

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Факультет електроніки та комп'ютерних технологій
Кафедра фізичної та біомедичної електроніки

Затверджено

На засіданні кафедри фізичної та
біомедичної електроніки
факультету електроніки та комп'ютерних
технологій
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол №1 від 29 серпня 2023 р.)

Завідувач кафедри _____



Силабус з навчальної дисципліни

«Моделювання нанотехнологій / Modeling of nanotechnology»,

**що викладається в межах ОП «Комп'ютерні науки»
другого рівня вищої освіти (магістр)**

для здобувачів зі спеціальності

122 «Комп'ютерні науки»

Львів 2023

**Силабус курсу «Моделювання нанотехнологій»
2022–2023 н.р.**

Назва курсу	Моделювання нанотехнологій
Адреса викладання дисципліни	вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Факультет електроніки і комп'ютерних технологій, кафедра фізичної та біомедичної електроніки
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	12 Інформаційні технології 122 Комп'ютерні науки
Викладачі дисципліни	професор кафедри фізичної та біомедичної електроніки, д. ф.-м. н. Бордун Олег Михайлович
Контактна інформація викладачів	oleh.bordun@lnu.edu.ua https://electronics.lnu.edu.ua/employee/bordun-o-m
Консультації з дисципліни відбуваються	Консультації в день проведення лекційних занять (за попередньою домовленістю): кімн. 415, корпус факультету електроніки та комп'ютерних технологій, м. Львів, вул. Драгоманова, 50. Також можливі онлайн-консультації через MS Teams. Для погодження часу онлайн-консультацій слід писати на електронну пошту викладача.
Сторінка курсу	https://electronics.lnu.edu.ua/course/modeliuvannia-nanotekhnolohiy-modeling-of-nanotechnologies-122-kn
Інформація про дисципліну	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.
Коротка анотація дисципліни	Програма вивчення навчальної дисципліни <i>pf db,jhiv sneltynf</i> “Моделювання нанотехнологій” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки аспірантів спеціальності 122 Комп'ютерні науки (складова 1: глибинні знання зі спеціальності). Її викладають у 2 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.
Мета та цілі дисципліни	<i>Метою</i> та основними <i>цілями</i> 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.
Література для вивчення дисципліни	Основна література: 1. К. Е. Drexler, Nano systems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation, Wiley, New York (1992). 2. Ashrafi A.R., Cataldo F., Iranmanesh A., Ori O. Topological Modelling of Nanostructures and Extended Systems. - Springer Science+Business Media, Dordrecht, 2013. – 584 p. 3. M. J. Madou, Fundamentals of Microfabrication: The Science of Miniaturiza-

	<p>tion, CRC Press, Boca Raton, Florida (2002), 2nd ed.</p> <ol style="list-style-type: none"> 4. K. Esfarjani and G. A. Mansoori, Handbook of Theoretical and Computational Nanoscience and Nanotechnology (Forthcoming) (2005). 5. W. Yen, S. Shionoya, H. Yamamoto. Phosphor handbook. 2th ed. – The CRC Press, Laser and Optical Science and Technology Series. – 2007.– p.1056. 6. J. Yang and W. Sui; Solving Maxwell-Schrödinger equations for analyses of nano-scale devices, 2007 European Microwave Devices; Munich, Germany; IEEE Explore, doi:10.1109/EUMC.2007.4405149 (2007) 7. F. Hirata (Ed.). Molecular Theory of Solvation, Series: Understanding Chemical Reactivity, P. G. Mezey (Ed.), Vol. 24, p. 360, Kluwer Academic, Dordrecht (2003). <p>Додаткова література:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Tafazzoli, A.; Sitti, M. Dynamic modes of nanoparticle motion during nano-probe-based manipulation. In 4th IEEE Conference on Nanotechnology, 2004, Munich, Germany, Aug 16–19, 2004; IEEE Publishing: Piscataway, NJ, U.S.A., 2004; pp 35–37. doi:10.1109/nano.2004.1392241 2. Babahosseini, H.; Mahboobi, S. H.; Meghdari, A. Dynamics Modeling of Nanoparticle in AFM-Based Manipulation Using Two Nanoscale Friction Models. In ASME 2009 International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Lake Buena Vista, FL, U.S.A., Nov 13–19, 2009; American Society of Mechanical Engineers, 2009; pp 225–234. doi:10.1115/imece2009-11071 3. Leonid B. Krivdin. Computational ¹H and ¹³C NMR in structural and stereochemical studies. Magnetic Resonance in Chemistry 2022, 60 (8) , 733-828. https://doi.org/10.1002/mrc.5260 4. Magdalena Gajda, Łukasz Gajda, Teobald Kupka, Tapas Kar. Local aromaticity in polyacenes manifested by individual proton and carbon shieldings: DFT mapping of aromaticity. Magnetic Resonance in Chemistry 2022, 58 (2) , 145-153. https://doi.org/10.1002/mrc.4967 5. Наукові статті у періодичних виданнях за тематикою дисципліни.
Тривалість дисципліни	один семестр
Обсяг дисципліни	90 год, з яких 32 год аудиторних занять, з них 16 год лекцій, 16 год практичних занять та 58 год самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>Після завершення цього курсу студент буде:</p> <ul style="list-style-type: none"> - знати 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); - вміти 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).
Ключові слова	математичні моделі, технологія формування нанооб'єктів, екситони, наночастинки, композитні матеріали, кінетичні ефекти у нанооб'єктах, спінодальний розпад
Формат дисципліни	очний

	проведення лекцій, семінарських робіт та консультації для кращого розуміння тем
Теми	Наведено у табл. 1
Підсумковий контроль, форма	іспит у кінці семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань у галузі 12 – Інформаційні технології, зокрема з вищої математики, методів розв'язування диференціальних та інтегральних рівнянь, базових знань з програмування та чисельних методів.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	лекції, презентації (ілюстрація, демонстрація), розповіді, пояснення, дискусія
Необхідне обладнання	персональні комп'ютери, програмне середовище Python 3, Moodle, Microsoft teams, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Оцінювання проводиться упродовж семестру та під час екзаменаційної сесії за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за такими видами робіт із таким співвідношенням: <ul style="list-style-type: none"> • 8 лабораторних робіт або 2 індивідуальні практичні роботи: 40% оцінки; максимальна кількість балів: $8 \times 5 = 40$ або $2 \times 20 = 40$. • контрольні заміри знань на лекціях: 10% оцінки; максимальна кількість балів 10. • іспит: 50% оцінки; максимальна кількість балів 50. Загалом максимально 100 балів.
Питання до модульних контролів (замірів знань)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Комп'ютерний експеримент. Етапи та співвідношення з реальним експериментом. 2. Формування нанооб'єктів різного розміру 3. Формування острівцевих та суцільних тонких плівок нанометрової товщини. 4. Перколяційні моделі провідності тонких плівок при переході від острівцевої структури до суцільної структури 5. Одномодальні та багатомодальні розподіли розмірів нанозерен при формуванні тонких плівок нанометрової товщини 6. Тонкоплівкові випромінювачі та люмінофори. 7. Скорочення часу загасання люмінесценції перовськітів при переході від об'ємних кристалів до наночастинок 8. Кінетичні ефекти у напівпровідниках і діелектриках та особливості в них при переході до нанорозмірів 9. Термодинаміка утворення мікрофаз та нанофаз у діелектричних матрицях 10. Умови, за яких реалізується спінодальний розпад. Модель Кана-Хіллларда. 11. Термодинамічні умови утворення композитного матеріалу "кристал у кристалі". Стандартна енергія Гіббса хімічної реакції. Перше наближення Уліха. 12. Константа рівноваги реакції. Температурні залежності константи рівноваги. Модель для аналізу можливості утворення композитного

	матеріалу "кристал в кристалі".
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1

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	Вступне заняття. Академічна доброчесність. Місце комп'ютерного експерименту у нанотехнологіях. Використання ООП Python та математичних середовищ	Лекції – 2 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні
3,4	Формування нанооб'єктів різного розміру	Лекції – 2 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 8 год.		2 тижні
5, 6	Формування острівцевих та суцільних тонких плівок нанометрової товщини. Перколяційні моделі	Лекції – 2 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 8 год.		2 тижні
7, 8	Одноmodalні та багатомодальні розподіли розмірів нанозерен при формуванні тонких плівок нанометрової товщини	Лекції – 2 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 8 год.		2 тижні
9, 10	Тонкоплівкові випромінювачі. Скорочення часу загасання люмінесценції перовськітів при переході від об'ємних кристалів до наночастинок	Лекції – 2 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 8 год.		2 тижні
11,12	Кінетичні ефекти у напівпровідниках і діелектриках та особливості в них при переході до нанорозмірів	Лекції – 2 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 8 год.		2 тижні
13, 14	Термодинаміка утворення мікрофаз та нанофаз у діелектричних матрицях	Лекції – 2 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні
15, 16	Моделі самоорганізованої критичності. Спінодальний розпад	Лекції – 2 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні

