

ІНСТИТУТ ПРИКЛАДНИХ ПРОБЛЕМ МЕХАНІКИ І МАТЕМАТИКИ  
ІМ. Я.С. ПІДСТРИГАЧА НАН УКРАЇНИ

Відділ фізико-математичного моделювання низьковимірних систем



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор ІПІММ ім. Я. С. Підстригача  
НАН України, академік НАН України

Роман КУШНІР

Протокол від «29» серпня 2024 року № 9

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

/код і назва навчальної дисципліни/

III рівень, доктор філософії

/рівень вищої освіти/

вид дисципліни \_\_\_\_\_ за вибором \_\_\_\_\_

(обов'язкова / за вибором)

мова викладання \_\_\_\_\_ українська \_\_\_\_\_

спеціальність \_\_\_\_\_ 113 Прикладна математика \_\_\_\_\_

/шифр і назва /

галузь знань \_\_\_\_\_ 11 Математика та статистика \_\_\_\_\_

Львів – 2024 рік

Робоча програма з навчальної дисципліни "Фізико-математичне моделювання в матеріалознавстві" для здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії

Розробник:

Зав відділу, д.ф.-м.н., проф.



Дмитро ПОПОВИЧ

"20" 06 2024 р.

## 1. Структура навчальної дисципліни

Найменування показників	Всього годин
Кількість кредитів/год.	4
Усього годин аудиторної роботи, у т.ч.:	60
• лекційні заняття, год.	30
• семінарські заняття, год.	30
• практичні заняття, год.	-
• лабораторні заняття, год.	-
Усього годин самостійної роботи, у т.ч.:	60
Екзамен	

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

### 2.1. Мета вивчення навчальної дисципліни

Метою вивчення дисципліни є сформулювати у молодих науковців системні знання з сучасних методів дослідження та аналізу структури, механічних і фізико-хімічних властивостей твердотільних матеріалів різної розмірності, вміння проводити сучасними методами математичне моделювання процесів формування структури і електронних властивостей матеріалів з використанням сучасної комп'ютерної техніки, вміння застосовувати фізико-математичне моделювання для розв'язання складних науково-технічних завдань.

### 2.2. Завдання навчальної дисципліни

1. Допомогти молодим науковцям вивчити сучасні теоретико-експериментальні методи аналізу структури і властивостей твердотільних функціональних матеріалів для прогнозування можливості їх використання в науці і техніці.

2. Привити навички застосування сучасних обчислювальних алгоритмів до розв'язування конкретних задач матеріалознавства з використанням комп'ютерної техніки.

У результаті вивчення дисципліни аспіранти повинні бути здатним продемонструвати такі результати навчання:

1. Знати сучасні теоретико-експериментальні методи вивчення структури та електронних властивостей твердотільних матеріалів, що можуть бути використані для побудови нових високоефективних функціональних пристроїв.

2. Уміти вибирати ефективний метод аналізу стану матеріалу.

3. Уміти проінтерпретувати одержані результати та оцінити точність одержаного результату.

Вивчення навчальної дисципліни передбачає формування та розвиток у аспірантів компетентностей:

#### загальних:

1) знання сучасних методів проведення досліджень в галузі математичного і експериментального моделювання складних матеріалів та систем на їх основі, спостереження нових явищ і ефектів для прогнозування можливості їх використання в науці і техніці.

- 2) критичний аналіз, оцінка і синтез нових та складних ідей.
- 3) уміння ефективно спілкуватися з широкою науковою спільнотою та громадкістю в питаннях фізичного матеріалознавства.
- 4) наполегливість у досягненні мети;
- 5) здатність саморозвиватися і самовдосконалюватися протягом життя, відповідальність за навчання інших;
- 6) соціальна відповідальність за результати прийняття стратегічних рішень;
- 7) ініціювання оригінальних дослідницько-інноваційних комплексних проектів;
- 8) лідерство та здатність до автономної так і командної роботи під час реалізації проектів.

**фахових:**

- 1) знання про тенденції розвитку і найбільш важливі нові розробки в області фізичного матеріалознавства та комп'ютерного моделювання складних систем, а також суміжних областей;
- 2) знання і розуміння сучасних наукових теорій і методів, вміння їх ефективно застосовувати для синтезу та аналізу складних систем та явищ;
- 3) знання і розуміння сучасних наукових теорій і методів, вміння їх ефективно застосовувати для синтезу та аналізу складних систем та явищ;
- 4) здатність ефективно застосовувати експериментальні методи аналізу та математичного моделювання складних систем, виконувати комп'ютерні експерименти при проведенні наукових досліджень;
- 5) здатність інтегрувати знання з інших дисциплін, застосовувати системний підхід та враховувати нетехнічні аспекти при розв'язанні науково-прикладних задач та проведенні досліджень;
- 6) здатність розробляти та реалізовувати проекти, включаючи власні дослідження, які дають можливість переосмислювати наявні чи створювати нові знання, а також розв'язувати складні задачі в області фізико-математичного моделювання;

Результати навчання даної дисципліни деталізують такі **програмні результати навчання:**

- здатність продемонструвати знання сучасних теоретико-експериментальних методів для вирішення прикладних завдань сучасного матеріалознавства;
- здатність продемонструвати поглиблені знання у вибраній спеціалізації;
- здатність продемонструвати розуміння впливу технічних рішень в суспільному, економічному і соціальному контексті;
- здійснювати пошук, аналізувати і критично оцінювати інформацію з різних джерел;
- застосовувати знання і навички для вирішення практичних завдань синтезу та аналізу елементів та систем, характерних обраній спеціалізації;
- моделювати і досліджувати явища та процеси в складних системах;
- самостійно планувати та виконувати дослідження, оцінювати отримані результати;
- застосовувати інформаційно-комунікаційні технології та навички для розв'язання задач фізико-математичного моделювання складних систем та явищ;
- ефективно працювати як індивідуально, так і у складі команди;
- поєднувати теорію і практику, а також приймати рішення та виробляти стратегію діяльності для вирішення завдань спеціалізації з урахуванням загальнолюдських цінностей, суспільних, державних та виробничих інтересів;
- самостійно виконувати наукові дослідження та застосовувати дослідницькі навички за професійною тематикою;

– застосовувати системний підхід, інтегруючи знання з інших дисциплін та враховуючи нетехнічні аспекти, підчас розв'язання завдань обраної спеціалізації та проведення досліджень;

– самостійно змодельовати систему (явище) та їх елементи з урахуванням усіх аспектів поставленої задачі;

– аргументувати вибір теоретико-експериментальних методів і критично оцінювати отримані результати та захищати прийняті рішення;

– оцінити доцільність та можливість застосування нових методів і технологій в задачах фізичного матеріалознавства.

### 3. Опис навчальної дисципліни

#### 3.1. Лекційні заняття

<i>№ n/n</i>	<i>Найменування розділів, тем</i>	<i>Кількість год.</i>
1	Основні відомості про сучасні матеріали та їх класифікація. Формування хімічного зв'язку в матеріалах. Особливості кристалічної будови реальних кристалів. Геометрія і симетрія кристалів.	4
2	Сучасні моделі зонної теорії твердого тіла: енергетичні зони, домішково-дефектна структура, зонна структура неупорядкованих твердих тіл.	4
3	Моделювання процесів елементарних збуджень у твердих тілах: квазічастинки та їх характеристики.	4
4	Феноменологічна теорія формування магнетизму в твердих тілах: електронні процеси в магнетиках, доменна структура.	4
5	Структура поверхні твердих тіл: кристалографія поверхні, поверхневі електронні стани, динаміка теплового руху приповерхневих атомів, процеси адсорбції атомів на поверхні. Електронні процеси на поверхні при хемосорбції атомів	6
6	Фізика нанорозмірних структур: розмірне квантування, квантово-розмірні структури і системи.	4
7	Нанопотоніка: взаємодія електромагнітного випромінювання з наночастинками, поглинання, відбивання і заломлення електромагнітних хвиль малими частинками. Плазмовий резонанс на поверхні твердого тіла.	4

Усього 30 год.

#### 3.2. Семінарські заняття

<i>№ n/n</i>	<i>Найменування розділів, тем</i>	<i>Кількість год.</i>
1	Математичне моделювання процесів лазерної абляції твердих тіл: теплові моделі, фазовий вибух і критичні явища.	2
2	Моделювання процесів формування структури і електронних властивостей нанокластерів методом теорії функціоналу густини: ріст кластерів, формування власнодефектної структури, процеси адсорбції атомів на поверхні, електронні процеси в кластерах.	2
3	Моделювання процесів формування морфології росту і структури нанокластерів методом молекулярної динаміки:	2

	класична механіка, динаміка поведінки системи частинок на поверхні, потенціал Кулона.	
4	Технологія одержання наноструктур: квантові точки, квазіодномірні структури, двомірні структури. Надгратки. Графен.	8
5	Фізико-технологічні засади вирощування кристалів. Зонна плавка.	4
6	Технологія одержання тонких плівок: методи формування, структурні особливості та властивості.	5
7	Технологічні засади формування бар'єрних твердотільних структур: механічна обробка, фізико-хімічні процеси, контакти і контактні системи.	7

Усього 30 год.

### 3.2. Самостійна робота

№	Назва самостійного завдання	К-ть год.
1.	Індивідуальне науково-дослідне завдання	40
2.	Підготовка до заліку та іспиту	20

Усього 60 год.

## 4. Оцінювання результатів засвоєння дисципліни

### 4.1. Урахування контрольних завдань

№	вид завдання	відсоток
1	Виконання завдань на семінарських заняттях	25%
2	Виконання індивідуального науково-дослідного завдання	25%
3	Екзамен	50%

### 4.2. Загальна шкала оцінювання

При оцінюванні використовуються критерії згідно з Положенням про рейтингове оцінювання досягнень здобувачів вищої освіти в Інституті прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України від 9.11.2016 [http://iapmm.lviv.ua/aspirant/polozhennya\\_ro\\_K.pdf](http://iapmm.lviv.ua/aspirant/polozhennya_ro_K.pdf)

## 5. Контроль знань, політика виставлення балів

Оцінювання знань проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:

**Контрольні роботи:** 30% загальної оцінки; максимальна кількість балів за три контрольні роботи – 30;

**Колоквіуми:** 20% загальної оцінки; максимальна кількість балів за два колоквіуми – 20;

**Індивідуальне наукове завдання:** 20% загальної оцінки; максимальна кількість балів за індивідуальне наукове завдання – 20 балів;

**Іспит:** 30% загальної оцінки; максимальна кількість балів – 30.

**Загалом 100 балів.**

**Академічна доброчесність:** Очікується, що роботи аспірантів будуть їх оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Відсутність посилань на використані джерела, фабрикування джерел, списування, втручання в роботу інших аспірантів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної не доброчесності. Виявлення ознак академічної не доброчесності в письмовій роботі аспіранта є підставою для її не зарахування викладачем, незалежно від масштабів плагіату чи обману.

**Відвідування занять** є важливою складовою навчання. Очікується, що всі аспіранти відвідають усі лекції та практичні заняття курсу. Аспіранти повинні інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку аспіранти зобов'язані дотримуватися термінів визначених для виконання всіх видів письмових робіт та індивідуальних завдань, передбачених курсом.

**Література.** Уся література, яку аспіранти не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Аспіранти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.

**Політика виставлення балів.** Враховуються бали, набрані при поточному тестуванні, самостійній роботі та бали підсумкового тестування. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність аспіранта під час практичного заняття; недопустимість пропусків та запізнь на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях, не пов'язаних з навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.

Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.

## 6. Література

1. Азаренков М. О. Електрика та магнетизм: підручник / М. О. Азаренков, Л. А. Булавін, В. П. Олефір. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2018. – 564 с.
2. Азаренков М.О. і ін.. Наноматеріали і нанотехнології: навчальний посібник – ХНУ ім. Каразіна В.Н., 2014. – 316 с.
3. Боровий М.О. та ін. Невпорядковані системи та квазікристали: Навчальний посібник / М. О. Боровий, О. О. Каленик, Ю. А. Куницький, Т. Л. Цареградська. – К.: «Інтерсервіс». – 2014. – 228 с.
4. В.О. Москалюк, В.І.Тимофеев. Моделювання приладів мікро- і наноелектроніки: [Електронний ресурс]: підручник для аспірантів спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка», та освітньо-наукової програми «Мікро- та наносистемна техніка». – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. –164 с.
5. Д.І. Попович Матеріали оптоелектроніки і квантової оптики. Частина I конспект лекцій. Л.: Львівська політехніка, 2009. – 43 с.
6. Заячук Д. М. Нанотехнології і наноструктури / Д. М. Заячук. – Л.: Львівська політехніка, 2009. – 580 с.
7. Поплавко Ю. М. і ін. . Фізичне матеріалознавство - К: Вид. НТУ «КПІ», 2010. - 342 с.
8. Поплавко Ю. М. Фізика твердого тіла : підручник. В 2-х томах. / Ю. М. Поплавко. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017. – Том 2: Діелектрики, напівпровідники, фазові переходи. – 379 с.

9. Поплавко Ю. М. Фізика твердого тіла: підручник. В 2-х томах. / Ю. М. Поплавко. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017. – Том 1: Структура, квазічастинки, метали, магнетики. – 415 с.
10. Якименко Ю. Фізичне матеріалознавство - К.: Політехнік, 2011.-300с.
11. D.C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation. Cambridge University Press, 2004.
12. D.S. Sholl, J.A. Steckel Density Functional Theory: A Practical Introduction. Wiley, New York City, 2009. – 256 p.
13. Nanostructured materials and technology. Edited by Hari Sing Nalva. Academic Press, 2002. 282p.
14. Kamaraj S.-K., Thirumurugan A., Díaz de la Torre S., Balasingam S.K., Dhanabalan S.S. Nanostructured Magnetic Materials: Functionalization and Diverse Applications, CRC Press, 2024.
15. Mangalaraja R.V., Udayabhaskar R., Sathishkumar P., Dutta J. (ed.) Nanostructured Materials for Sustainable Energy and Environmental Remediation, IOP Publishing, 2022.