання з фізики нанорозмірних напівпровідників (ФК6).

- Здатність використовувати знання й уміння в галузі практичного використання комп'ютерних технологій для дослідження наносистем (ФК15).

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	30
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 пакеті FlexPDE	30

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

Результати навчання дисципліни	1.1	2.1
Програмні результати навчання		
ПРН 1.14. Знати програмні пакети - GAUSSIAN , ABINIT, VASP, GAMESS	+	
ПРН 2.10. Вміти визначати метод розрахунку, необхідний для розв'язку конкретної наукової проблеми в області фізики наносистем;		+
ПРН 2.11. Вміти обирати відповідні програмні пакети для наукових розрахунків.		+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 за темами 1-5: ПН 1.1 – 20 балів / 12 балів
2. Опитування під час лекцій: ПН 1.1 – 10 балів / 6 балів
3. Перевірка програмних кодів в пакеті FlexPDE за темами 6-9: ПН 2.1 – 30 балів / 18 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 40. Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.

7.2 Організація оцінювання: (обов'язково зазначається порядок організації передбачених робочою навчальною програмою форм оцінювання із зазначенням орієнтовного графіку оцінювання).

Модульна контрольна робота 1 проводиться по завершенні тематичних лекцій. Опитування студентів в процесі лекцій проводиться упродовж семестру.

Перевірка програмних кодів в пакеті FlexPDE за темами 6-9 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	<p>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.</p> <p>С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Фізичні механізми формування властивостей наноматеріалів.</p>	4		8
2	<p>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-Ругана.</p> <p>С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Основи методу функціоналу густини.</p>	2		4
3	<p>Тема 3. Напівемпіричні методи для моделювання наноструктур. Теоретичні основи методу сильного зв'язку. Інтеграл перекриття.</p> <p>С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Основи k-p методу.</p>	2		4
4	<p>Тема 4. Атомістичні методи моделювання наноструктур. Фізичні основи методу молекулярної динаміки. Потенціали міжатомної взаємодії. Основи методу Монте-Карло. Алгоритм Метрополіса.</p> <p>С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Моделювання різних термодинамічних ансамблів в молекулярній динаміці.</p>	4		8
5	<p>Тема 5. Методи розрахунку в наближенні суцільного середовища. Варіаційний принцип Релея-Рітца та Гальоркіна. Основи методу скінченних елементів. Типи елементів, функції форми.</p> <p>С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Формування глобальної матриці та врахування граничних умов в методі скінченних елементів.</p>	2		4
	<i>Контрольна робота</i>			
Частина 2. Основи моделювання наноструктур в програмному пакеті FlexPDE				
6	<p>Тема 6. Принципи моделювання наноструктур в програмному пакеті методу скінченних елементів FlexPDE. Основні команди пакету FlexPDE, синтаксис та правила написання програмного скрипта.</p> <p>С.Р.С. Вивчення матеріалу лекції. Визначення геометрії та граничних умов для</p>	4		8

	структур різної розмірності в пакеті FlexPDE.			
7	Тема 7. 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.	4		8
8	Тема 8. 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.	4		8
9	Тема 9. 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.	4		8
	ВСЬОГО	30		60

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Самостійна робота - **60 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Елисеєв А.А., Лукашин А.В. Функциональные наноматериалы. – Москва: Физматлит, 2010. – 456 с.
2. Рыжонков Д.И., Лёвина В.И., Э.Л. Дзидзигури Наноматериалы: учебное пособие. – Москва: Бином. Лаборатория знаний, 2010. – 365 с.
3. Martin R. Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambridge, 2004. – 624 P.
4. Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем: Учебное пособие. – СПб: Изд-во «Лань», 2010. – 384 с.
5. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. Пер. с англ. – М.: Наука, 1996. – 176 с.
6. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии. – Москва: Изд.МГУ им. Ломоносова, 2009. – 280 с.
7. Thissen J.M. Computational Physics. – Cambridge University Press., 1999. – 558 p.

Додаткова:

1. Заячук Д.М. Нанотехнології і наноструктури. – Львів: видавництво університету «Львівська політехніка», 2009. – 580 с.
2. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. – М.: Мир, 1990, т.1-2.
3. Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology V.1-10 / Ed. by M. Rieth and W. Schommers. – Am. Sci. Publ. – 2006. – 8000 P.

4. Delerue C., Lannoo M. Nanostructures: Theory and Modelling.- Springer, Nanosciences and Technology Series, 2004. – 304 P.

10. Додаткові ресурси

1. www.pdesolutions.com/