КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем

Кафедра фізичної електроніки

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Декан

_____________ Андрій Нетреба

« ____ » ___________ 2023 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Фізичні основи моделювання поверхневих явищ

для студентів

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 компонента

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2024/2025
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач:
Лобанов Віктор Васильович, доктор хім. наук, професор кафедри фізичної електроніки

Пролонговано: на 20__/20__ н. р. ___________ (_______________) « ___ » _________ 20__ р.

на 20__/20__ н. р. ___________ (_______________) « ___ » _________ 20__ р.

КИЇВ 2023

Розробник:

Лобанов Віктор Васильович, доктор хім. наук, професор кафедри фізичної електроніки

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри фізичної електроніки

______________________Анатолій ВЕКЛИЧ

Протокол № 34 від « 29 » червня 2023 р.

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

Протокол № ____від « ____» ______________ 202__р.

Голова науково-методичної комісії Сергій РАДЧЕНКО

« ____» ______________ 202__року.

ВСТУП

1. Мета дисципліни – 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.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

Навчальна дисципліна «**Фізичні основи моделювання поверхневих явищ**» базується на обов'язкових дисциплінах бакалавра відповідної спеціальності, що входять до циклів вищої математики («Математичний аналіз», «Диференційні рівняння», «Теорія ймовірностей», «Методи математичної фізики», «Функціональний аналіз»), загальної та теоретичної фізики, («Класична механіка», «Електрика і магнетизм», «Квантова механіка», «Статистична механіка», «Молекулярна фізика»), курсу за спеціальністю «Коливання та хвилі»).

Попередні вимоги:

студент повинен знати: основні закони, рівняння та співвідношення загальної та теоретичної фізики, теорії коливань і хвиль, молекулярної фізики;

студент повинен вміти: користуватися апаратом вищої математики (математичний аналіз, лінійна алгебра, диференціальні рівняння, рівняння математичної фізики, основні положення теорії ймовірностей).

3. Анотація навчальної дисципліни:

Навчальна дисципліна «**Фізичні основи моделювання поверхневих явищ»** необхідна для формування професійного світогляду фахівця з теоретичних основ фізики поверхні та фізики нано-розмірних 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.

4. Завдання навчальної дисципліни (навчальні цілі):

1. Засвоєння основних понять квантової теорії систем багатьох тіл (електронів та ядер атомів).
2. Розуміння зв'язку між електронною будовою поверхні твердого тіла та її адсорбційними властивостями.
3. Уміння застосовувати основні відомості курсу у професійній діяльності, розвиток у аналітичного мислення та наукового підходу.
4. Уміння розв'язувати (числовими методами) задачі, що стосуються взаємодії молекул газової фази з поверхнею твердого тіла.

Дисципліна спрямована на формування програмних компетентностей:

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.;

ЗК 3. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.;

ЗК 4. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово.;

ЗК 8. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.;

ЗК 9. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ФК 9. Здатність до постійного поглиблення знань в галузі прикладної фізики, інженерії та комп'ютерних технологій.;

ФК 10. Здатність розуміти і використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу станів та властивостей фізичних систем.;

ФК 11. Здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання для опису фізичних об'єктів, пристроїв та процесів.;

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	**знати**:	лекційні заняття	колоквіуми	до 45
1.1	Основні тенденції розвитку методів моделювання поверхневих явищ	*лекція*	*колоквіуми*	4
1.2	Водневоподібний атом. Розв’язок рів-няння Шредінгера. Типи симетрії атом-них орбіта лей.	*лекція*	*колоквіуми*	4
1.3	Побудова повної хвильової функції дво-електронної системи. Одноелектронні спін-функції	*лекція*	*колоквіуми*	4
1.4	Наближення Борна – Оппенгеймера і розділення рухів ядер і електронів	*лекція*	*колоквіуми*	4
1.5	Молекула водню в методі валентних зв’язків	*лекція*	*колоквіуми*	4
1.6	Багатоелектронна проблема в квантовій теорії. Рівняння самоузгодженого поля Гартрі – Фока. Рівняння Гартрі – Фока – Рутаана. Базисні функції	*лекція*	*колоквіуми*	5
1.7	Елементи теорії твердого тіла, необхідні для опису адсорбційних явищ	*лекція*	*колоквіуми*	5
1.8	Одноелектронний зв‘язок при хемосорбціії	*лекція*	*колоквіуми*	5
1.9	Двоелектронний зв‘язок при хемосорбціії	*лекція*	*колоквіуми*	5
1.10	Кластерна модель моделювання поверхневих явищ.	*лекція*	*колоквіуми*	5
2	**вміти**:	лабораторні заняття	колоквіуми	до 45
2.1	Визначати тип молекулярної адсорбції (хімічна, фізична, активована, не активована) по експериментальним даним	*лабораторні заняття*	*колоквіуми*	15
2.2	Будувати хвильові функції багато електронних систем	*лабораторні заняття*	*колоквіуми*	15
2.3	Застосовувати основні методи числового розв’язку рівняння Гартрі – Фока – Рутаана	*лабораторні заняття*	*колоквіуми*	15
3	**комунікація:**	лекційні заняття	колоквіуми	до 5
3.1	Здатність грамотно будувати наукову комунікацію як в усній так і письмовій формах, підбирати правильну термінологію	*лекція*	*колоквіуми*	5

5. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни / Програмні результати навчання (назва)	Код														
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	1.10	2.1	2.2	2.3	3.1	
ПРН 1. Глибокі знання в галузі сучасної прикладної фізики і фізики наноматеріалів	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+					
ПРН 6. Знаходити і аналізувати науково-технічну інформацію з різних джерел з використанням сучасних інформаційних технологій.	+								+						
ПРН 7. Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, приладів і наукоємних технологій											+	+	+	+	
ПРН 12. Інтерпретувати науково-технічну інформацію														+	
ПРН 13. Представляти і захищати отримані наукові і практичні результати в усній та письмовій формі												+		+	
ПРН 16. Організовувати результативну роботу індивідуально і як член команди														+	

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання

Рівень досягнення всіх запланованих результатів навчання визначається за результатами складання колоквіумів та написання письмових контрольних робіт. Внесок результатів навчання у підсумкову оцінку, за умови їх опанування на належному рівні:

- результати навчання 1.1 – 1.10 [**знання**] – до 45 %;
- результат навчання 2.1 – 2.3 [**вміння**] – до 45%;
- результат навчання 3.1 [**комунікація**] – до 5%;

Форми оцінювання:

- **семестрове оцінювання**: Навчальний семестр має три змістовні модулі. Після завершення їх вивчення проводяться колоквіуми. Обов'язковим для допуску до заліку є: отримання не менше 36 балів семестрового рейтингу.
- **підсумкове оцінювання (у формі заліку):** форма заліку – письмово-усна. Екзаменаційний білет заліку складається з 4 питань, питання оцінюються по 10 балів та двох задач. Всього за залік можна отримати від 0 до 40 балів. Умовою досягнення позитивної оцінки за дисципліну є отримання не менш ніж 60 балів, оцінка за іспит не може бути меншою за **24 бали.**
- **умови допуску до підсумкового заліку:** умовою допуску до заліку є отримання студентом сумарно не менше, ніж *36 балів* за семестр. Студенти, які протягом семестру сумарно набрали меншу кількість балів, для одержання допуску до заліку обов'язково повинні написати додаткову контрольну роботу або скласти колоквіум.

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перескладання модульних контрольних робіт та колоквіумі здійснюються у відповідності до „Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті"

7.2. Організація оцінювання;

Оцінювання за формами контролю:

Семестрова робота	Кількість балів	
	Min.	Max.
Колоквіум 1	12	20
Колоквіум 2	12	20
Колоквіум 3	12	20

Орієнтований графік оцінювання:

Форма оцінювання	Орієнтовний період для здійснення відповідної форми оцінювання
Модульна контрольна робота 1, колоквіум 1	вересень
Модульна контрольна робота 2, колоквіум 2	жовтень
Модульна контрольна робота 3, колоквіум 3	листопад
Добір балів/додаткова контрольна робота або колоквіум	грудень
Іспит	грудень

Розрахунок балів, які отримують при успішній здачі іспиту:

Значення	Змістовні модулі	Іспит	Підсумкова оцінка
Мінімум	36	24	60
Максимум	60	40	100

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
Зараховано / Passed	60-100%
Не зараховано / Fail	0-59%

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекційних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин		
		Лекції		Самостійна робота
1	Основний стан воднево-подібного атома, енергія і розподіл електронної густини	1	1	4
2	Незалежна побудова багатоелектронних орбіталь-них і спінових функцій. Метод Слейтера	1	1	4
3	Повна власна функція багатоелектронної системи	1	1	4
4	Гамільтоніан молекулярної системи та наближення Борна – Оппенгеймера	1	1	4
5	Молекула водню в методі валентних зв’язків і в методі молекулярних орбіталей	1	1	5
6	Рівняння Гартрі – Фока – Рутаана. Базисні функції	1	1	4
7	Теорія адсорбції Лєнгмюра	1	1	4
8	Міжмолекулярні сили.	1	1	5
9	Елементи зонної теорії твердого тіла	1	1	4
10	Енергетичний спектр електрона в кристалічних гратках	1	1	4
11	Особливості хімічного зв’язку при хемосорбції	1	1	5
12	Радикальні і валентно–ненасичені форми хемосорції.	1	1	4
13	Поляризація хемосорбованого атома у випадку одно електронного зв’язку	1	1	5
14	Вільні електрони гратки як адсорбційні центри	1	1	5
Всього		**14**	**14**	**61**

Загальний обсяг **90** год., в тому числі:
Лекції **14** год.
Лабораторні заняття **14** год.
Консультації **1** год.
Самостійна робота **61** год.

9. Рекомендована література:

Основні джерела:

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., Теребінська 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. Вакарчук І.О. Квантова механіка. Львів, Львівський національний університет, 2004.

Додаткові джерела:

1. T. Fauster, L. Hammer, K. Heinz, M. A. Schneider, Surface Physics Fundamentals and Methods, University Erlangen-Nürnberg, Germany (2020).
2. K. Oura, V. G. Lifshits, A. A. Saranin, A. V. Zotov and M. Katayama, Surface Science − An Introduction, Springer-Verlag, Berlin, 2010. Chapter 3.
3. A. Zangwill, Physics at Surfaces, Cambridge University Press (1988).
4. H. Ibach, Physics of Surfaces and Interfaces, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2006).
5. M. Terebinska; O. Filonenko; O. Tkachuk; A. Datsiuk; V. Lobanov. Formation of Polaron Bandsin Oxidized 3,4-Ethylenedioxythiophene Oligomer // Mater. Proc. – 2022. – Volume 9, Issue 1. – P. 20.