



## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, РОЗРАХУНКИ І ПРОГНОЗУВАННЯ ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОМАТЕРІАЛІВ І КОМПОЗИТИВ

**Викладач:** кандидат фіз. - мат. наук, доцент Яновський Олександр Сергійович

**Кафедра:** загальної та прикладної фізики, І корпус ЗНУ, ауд. 14

**Email:** [yanovskayas@gmail.com](mailto:yanovskayas@gmail.com)

**Телефон:** (061) 289-12-48 (кафедра), 289-12-60 (деканат)

**Інші засоби зв'язку:** Moodle (форум курсу, приватні повідомлення)

<b>Освітня програма, рівень вищої освіти</b>		Прикладна фізика; магістр				
<b>Статус дисципліни</b>		Вибіркова				
<b>Кредити ECTS</b>	6	<b>Навч. рік</b>	2020-2021 осін. семестр	<b>Рік навчання - 2</b>	<b>Тижні</b>	11
<b>Кількість годин</b>	180	<b>Кількість змістових модулів<sup>1</sup></b>		10	<b>Лабораторні заняття –50 год Самостійна робота – 131 год.</b>	
<b>Вид контролю</b>	Залік					
<b>Посилання на курс в Moodle</b>		<a href="https://moodle.znu.edu.ua/course/view.php?id=474">https://moodle.znu.edu.ua/course/view.php?id=474</a>				
<b>Консультації:</b>		щосереди, 11.05-12.55 або за домовленістю чи ел. поштою				

### ОПИС КУРСУ

Курс лабораторних робіт «Комп'ютерне моделювання, розрахунки і прогнозування фізичних властивостей наноматеріалів і композитів» є невід'ємною частиною фахової підготовки студентів спеціальності «Прикладна фізика та наноматеріали» за освітнім рівнем Магістр. Метою викладання навчальної дисципліни є ознайомити студентів з основними проблемами та напрямками розвитку сучасних комп'ютерних методів дослідження та моделювання наноматеріалів, нанокластерів та застосування їх для дослідження властивостей матеріалів, створення матеріалів із наперед заданими параметрами та прогнозування особливостей застосування таких наноматеріалів в сучасних технологіях, використання цих методів у суміжних науках таких як хімія та фізика твердого тіла, фізичне матеріалознавство, фізика наноматеріалів і композитів, фізика поверхні. В курсі розглядаються сучасні методи моделювання структури твердих тіл, нанопокриттів, нанокластерів та наночастинок методами молекулярної динаміки та «ab initio» розрахунки електронної будови нанокластерів, моделювання фотоелектричних перетворювачів за допомогою програмних продуктів PC1D та AFORS-HET. Основними завданнями вивчення дисципліни є засвоїти основні напрямки розвитку методів дослідження матеріалів та вимоги до ефективності цих методів досліджень, їхньої точності та відповідності сучасним вимогам до фізики наноматеріалів.

### ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

У разі успішного завершення курсу студент зможє:

- використовувати програмні пакети з моделювання твердих тіл та наносистем;
- моделювати ФЕП за допомогою програмних продуктів PC1D та AFORS-HET;
- формувати складні хімічні комплекси та нанокластери, користуючись меню програмних пакетів;
- здійснювати розрахунки нанокластерів методами квантової хімії (ab initio);
- прогнозувати на підставі розрахунків фізичні властивості наноматеріалів.

<sup>1</sup> 1 змістовий модуль = 15 годин (0,5 кредита ECTS). Детальна формула розрахунку – в рекомендаціях.



## ОСНОВНІ НАВЧАЛЬНІ РЕСУРСИ

Завдання для лабораторних робіт, методичні рекомендації, рекомендовані підручники тощо розміщені на платформі Moodle:

<https://moodle.znu.edu.ua/course/view.php?id=474>

## КОНТРОЛЬНІ ЗАХОДИ

### Поточні контрольні заходи (тах 60 балів):

Поточний контроль включає виконання та захист лабораторних робіт, який передбачає розгляд *теоретичних* питань та виконання *практичних* завдань. За виконання та захист робіт студент може отримати до 5 балів за кожну роботу. 5 бали студент одержує якщо він:

виконав лабораторну роботу в повному обсязі, володіє навичками роботи з відповідними програмними продуктами;

лабораторну роботу оформлено у відповідності до вимог;

студент виявляє розуміння основоположних теорій та фактів, знає сутність фізичних явищ, уміє наводити приклади на підтвердження цього;

студентом проведені всі необхідні розрахунки, зроблені висновки по роботі.

Поточний контроль передбачає також опитування та тестування з теоретичних питань, виконання завдань та тестів на платформі Moodle.

Умови допуску до підсумкового контролю: обов'язкова присутність на лабораторних заняттях; відпрацювання всіх пропущених занять. До підсумкового семестрового контролю студент допускається, якщо з можливих 60 балів за дві атестації він набрав 35 і більше балів.

### Підсумкові контрольні заходи (тах 40 балів):

Підсумковим контрольним заходом є залік.

*Теоретичний підсумковий контроль* – теоретичні питання (10 балів).

*Підсумкове практичне завдання* – 30 балів.

### *Критерії оцінювання:*

Оцінювання відповіді на *теоретичні* питання здійснюється наступним чином:

до 10 балів – правильне, повне, глибоке та сучасне тлумачення теоретичних питань, послідовний, логічний, обґрунтований, безпомилковий виклад необхідних математичних супроводжень, правильні відповіді на додаткові питання;

до 8 балів – правильне та сучасне тлумачення питань, допущення окремих несуттєвих помилок при викладі необхідних математичних супроводжень;

до 5 балів – знання та загальне розуміння питань, спрощений виклад необхідних математичних супроводжень, невпевнені, з помилками відповіді на додаткові питання;

до 3 балів – поверхові знання питання, непослідовний виклад необхідних математичних супроводжень, допущення в ньому істотних помилок, неправильні відповіді на додаткові питання.

Оцінювання виконання *практичного завдання* оцінюється наступним чином:

до 30 балів – правильне написання формул, вірний хід проміжних викладок, підстановка вихідних даних з урахуванням одиниць вимірювання, правильність проведених розрахунків до кінцевого результату, приведення одиниць вимірювання використаних величин;

до 20 балів – труднощі в обґрунтуванні застосованих формул, правильне написання формул, вірний хід рішення з проміжними викладками, підстановка вихідних даних з урахуванням одиниць вимірювання, правильність проведених розрахунків до кінцевого результату;

до 10 балів – написання формул з помилками, хід рішення має помилки, помилкове або відсутність числового рішення та одиниць вимірювання.



**Шкала оцінювання: національна та ECTS**

За шкалою ECTS	За шкалою університету	За національною шкалою	
		Екзамен	Залік
A	90 – 100 (відмінно)	5 (відмінно)	Зараховано
B	85 – 89 (дуже добре)	4 (добре)	
C	75 – 84 (добре)		
D	70 – 74 (задовільно)	3 (задовільно)	
E	60 – 69 (достатньо)		
FX	35 – 59 (незадовільно – з можливістю повторного складання)	2 (незадовільно)	Не зараховано
F	1 – 34 (незадовільно – з обов'язковим повторним курсом)		

Контрольний захід		Термін виконання	% від загальної оцінки
<b>Поточний контроль (max 60%)</b>			
Змістовий модуль 1	Вид теоретичного завдання: опитування	тиждень 1	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 1	5%
Змістовий модуль 2	Вид теоретичного завдання: опитування	тиждень 2	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 2	5%
Змістовий модуль 3	Вид теоретичного завдання: опитування	тиждень 3	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 3	5%
Змістовий модуль 4	Вид теоретичного завдання: опитування	тиждень 4	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 4	5%
Змістовий модуль 5	Вид теоретичного завдання: опитування	тиждень 5	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 5	5%
Змістовий модуль 6	Вид теоретичного завдання: опитування і обговорення рекомендованих літературних джерел, інформаційних ресурсів	тиждень 6	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 6	5%
Змістовий модуль 7	Вид теоретичного завдання: опитування	тиждень 7	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 7	5%
Змістовий модуль 8	Вид теоретичного завдання: опитування	тиждень 8	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 8	5%
Змістовий модуль 9	Вид теоретичного завдання: виконання тестових завдань в системі Moodle	тиждень 9	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 9	5%

**ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**  
**ФАКУЛЬТЕТ ЖУРНАЛІСТИКИ**  
**Силабус навчальної дисципліни**



Змістовий модуль 10	Вид теоретичного завдання: опитування	тиждень 10	1%
	Вид практичного завдання: виконання та захист лабораторної роботи	тиждень 10	5%
<b>Підсумковий контроль (max 40%)</b>			
Підсумкове теоретичне завдання			10%
Підсумкове практичне завдання			30%
<b>Разом</b>			<b>100%</b>

### РОЗКЛАД КУРСУ ЗА ТЕМАМИ І КОНТРОЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Тиждень і вид заняття	Тема змістового модулю	Контрольний захід	Кількість балів
Змістовий модуль 1			
Тиждень 1 Лабораторна робота 1	Програмні пакети МОРАС та HyperChem.	Вивчення інструкцій до програмних пакетів МОРАС та HyperChem (Опитування).	1
		Лабораторна робота «МОРАС та HyperChem».	5
Змістовий модуль 2			
Тиждень 2 Лабораторна робота 2	Методи зображення та редагування нанооб'єктів.	Опитування.	1
		Лабораторна робота «Використання діалогового вікна зображення атомів, вибору властивостей атомів та валентності. Зображення зав'язків».	5
Змістовий модуль 3			
Тиждень 3 Лабораторна робота 3	Z-матриця.	Опитування.	1
		Лабораторна робота «Побудування Z-матриці».	5
Змістовий модуль 4			
Тиждень 4 Лабораторна робота 4	Молекулярні орбіталі.	Принцип суперпозиції. Молекулярні орбіталі (Опитування).	1
		Лабораторна робота «Метод МО ЛКАО».	5
Змістовий модуль 5			
Тиждень 5 Лабораторна робота 5	Програмний пакет PC1D.	Інтерфейс PC1D (Опитування).	1
		Лабораторна робота «Робота в програмному пакеті PC1D».	5
Змістовий модуль 6			
Тиждень 6 Лабораторна робота 6	Програмний пакет AFORS-NET.	Інтерфейс AFORS-NET (Опитування і обговорення літературних джерел, інформаційних ресурсів).	1
		Лабораторна робота «Робота в програмному пакеті AFORS-NET».	5
Змістовий модуль 7			
Тиждень 7 Лабораторна робота 7	Моделювання ФЕП.	Фотовольтаїчний ефект у p-n- переході (Опитування).	1
		Лабораторна робота «Моделювання	5



		однопереходного ФЕП в пакеті PC1D.».	
Змістовий модуль 8			
Тиждень 8 Лабораторна робота 8	Моделювання ФЕП.	Однопереходні кремнієві сонячні елементи (Опитування).	1
		Лабораторна робота «Моделювання однопереходного ФЕП в пакеті AFORS-NET ».	5
Змістовий модуль 9			
Тиждень 9 Лабораторна робота 9	Моделювання ФЕП.	Виконання тестових завдань в системі Moodle.	1
		Лабораторна робота «Моделювання багатопереходних ФЕП».	5
Змістовий модуль 10			
Тиждень 10 Лабораторна робота 10	Моделювання ФЕП.	Багатопереходні ФЕП та ФЕП на органічних речовинах (Опитування).	1
		Лабораторні роботи «Моделювання ФЕП на органічних речовинах».	5
Тиждень 11	Підсумковий контроль (залік).	Теоретичне питання	10
		Практичне завдання	30
			100

## ОСНОВНІ ДЖЕРЕЛА

### Книги:

1. Rieth M. Nano-Engineering in Science and Technology. An Introduction to the World of Nano-Design. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. 2003. – 151 p.
2. HyperChem Release 7 for Windows. Getting Started. веб сайт. URL: <http://www.hyper.com/Products/tabid/354/Default.aspx> (дата звернення 22.10.2018).
3. Петров В.М, Кластеры и малые частицы. Москва: Наука.1986. – 368 с.
4. Непійко С.А. Физические свойства малих металлических частиц. Київ: Наукова думка. 1985. – 248 с.
5. Hedman F. Algorithms for Molecular Dynamics Simulations. Advancing the Computational Horizon. Stockholm: Stockholms Universitet. 2006. – 93 p.
6. Суздаев И.П. Нанотехнология: физико- химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Москва: Ком. Книга. 2006. – 592 с.
7. Рамбиди Н.Г. Структура полимеров — от молекул до наноансамблей. Москва: Интеллект, 2009. – 264 с.
8. Сердюк И., Заккаи Н., Заккаи Дж. Методы в молекулярной биофизике. Структура, функция, динамика (комплект из 2 книг). Москва: КДУ, 2009. – 1304 с.
9. Сетубал Ж., Мейданис Ж. Введение в вычислительную молекулярную биологию. Москва: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2007. – 420 с.
10. Ramachandran K.I., Deera G., Namboori K. Computational chemistry and molecular modelling: principles and applications. Berlin: Springer, 2008. – 396 p.

### Інформаційні ресурси:

1. Національна бібліотека України ім. В.І. Вернадського: веб-сайт. URL: <http://irbis-nbuv.gov.ua>
2. Тематичний сайт програмних пакетів Експонента. Режим доступу: <http://www.exponenta.ru>



## РЕГУЛЯЦІЯ І ПОЛІТИКИ КУРСУ<sup>2</sup>

### Відвідування занять. Регуляція пропусків.

Для виконання навчального плану зі спеціальності та для високої ефективності навчального процесу студент зобов'язаний виконувати наступні правила:

- відвідувати лабораторні заняття відповідно до розкладу;
- не запізнюватися на заняття;
- не пропускати заняття без поважних причин;
- приходити на заняття підготовленим.

Пропуски вважаються поважними, якщо представлені об'єктивні докази справжніх причин.

Процедура відпрацювання:

- відпрацювання пропущених занять здійснюється студентами протягом 20 днів з дня виходу на заняття;
- за наявності невідпрацьованих пропущених лабораторних занять студент до атестації не допускається;
- за умови систематичних пропусків занять та невідпрацювання може бути застосована процедура повторного вивчення дисципліни (див. посилання на Положення у додатку до силабусу).

### Політика академічної доброчесності

Кожний студент зобов'язаний дотримуватися принципів академічної доброчесності. Письмові завдання з використанням часткових або повнотекстових запозичень з інших робіт без зазначення авторства – це *плагіат*. Використання будь-якої інформації (текст, фото, ілюстрації тощо) мають бути правильно процитовані з посиланням на автора! Якщо ви не впевнені, що таке плагіат, фабрикація, фальсифікація, порадьтеся з викладачем. До студентів, у роботах яких буде виявлено списування, плагіат чи інші прояви недоброчесної поведінки можуть бути застосовані різні дисциплінарні заходи (див. посилання на Кодекс академічної доброчесності ЗНУ в додатку до силабусу).

Посилання на такі ресурси, як Wikipedia, бази даних рефератів та письмових робіт (Studopedia.org та подібні) є неприпустимим. Рекомендовані бази даних для пошуку джерел: Електронні ресурси Національної бібліотеки ім. Вернадського: <http://www.nbuv.gov.ua>

### Використання комп'ютерів/телефонів на занятті

Будь ласка, вимкніть на беззвучний режим свої мобільні телефони та не користуйтеся ними під час занять. Мобільні телефони відволікають викладача та ваших колег. Під час занять заборонено надсилання текстових повідомлень, прослуховування музики, перевірка електронної пошти, соціальних мереж тощо. Електронні пристрої можна використовувати лише за умови виробничої необхідності в них (за погодженням з викладачем).

Під час виконання заходів контролю (контрольних робіт, іспитів та ін.) використання гаджетів заборонено. У разі порушення цієї заборони роботу буде анульовано без права перескладання.

### Комунікація

Базовою платформою для комунікації викладача зі студентами є Moodle.

Всі робочі оголошення можуть надсилатися через старосту, на електронну пошту та розміщуватимуться в Moodle. Будь ласка, перевіряйте повідомлення вчасно. *Ел. пошта має бути підписана справжнім ім'ям і прізвищем*. Адреси типу user123@gmail.com не приймаються! Якщо за технічних причин доступ до Moodle є неможливим, або ваше питання потребує термінового розгляду, направте електронного листа з позначкою «Важливо» на адресу [yanovskyas@gmail.com](mailto:yanovskyas@gmail.com). У листі обов'язково вкажіть ваше прізвище та ім'я, курс та шифр академічної групи.

<sup>2</sup> Тут зазначається все, що важливо для курсу: наприклад, умови допуску до лабораторій, реактивів тощо. Викладач сам вирішує, що треба знати студенту для успішного проходження курсу!

## ДОДАТОК ДО СИЛАБУСУ ЗНУ – 2020-2021 рр.

**ГРАФІК НАВЧАЛЬНОГО ПРОЦЕСУ 2020-2021 н. р.** ([http://sites.znu.edu.ua/navchalnyj\\_viddil/1635.ukr.html](http://sites.znu.edu.ua/navchalnyj_viddil/1635.ukr.html))

**АКАДЕМІЧНА ДОБРОЧЕСНІСТЬ.** Студенти і викладачі Запорізького національного університету несуть персональну відповідальність за дотримання принципів академічної доброчесності, затверджених *Кодексом академічної доброчесності ЗНУ*: <https://tinyurl.com/ya6yk4ad>. *Декларація академічної доброчесності здобувача вищої освіти* (додається в обов'язковому порядку до письмових кваліфікаційних робіт, виконаних здобувачем, та засвідчується особистим підписом): <https://tinyurl.com/y6wzzlu3>.

**НАВЧАЛЬНИЙ ПРОЦЕС ТА ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ЯКОСТІ ОСВІТИ.** Перевірка набутих студентами знань, навичок та вмій (атестації, заліки, іспити та інші форми контролю) є невід'ємною складовою системи забезпечення якості освіти і проводиться відповідно до *Положення про організацію та методу проведення поточного та підсумкового семестрового контролю навчання студентів ЗНУ*: <https://tinyurl.com/y9tve4lk>.

**ПОВТОРНЕ ВИВЧЕННЯ ДИСЦИПЛІН, ВІДРАХУВАННЯ.** Наявність академічної заборгованості до 6 навчальних дисциплін (в тому числі проходження практики чи виконання курсової роботи) за результатами однієї екзаменаційної сесії є підставою для надання студенту права на повторне вивчення зазначених навчальних дисциплін. Порядок повторного вивчення визначається *Положенням про порядок повторного вивчення навчальних дисциплін та повторного навчання у ЗНУ*: <https://tinyurl.com/y9pkmmp5>. Підстави та процедури відрахування студентів, у тому числі за невиконання навчального плану, регламентуються *Положенням про порядок переведення, відрахування та поновлення студентів у ЗНУ*: <https://tinyurl.com/ycds57la>.

**НЕФОРМАЛЬНА ОСВІТА.** Порядок зарахування результатів навчання, підтверджених сертифікатами, свідоцтвами, іншими документами, здобутими поза основним місцем навчання, регулюється *Положенням про порядок визнання результатів навчання, отриманих у неформальній освіті*: <https://tinyurl.com/y8gbt4xs>.

**ВИРІШЕННЯ КОНФЛІКТІВ.** Порядок і процедури врегулювання конфліктів, пов'язаних із корупційними діями, зіткненням інтересів, різними формами дискримінації, сексуальними домаганнями, міжособистісними стосунками та іншими ситуаціями, що можуть виникнути під час навчання, регламентуються *Положенням про порядок і процедури вирішення конфліктних ситуацій у ЗНУ*: <https://tinyurl.com/ycyfws9v>. Конфліктні ситуації, що виникають у сфері стипендіального забезпечення здобувачів вищої освіти, вирішуються стипендіальними комісіями факультетів, коледжів та університету в межах їх повноважень, відповідно до: *Положення про порядок призначення і виплати академічних стипендій у ЗНУ*: <https://tinyurl.com/yd6bq6p9>; *Положення про призначення та виплату соціальних стипендій у ЗНУ*: <https://tinyurl.com/y9r5dpwh>.

**ПСИХОЛОГІЧНА ДОПОМОГА.** Телефон довіри практичного психолога (061)228-15-84 (щоденно з 9 до 21).

**ЗАПОБІГАННЯ КОРУПЦІЇ.** Уповноважена особа з питань запобігання та виявлення корупції (Воронков В. В., 1 корп., 29 каб., тел. +38 (061) 289-14-18).

**РІВНІ МОЖЛИВОСТІ ТА ІНКЛЮЗИВНЕ ОСВІТНЄ СЕРЕДОВИЩЕ.** Центральні входи усіх навчальних корпусів ЗНУ обладнані пандусами для забезпечення доступу осіб з інвалідністю та інших маломобільних груп населення. Допомога для здійснення входу у разі потреби надається черговими охоронцями навчальних корпусів. Якщо вам потрібна спеціалізована допомога, будь-ласка, зателефонуйте (061) 228-75-11 (начальник охорони). Порядок супроводу (надання допомоги) осіб з інвалідністю та інших маломобільних груп населення у ЗНУ: <https://tinyurl.com/ydhcsagx>.

**РЕСУРСИ ДЛЯ НАВЧАННЯ.** *Наукова бібліотека*: <http://library.znu.edu.ua>. Графік роботи абонементів: понеділок – п'ятниця з 08.00 до 17.00; субота з 09.00 до 15.00.

**ЕЛЕКТРОННЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАВЧАННЯ (MOODLE)**: <https://moodle.znu.edu.ua>

Якщо забули пароль/логін, направте листа з темою «Забув пароль/логін» за адресами:

- для студентів ЗНУ - [moodle.znu@gmail.com](mailto:moodle.znu@gmail.com), Савченко Тетяна Володимирівна
- для студентів Інженерного інституту ЗНУ - [alexvask54@gmail.com](mailto:alexvask54@gmail.com), Василенко Олексій Володимирович

У листі вкажіть: прізвище, ім'я, по-батькові українською мовою; шифр групи; електронну адресу.

Якщо ви вказували електронну адресу в профілі системи Moodle ЗНУ, то використовуйте посилання для відновлення паролю <https://moodle.znu.edu.ua/mod/page/view.php?id=133015>.

**Центр інтенсивного вивчення іноземних мов**: <http://sites.znu.edu.ua/child-advance/>

**Центр німецької мови, партнер Гете-інституту**: <https://www.znu.edu.ua/ukr/edu/ocznu/nim>

**Школа Конфуція (вивчення китайської мови)**: <http://sites.znu.edu.ua/confucius>