

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем

Кафедра квантової радіофізики та наноелектроніки

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана з навчальної роботи

_____ О.Ю. Нечипорук

« ____ » _____ 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Фізичні основи моделювання поверхневих явищ

для студентів

галузь знань

10 “Природничі науки”

спеціальність

105 "Прикладна фізика та наноматеріали"

освітня програма

“Радіофізика та електроніка”

рівень вищої освіти

другий освітньо-науковий (магістр)

вид дисципліни

вибіркова

Форма навчання

денна

Навчальний рік

2022-2023

Семестр

3

Кількість кредитів ECTS

3

Мова викладання, навчання
та оцінювання

українська

Форма заключного контролю

залік

Викладач:

Горячко Андрій Миколайович, доктор фіз.-мат. наук, доцент кафедри квантової радіофізики та наноелектроніки

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

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

Розробник:

Горячко Андрій Миколайович, доктор фіз.-мат. наук, доцент кафедри квантової радіофізики та наноелектроніки

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри квантової радіофізики та наноелектроніки'

_____ Г. Ю. Карлаш

Протокол № __ від « __ » _____ 2022 р.

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

Протокол № __ від « __ » _____ 2022 р.

Голова науково-методичної комісії

С. П. Радченко

« __ » _____ 2022 року.

ВСТУП

1. Мета дисципліни – ознайомлення студентів із основними фізичними засадами моделей фізичних явищ на поверхні твердого тіла.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

Навчальна дисципліна «Фізичні основи моделювання поверхневих явищ» базується на циклі дисциплін професійної та практичної підготовки бакалавра, а саме: “Загальна фізика”, “Фізика твердого тіла”, “Квантова механіка”, “Диференціальні рівняння”, “Чисельні методи”.

Попередні вимоги:

1. студент повинен знати: основні закони, рівняння та співвідношення курсу загальної фізики, курсу фізики твердого тіла, курсу квантової механіки, курсу диференціальних рівнянь, курсу чисельних методів.

2. студент повинен вміти: будувати фізичні моделі твердого тіла в трьох та двох вимірах в класичному наближенні та з повноцінним квантомеханічним описом, ідентифікувати найважливіші аспекти та другорядні аспекти, якими можна знехтувати.

3. студент повинен знати: базові основи чисельних методів та сучасних комп’ютерних алгоритмів, класифікацію, основні властивості та методи розв’язку диференціальних та інтегро-диференціальних рівнянь.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Вивчення дисципліни «Фізичні основи моделювання поверхневих явищ» дозволяє опанувати найважливіші та найпоширеніші теоретичні моделі різноманітних фізичних характеристик поверхні твердого тіла та конденсованої речовини. Розглядаються основні типи мікроскопічних моделей, зокрема побудовані з перших принципів (*ab-initio*) та емпіричні. Зокрема, значна увага приділяється моделям та відповідним розрахункам різноманітних фізичних властивостей процесів, що протікають в приповерхневому шарі твердого тіла, на основі теорії функціонала густини. Окрім цього розглядається моделювання явищ емпіричними та напівемпіричними методами, такими як метод молекулярної динаміки та неперервного середовища. Серед явищ, що розглядаються в курсі: дифузія адсорбатів на поверхні твердого тіла, взаємодія поверхні твердого тіла з потоками електронів, іонів, фотонів, магнітні та спінові явища, поверхневий магнетизм, наноструктуризація та поверхні та утворення поверхневих наноструктур, само-організація на поверхні твердого тіла тощо, емісія електронів, іонів та фотонів з поверхні твердого тіла, поверхнєве плавлення та випаровування. В процесі вивчення дисципліни розкриваються основні фізичні моделі вищевказаних явищ як на поверхні звичайних “тривимірних” матеріалів так і на двоивимірних матеріалах, всі атоми яких належить поверхні, типу графен, дисульфід молібдену та подібні.

4. Завдання (навчальні цілі):

1. Надати основні відомості з курсу «Фізичні основи моделювання поверхневих явищ», які складають важливу частину загально-наукової підготовки магістра за спеціальністю «Прикладна фізика та наноматеріали».

2. Надати основні знання з квантово-механічної теорії електронної та кристалічної структури поверхні твердого тіла, її взаємодії з потоками частинок та електромагнітним випромінюванням а також емісії таких частинок та електромагнітного випромінювання, теорії з перших принципів та в наближенні неперервного середовища динамічних поверхневих процесів.

3. Навчити застосовувати одержані знання у професійній діяльності при проведенні наукових досліджень та прикладних розробок, в таких галузях як інтегральна електроніка, наносенсорика та інших галузях високих технологій, в т.ч. для потреб оборонної промисловості.

4. Навчити ефективно застосовувати отримані знання для комунікації в середовищі інвесторів та грантодавців з метою залучення інвестицій в галузь високих технологій для посилення конкурентоспроможності та оборонного потенціалу України.

Забезпечення досягнення компетентностей:

ЗК 1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК 4. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій

ЗК 7. Здатність працювати в команді.

ЗК 8. Навички міжособистісної взаємодії.

ЗК 10. Навики здійснення безпечної діяльності.

ФК 1. Здатність виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку інженерної виробничої або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК 5. Здатність самостійно опанувати нову апаратуру та технології, в тому числі із суміжних галузей, для розв'язання виробничих задач.

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	студент повинен знати :	лекційні заняття з використанням персональних комп'ютерів, презентаційного обладнання та методик дистанційного навчання	письмові модульні контрольні роботи	до 45
1.1	Загальні основи фізики поверхні твердого тіла			
1.2	Загальні основи фізики динамічних явищ на поверхні твердого тіла			
1.3	Основні фізичні характеристики всіх типів явищ на поверхні твердого тіла			
1.4	Базові підходи до чисельного моделювання фізики поверхневих явищ			
1.5	Основні відмінності між фізичними моделями на основі перших принципів та в наближенні неперервного середовища			
1.6	Основи технологічних застосувань усього спектру фізичних явищ на поверхні твердого тіла в галузі високих технологій			
2	студент повинен вміти :	лекційні заняття з використанням персональних комп'ютерів, презентаційного обладнання та методик дистанційного навчання	письмові модульні контрольні роботи	до 45
2.1	Створювати моделі явищ на поверхні твердого тіла із використанням диференціальних рівнянь			
2.2	Опанувати та використовувати комерційно доступне та з відкритим кодом програмне забезпечення для моделювання динамічних процесів на поверхні конденсованої речовини			
2.3	Розраховувати основні фізичні характеристики поверхні явищ виходячи із загальнодоступних опублікованих довідкових даних			
3	комунікація :	лекційні заняття з використанням персональних комп'ютерів, презентаційного обладнання та методик дистанційного навчання	письмові модульні контрольні роботи	до 5

3.1	Якісна комунікація можливостей сучасних нанотехнологій, що базуються на фізиці поверхневих явищ, для представників підприємств високотехнологічних галузей виробництва			
3.2	Навички роботи у великих дослідницьких колабораціях в галузі фізики поверхні, як в експериментальних так і теоретичних дослідженнях			
4	автономність та відповідальність:	лекційні заняття з використанням персональних комп'ютерів, презентаційного обладнання та методик дистанційного навчання	письмові модульні контрольні роботи	до 5
4.1	Здатність до самостійного пошуку та роботи з періодичними фаховими виданнями, в т.ч. англійською мовою, за тематикою фізики поверхневих явищ			
4.2	Експертна оцінка перспективності запропонованих концепцій стартапів в галузі нанотехнологій			

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

які не входять до блоків спеціалізації

Результати навчання дисципліни	Код													
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Програмні результати навчання (назва)														
ПРН 1. Використовувати знання в галузі прикладної фізики, математики, електроніки та інформаційних технологій для виконання наукових досліджень, інженерно-технічних робіт на виробничих, науково-технічних, конструкторських, сервісних ділянках тощо.	+	+	+	+						+		+		
ПРН 2. Знаходити та аналізувати наукову та науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики та наноматеріалів із вітчизняних та зарубіжних джерел, в тому числі з використанням сучасних пошукових систем.					+	+	+		+				+	
ПРН 4. Встановлювати та аргументувати нові залежності між параметрами та характеристиками фізичних систем.		+				+								
ПРН 5. Ефективно працювати як індивідуально, так і в складі команди, оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт у галузі прикладної фізики та наноматеріалів				+	+	+				+				
ПРН 6. Коректно формулювати висновки у вигляді умов, критеріїв, числових оцінок, перевіряти, апробувати та представляти їх у аудиторії різного фахового рівня, використовуючи сучасні методики наукової та технічної комунікації українською та іноземними мовами.	+	+					+	+		+	+	+		

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів: рівень досягнення всіх запланованих результатів навчання визначається за результатами написання письмових контрольних робіт. Внесок результатів навчання у підсумкову оцінку, за умови їх опанування на належному рівні:

- результати навчання 1.1 – 1.6 [знання] – до 45 %;
- результат навчання 2.1 – 2.3 [вміння] – до 45%;
- результат навчання 3.1-3.2 [комунікація] – до 5%;
- результат навчання 4.1-4.2 [автономність та відповідальність] – до 5%;

Форми оцінювання студентів:

семестрове оцінювання: контроль здійснюється за таким принципом.

1. Контрольна робота з тем 1-5 (письмово): РН 1.1-2, РН 2.1, РН 3.1, РН 4.1 – 20 балів.
2. Контрольна робота з тем 6-10 (письмово): РН 1.3-4, РН 2.2, РН 3.2, РН 4.2 – 20 балів.
3. Контрольна робота з тем 11-15 (письмово):: РН 1.5-6, РН 2.3, РН 3.1-2, РН 4.1-2 – 20 балів.

підсумкове оцінювання (у формі заліку): форма заліку – письмово-усна. Всього за залік можна отримати від 0 до 40 балів. Умовою досягнення позитивної оцінки за дисципліну є отримання не менш ніж 60 балів, при цьому, оцінка за залік не може бути меншою **20 балів**.

- **умови допуску до заліку:** умовою допуску до заліку є отримання студентом сумарно не менше, ніж *критично-розрахунковий мінімум* за семестр – **40 балів**.

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

Оцінювання за формами контролю:

Семестрова робота	Кількість балів	
	Min. – балів	Max. – балів
Модульна контрольна робота №1	13	20
Модульна контрольна робота №2	13	20
Модульна контрольна робота №3	13	20

Орієнтований графік оцінювання:

Форма оцінювання	Орієнтовний період для здійснення відповідної форми оцінювання
Модульна контрольна робота №1	березень
Модульна контрольна робота №2	квітень
Модульна контрольна робота №3	травень
Залік	червень

Розрахунок балів, які отримують при успішній здачі заліку:

Значення	Семестр	Залік	Підсумкова оцінка
Мінімум	40	20	60
Максимум	60	40	100

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
Зараховано / Accepted	60-100%
Не зараховано / Not accepted	0-59%

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекційних занять

№ з/п	Назва теми	У тому числі - кількість годин	
		Лекції	Самостійна робота
1	Вступ та огляд курсу “Фізичні основи моделювання поверхневих явищ”	2	4
2	Кристалічна та електронна структура поверхні твердого тіла та конденсованої речовини	2	4
3	Теорія функціоналу густини в моделюванні поверхневих явищ	2	4
4	Методи молекулярної динаміки в моделюванні поверхневих явищ	2	4
5	Наближення неперевного середовища в моделюванні поверхневих явищ	2	4
6	Методи Монте-Карло в моделюванні поверхневих явищ	2	4
7	Поверхневі явища в яких задіяні адсорбати - поверхнева дифузія та само-дифузія, адсорбція, десорбція, поверхнева дисоціація, поверхневі хімічні реакції	2	4
8	Емісія та поглинання електронів поверхнею твердого тіла та конденсованої речовини	2	4
9	Іонне розпорошення поверхні твердого тіла та його технологічні застосування	2	4
10	Поглинання та випромінювання квантів електромагнітного випромінювання поверхнею твердого тіла	2	4
11	Фізичні моделі росту плівок на підкладинці, молекулярно-променева епітаксія, хімічно-парове осадження	2	4
12	Наноструктуризація поверхні твердого тіла, самозбирання поверхневих наноструктур, моделі технологічних процесів нанолітографії	2	4
13	Моделі фізичних процесів на інтерфейсі тверде тіло - рідина	2	4

14	Поверхневі фонони та розповсюдження поверхневих акустичних хвиль	2	4
15	Експериментальні методики дослідження поверхневих фізичних явищ, порівняння передбачень моделей з результатами експериментів	2	4
Всього		30	60

Загальний обсяг **90** год., в тому числі:
 Лекції **30** год.
 Самостійна робота **60** год.

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основні джерела:

1. J.A. Venables. Introduction to Surface and Thin Film Processes. – Cambridge University Press, 2003. – 372 pp.
2. M. Rocca, T.S. Rahman, L. Vattuone. Springer Handbook of Surface Science. – Springer Nature Switzerland AG, 2020. – 1260 pp.
3. H. Ibach. Physics of Surfaces and interfaces. – Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2006. – 646 pp.

Додаткові джерела:

1. G. Antczak, G. Ehrlich. Surface Diffusion; Metals, Metal Atoms, and Clusters. – Cambridge University Press, 2010. – 757 pp.
2. H. Asahi, Y. Horikoshi (Eds.) Molecular Beam Epitaxy. – John Willey @ Sons, Inc. 2019. – 500 pp.
3. H. Frey, H.R. Khan (Eds.) Handbook of Thin Film Technology. – Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2015. – 379 pp.