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

Відділ фізико-математичного моделювання низьковимірних систем

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор ІППММ ім. Я. С. Підстригача
НАН України, академік НАН України
_____Роман КУШНІР.

Протокол від «31» 05 2022 року № 5

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 – 2022 рік

Зав відділу, д.ф.-м.н., проф.

р

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 навики 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 навики 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 змоделювати 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

№ п/п	*Найменування розділів, тем*	*Кількість год.*
1	Основні відомості про сучасні матеріали та їх класифікація. Формування хімічного звязку 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 невпорядкованих 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	Нанофотоніка: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

№ п/п	*Найменування розділів, тем*	*Кількість год.*
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: класична механіка, динаміка поведінки системи частинок на поверхні, потенціал Кулона.	2
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. Література

1. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела . «Наука», М. 1978,- 791с.
2. Физика и химия поверхности (в 2-х томах). Под ред. Картеля Н. Т. и Лобанова В. В. – Киев: Ин-т химии поверхности им. А. А., Чуйко НАН Украины; ООО «Интерсервис», 2015. Т1.-588с., Т2.-522с.: ил.
3. А. В. Булгаков и др. Синтез наноразмерных материалов. Новосибирск: Ин-т теплофизики СО РАН, 2009. – 462с.
4. С. С. Горелик, М. Я. Дашевский. Материаловедение полупроводников и диэлектриков . – М.: Металлургия,- 1988.- 574 с.
5. Волькенштейн Ф. Ф.Электронные процессы на поверхности полупроводников при хемосорбции. – М.: Наука, 1987.- 432 с.