

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем

Кафедра фізичної електроніки

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Заступник декана з навчальної роботи

_____ О. Ю. Нечипорук

« ____ » _____ 2021 року

Робоча програма навчальної дисципліни Фізичні основи моделювання поверхневих явищ

галузь знань	10 «Природничі науки»
спеціальність	105 «Прикладна фізика та наноматеріали»
рівень вищої освіти	другий (магістерський)
освітня програма	«Прикладна фізика та наноматеріали»
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: Лобанов Віктор Васильович, д.х.н, професор кафедри фізичної електроніки

Пролонговано: на 20__/20__ н. р. _____ (_____) « ____ » _____ 20__ р.

на 20__/20__ н. р. _____ (_____) « ____ » _____ 20__ р.

КИЇВ 2021

Розробник:

Лобанов Віктор Васильович, д.х.н, професор кафедри фізичної електроніки

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри фізичної електроніки

_____ А.М. Веклич

Протокол № __ від « __ » _____ 2021р.

Схвалено науково-методичною комісією факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем

Протокол № __ від « __ » _____ 2021р.

Голова науково-методичної комісії

С. П. Радченко

« __ » _____ 2021 року.

Робоча програма навчальної дисципліни Фізичні основи моделювання поверхневих явищ

Лекції	20 год
Лабораторні роботи	20 год
Самостійна робота студенті	80 год
Форма заключного контролю	іспит

1. Статус дисципліни. Навчальна дисципліна «**Фізичні основи моделювання поверхневих явищ**» є вибірковою компонентою освітньо-професійної програми для студентів факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем, яка викладається студентам 2М курсу в 3 семестрі в обсязі 4 кредитів, 20 годин лекцій, 20 годин лабораторних робіт, 80 годин самостійної роботи. Викладання дисципліни закінчується іспитом .

2. Анотація навчальної дисципліни: Навчальна дисципліна «**Фізичні основи моделювання поверхневих явищ**» необхідна для формування професійного світогляду фахівця з теоретичних основ фізики поверхні та фізики нанорозмірних твердих тіл. Засвоєння методів зазначеної дисципліни дає випускникам факультету обсяг знань, необхідний для вступу до аспірантури, або до самостійної наукової роботи в галузі фізики і хімії поверхневих явищ.

3. Основною метою і завданням навчальної дисципліни «Фізичні основи моделювання поверхневих явищ» є розгляд загальних модельних уявлень щодо фізичних явищ на поверхні твердого тіла в рамках квантовомеханічного підходу, на основі яких ґрунтується створення та опис роботи приладів сучасної елементної бази мікроелектроніки. Не менш важливою є підготовка студентів до роботи із сучасною науковою літературою в галузі фізики і хімії поверхні твердого тіла.

4. Результати навчання. У результаті вивчення дисципліни «**Фізичні основи моделювання поверхневих явищ**» випускник факультету дисципліни одержує змогу до вступу в аспірантуру, або до самостійної наукової роботи в галузі поверхневих явищ.

5. Передумови для вивчення навчальної дисципліни:

До вивчення дисципліни «**Фізичні основи моделювання поверхневих явищ**» необхідно пройти підготовку і скласти іспити/заліки з таких дисциплін:

- Вища математика (Математичний аналіз, Диференційні рівняння та теорія ймовірностей, Методи математичної фізики);
- Загальна фізика (Молекулярна фізика);
- Квантова механіка;
- Статистична фізика

ба. Засоби оцінювання результатів навчання:

- **Семестрове оцінювання:** Навчальний семестр має чотири змістовних модуля. Перший і другий модуль оцінюються максимально до 10 балів, третій та четвертий – до 20 балів.
- **Робота в аудиторії** є частиною кожного модуля, відповіді на запитання викладача «біля дошки», виконання домашніх завдань є складовою частиною відповідного модуля.
- **Письмові контрольні роботи** проводяться після завершення відповідних тем. Замість модульних контрольних робіт можуть бути зараховані індивідуальні завдання.
- **Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):** Екзаменаційний білет іспиту складається із 2 теоретичних питань і 2 задач. Кожне питання і кожна задача оцінюється від 0 до 15 балів.

бб. Умови допуску до підсумкового іспиту: умовою допуску до іспиту є отримання студентом протягом семестру (сумарно) не менше, ніж 24 бали. Для одержання допуску до іспиту студенти, які протягом семестру набрали сумарно меншу кількість балів, повинні написати додаткову контрольну роботу.

бв. Критерії оцінювання

Критерієм успішного проходження здобувачем освіти підсумкового оцінювання є досягнення ним мінімальних рівнів вмінь (рішення задач) і знань (опанування теоретичного матеріалу).

	Знання (мінімум)	Знання (максимум)	Уміння (мінімум)	Уміння (максимум)	Знання + уміння (мінімум)	Знання + уміння (максимум)
Результати протягом семестру	12	20	12	20	24	40
Іспит	18	30	18	30	36	60
Підсумкова оцінка	30	50	30	50	min 60	max 100

бг. Загальні результати і шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
Відмінно / Excellent	90-100%
Добре / Good	75-89%
Задовільно / Satisfactory	60-74%
Незадовільно / Failed	0 -59%

7.1. Програма навчальної дисципліни «Фізичні основи моделювання поверхневих явищ»

Примітка: Теми практичних занять співпадають із темами відповідних лекцій.

<i>№</i>	<i>Тема</i>	<i>Кількість годин (лекції)</i>	<i>Кількість годин (лабораторні роботи)</i>	<i>Контрольні роботи</i>
Змістовний модуль №1				
1	Вступ. Зміст курсу. Основні тенденції розвитку методів моделювання поверхневих явищ	1	1	
2	Водневоподібний атом. Розв'язок рівняння Шредінгера. Типи симетрії атомних орбіталей.	2	2	
3	Воднеподібний атом. Збуджені стани водневоподібного атома.	2	2	
Змістовний модуль № 2				

4	Побудова повної хвильової функції двоелектронної системи. Одноелектронні спин-функції.	2	2	
5	Побудова повної хвильової функції двоелектронної системи. Власні функції і власні значення операторів \hat{S}^2 і \hat{S}_z багатоелектронної системи.	1	1	
6	Молекула водню в методі валентних зв'язків	2	2	
7	Наближення Борна – Оппенгеймера і розділення рухів ядер і електронів	1	1	
Змістовний модуль № 3				
6	Багатоелектронна проблема в квантовій теорії. Метод самоузгодженого поля. Рівняння Гартрі.	1	1	
7	Багатоелектронна проблема в квантовій теорії. Рівняння самоузгодженого поля Гартрі – Фока. Рівняння Гартрі – Фока – Рутаана. Базисні функції.	2	2	
8	Багатоелектронна проблема в квантовій теорії. Методи врахування електронної кореляції. Метод теорії функціоналу густини.	1	1	
Змістовний модуль № 4				
10	Адсорбція на поверхні твердого тіла.	1	1	
11	Елементи теорії твердого тіла, необхідні для опису адсорбційних явищ	1	1	
12	Одноелектронний зв'язок при хемосорбції	1	1	
13	Двоелектронний зв'язок при хемосорбції	1	1	
14	Кластерна модель моделювання поверхневих явищ.	1	1	

7.2. Самостійна робота студентів (СРС).

	Тема СРС	Джерело інформації
1.	Основний стан воднево-подібного атома, енергія і розподіл електронної густини.	[2] Підрозділ 2.3
2.	Рівні енергії водневоподібного атома, його спектр і правила відбору. Магнітні властивості електрона в атомі.	[2] Підрозділи 3.2, 3.3
3.	Незалежна побудова багатоелектронних орбіталь-них і спінових функцій. Метод	[2] Підрозділи 4.2, 4.3

	Слейтера.	
4.	Повна власна функція багатоелектронної системи.	[2] Підрозділ 5.2
5.	Молекула водню в методі валентних зв'язків і в методі молекулярних орбіталей	[1] Лекція 5 [2] Розділ 6.
6.	Гамільтоніан молекулярної системи та наближення Борна – Оппенгеймера	[2] Розділ 7 [3] Розділ 5.1
7.	Енергія багатоелектронної системи в наближенні Гартрі. Отримання рівняння Гартрі з варіаційного принципу.	[2] Підрозділи 8.2, 8.3
8.	Рівняння Гартрі – Фока – Рутаана. Базисні функції	[2] Підрозділи 9.2, 9.3
9.	Метод повної конфігураційної взаємодії. Метод обмеженої конфігураційної взаємодії.	[2] Підрозділи 10.2, 10.4
10.	Порівняння методів, що враховують кореляційні ефекти	[2] Підрозділ 10.10
11.	Теорія адсорбції Ленгмюра	[1] Лекція 12
12.	Міжмолекулярні сили	[1] Лекція 9
13.	Елементи зонної теорії твердого тіла	[1] Лекція 10
14.	Енергетичний спектр електрона в кристалічних ґратках	[1] Лекція 11
15.	Особливості хімічного зв'язку при хемосорбції	[1] Лекція 13, розділ 13.1
16.	Радикальні і валентно–ненасичені форми хемосорбції	[1] Лекція 13, розділ 13.2
17.	Поляризація хемосорбованого атома у випадку одно електронного зв'язку	[1] Лекція 14, розділ 14.3
18.	Вільні електрони ґратки як адсорбційні центри	[1] Лекція 15, розділ 15.3

Примітка: всі питання СРС включаються до екзаменаційних білетів

8. СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ:

1. Лобанов В.В., Стрижак П.Є. Курс лекцій з теорії хімічного зв'язку та основ хемосорбції. – Київ: Наукова думка, 2007, 284 с.
2. Лобанов В.В., Теремінська М.І., Бойко Т.В., Безносик Ю.О. Комп'ютерні технології в матеріалознавстві. – Київ: Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України; Національний технічний університет України «Київський політехнічний Інститут імені Ігоря Сікорського, 2016. – 212 с.
3. Фізика і хімія поверхні. Книга І. Фізика поверхні (в 2-х томах) / Під ред. Картеля Н.Т. і Лобанова В.В. – Київ: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйко НАН України; ТОВ «НВП «Інтерсервіс». Т.1. – 588 с. Т.2. – 522 с. (рос.)

ДОДАТКИ:

9. Рекомендації до оцінки типів навчальної роботи.

ЗК3. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК5. Здатність спілкуватися іноземною мовою.

ЗК10. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ФК1. Здатність браги участь у складанні запитів на виконання наукових та науково-технічних проектів, в тому числі і міжнародних

ФК7. Здатність брати участь в роботі колективів виконавців, у тому числі у міждисциплінарних проектах

ФК11. Здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання для опису фізичних об'єктів, пристроїв та процесів

10а. Результати навчання за дисципліною:

(враховуються лише ті результати навчання,
які ЗАПИСАНІ в ОСВІТНЬО-ПРОФЕСІЙНІЙ ПРОГРАМІ)

		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	ідсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
	Тип навчання			
1	студент повинен знати:			
1.1	за механіка одноелектронних систем	лекційні заняття	Іспит контрольні роботи, завдання для самостійної роботи	до 50
1.2	Основний стан водневоподібного атома	лекційні заняття	Іспит контрольні роботи, завдання для самостійної роботи	
1.3	Збуджені стани водневоподібного атома	лекційні заняття	Іспит контрольні роботи, завдання для самостійної роботи	
2	студент повинен вміти:			
2.1	Вирішувати типові задачі, що потребують використання квантової механіки одноелектронних систем	проведення лабораторних робіт	завдання для самостійної роботи	до 40
2.2	Правильно визначати статистичні розподіли, необхідні для рішення задачі, проблеми			
2.3	Знаходити оптимальну методику, необхідну для рішення задачі, проблеми			
3	автономність та відповідальність:			до 10

3.1	Здатність до самостійного пошуку наукової літератури або інших джерел інформації для розв'язання поставленої перед студентом задачі	проведення лабораторних робіт	завдання для самостійної роботи	
-----	---	-------------------------------	---------------------------------	--

(Коди результатів навчання: 1-знати; 2-вміти; 3-комунікація, 4-автономність та відповідальність. До Таблиці включаються лише коди тих результатів навчання, що відповідають характеристикам даної дисципліни.)

10.6 Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

(форма, що використовується в Освітньо-професійній програмі)

Програмні результати навчання (назва)	Знання			Уміння			Автономність
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1
ПРН 1. Глибокі знання в галузі сучасної прикладної фізики і фізики наноматеріалів	+	+	+				
ПРН 5. Знання етичних та соціально-економічних основ сучасного суспільства	+	+	+				
ПРН 7. Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, приладів і наукоємних технологій			+	+	+	+	
ПРН 12. Інтерпретувати науково-технічну інформацію				+			+
ПРН 16. Організувати результативну роботу індивідуально і як член команди					+		+
ПРН 17. Об'єктивна самооцінка отриманих результатів та спроможність						+	+