

**Силабус курсу «Моделювання нанотехнологій»  
2020–2021 н.р.**

<b>Назва курсу</b>	<b>Моделювання нанотехнологій</b>
<b>Адреса викладання дисципліни</b>	вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів
<b>Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна</b>	Факультет електроніки і комп'ютерних технологій, кафедра фізичної та біомедичної електроніки
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	12 Інформаційні технології/ 122 Комп'ютерні науки
<b>Викладачі дисципліни</b>	професор кафедри фізичної та біомедичної електроніки, д.ф.-м.н. Бордун Олег Михайлович
<b>Контактна інформація викладачів</b>	<a href="mailto:oleh.bordun@lnu.edu.ua">oleh.bordun@lnu.edu.ua</a>
<b>Консультації з дисципліни відбуваються</b>	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Можливі також он-лайн консультації через електронну пошту.
<b>Сторінка курсу</b>	
<b>Інформація про дисципліну</b>	Дисципліна пов'язує аналіз процесів у нанотехнологіях з інструментарієм сучасних інформаційних технологій і відіграє інтегруючу роль, сприяючи розвитку навичок використання обчислювальних систем для вирішення професійних завдань. Курс розроблено таким чином, щоб поглибити навички опису процесів у нанотехнологіях за допомогою математичних моделей, їх чисельного розв'язування на мові програмування Python та математичному середовищі SAGE і проведення їх аналізу.
<b>Коротка анотація дисципліни</b>	Програма вивчення навчальної дисципліни “Моделювання нанотехнологій” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки аспірантів спеціальності 122 Комп'ютерні науки (складова 1: глибинні знання зі спеціальності). Її викладають у 4 семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Програма навчальної дисципліни складається з двох змістових модулів: 1. Математичне моделювання процесів формування нанооб'єктів. 2. Математичне моделювання фізичних процесів у нанооб'єктах.
<b>Мета та цілі дисципліни</b>	Метою і завданням навчальної дисципліни “ Моделювання нанотехнологій ” є формування необхідних теоретичних знань і практичних навичок, пов'язаних із застосуванням методів комп'ютерного моделювання технологічних процесів формування нанооб'єктів та фізичних процесів у них з використанням бібліотек мови програмування Python.
<b>Література для вивчення дисципліни</b>	<b>Основна література:</b> 1. Звонарев С. В., Кортон В. С., Штанг Т. В. Моделирование структуры и свойств наносистем : учебно-методическое пособие - Екатеринбург : Изд-во Урал, ун-та, 2014.-120 с. 2. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии: учебное пособие. - М.: Издательский отдел факультета ВМиК МГУ им.

	<p>М.В.Ломоносова; МАКС Пресс, 2009. - 280 с.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>3. Ashrafi A.R., Cataldo F., Iranmanesh A., Ori O. Topological Modelling of Nanostructures and Extended Systems. - Springer Science+Business Media, Dordrecht, 2013. – 584 p.</li> <li>4. Майер Р.В. Компьютерное моделирование физических явлений. – Глазов: ГППИ. – 2009. – 112с.</li> <li>5. W. Yen, S. Shionoya, H. Yamamoto. Phosphor handbook. 2th ed. – The CRC Press, Laser and Optical Science and Technology Series. – 2007.– p.1056.</li> <li>6. Пихтин А. Квантовая и оптическая электроника. М.: Высшая школа. – 2012. – 656с.</li> <li>7. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 1 - М.: Мир, 1990.</li> <li>8. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 2 - М.: Мир, 1990.</li> <li>9. Б.М.Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. – М.: Наука. – 1985. – 320с.</li> <li>10.Лутц М. Изучаем Python. 3-е издание. – СПб.: Символ-Плюс. – 2009. – 848с.</li> </ol> <p><b>Додаткова література:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Карлов Н.В. Лекции по квантовой электронике / Н.В. Карлов. – М.: Наука, 1988. – 336 с.</li> <li>2. Поршнева С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. – М.: Горячая линия. – Телком, 2003. – 592 с.</li> <li>3. Хуторова О.Г., Стенин О.М., Фахртдинов Р.Х., Морозова Л.В., Журавлев А.А., Теплов В.Ю., Зыков Е.Ю. Компьютерное моделирование физических процессов. – Казань. – 2001. – 50 с.</li> </ol> <p>Наукові статті у періодичних виданнях за тематикою дисципліни.</p>
<b>Тривалість дисципліни</b>	один семестр
<b>Обсяг дисципліни</b>	90 год, з яких 48 год аудиторних занять, з них 32 год лекцій, 16 год практичних занять та 42 год самостійної роботи
<b>Очікувані результати навчання</b>	<p>Після завершення цього курсу студент буде:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <b>знати</b> методи чисельного інтегрування та диференціювання функцій; чисельні методи рішення технологічних задач та задач математичної фізики; синтаксис та основні бібліотеки для математичних обчислень мови програмування Python (SymPy, NumPy, Matplotlib, Math, тощо);</li> <li>- <b>вміти</b> використовувати набуті знання для розрахунку характеристик фізичних процесів і явищ на практиці; розраховувати та аналізувати результати комп'ютерного моделювання, виходячи як з основних положень комп'ютерного моделювання, так і з емпіричних експериментальних даних; використовувати для цього сучасне програмне забезпечення (мову програмування Python та математичне середовище Sage).</li> </ul>
<b>Ключові слова</b>	математичні моделі, технологія формування нанооб'єктів, екситони, наночастинки, композитні матеріали, кінетичні ефекти у нанооб'єктах, спінодальний розпад
<b>Формат дисципліни</b>	очний
	проведення лекцій, семінарських робіт та консультації для

	кращого розуміння тем
<b>Теми</b>	Наведено у табл. 1
<b>Підсумковий контроль, форма</b>	іспит у кінці семестру
<b>Пререквізити</b>	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань із загальних курсів з фізики, вищої математики, методів розв'язування диференціальних та інтегральних рівнянь, базових знань з програмування та чисельних методів.
<b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</b>	лекції, презентації (ілюстрація, демонстрація), розповіді, пояснення, дискусія
<b>Необхідне обладнання</b>	персональний комп'ютер, загальноживані комп'ютерні програми і операційні системи, програмне середовище Python, проектор
<b>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</b>	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням: <ul style="list-style-type: none"> <li>• лабораторні заняття: 50 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів – 50;</li> <li>• контрольні заміри (іспит): 50 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів – 50.</li> </ul>
<b>Питання до модульних контролів (замірів знань)</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Комп'ютерний експеримент. Етапи та співвідношення з реальним експериментом.</li> <li>2. Формування нанооб'єктів різного розміру</li> <li>3. Формування острівцевих та суцільних тонких плівок нанометрової товщини.</li> <li>4. Перколяційні моделі провідності тонких плівок при переході від острівцевої структури до суцільної структури</li> <li>5. Одноmodalьні та багатомodalьні розподіли розмірів нанозерен при формуванні тонких плівок нанометрової товщини</li> <li>6. Тонкоплівкові випромінювачі та люмінофори.</li> <li>7. Скорочення часу загасання люмінесценції перовськітів при переході від об'ємних кристалів до наночастинок</li> <li>8. Кінетичні ефекти у напівпровідниках і діелектриках та особливості в них при переході до нанорозмірів</li> <li>9. Термодинаміка утворення мікрофаз та нанофаз у діелектричних матрицях</li> <li>10. Умови, за яких реалізується спінодальний розпад. Модель Кана-Хіларда.</li> <li>11. Термодинамічні умови утворення композитного матеріалу "кристал у кристалі". Стандартна енергія Гіббса хімічної реакції. Перше наближення Уліха.</li> <li>12. Константа рівноваги реакції. Температурні залежності константи рівноваги. Модель для аналізу можливості утворення композитного матеріалу "кристал в кристалі".</li> </ol>
<b>Опитування</b>	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

## Схема курсу «Моделювання нанотехнологій»

Тиж-день	Тема занять (перелік питань)	Форма діяльності та обсяг годин	Додаткова література / ресурс для виконання завдань (за потреби)	Термін виконання
1, 2	Місце комп'ютерного експерименту у нанотехнологіях. Використання ООП Python та математичних середовищ	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 3 год.		2 тижні
3,4	Формування нанооб'єктів різного розміру	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 5 год.		2 тижні
5, 6	Формування острівцевих та суцільних тонких плівок нанометрової товщини. Перколяційні моделі	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 5 год.		2 тижні
7, 8	Одноmodalні та багатомодальні розподіли розмірів нанозерен при формуванні тонких плівок нанометрової товщини	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні
9, 10	Тонкоплівкові випромінювачі. Скорочення часу загасання люмінесценції перовськітів при переході від об'ємних кристалів до наночастинок	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 5 год.		2 тижні
11,12	Кінетичні ефекти у напівпровідниках і діелектриках та особливості в них при переході до нанорозмірів	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні
13, 14	Термодинаміка утворення мікрофаз та нанофаз у діелектричних матрицях	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні
15, 16	Моделі самоорганізованої критичності. Спінодальний розпад	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні