

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ТЕХНОЛОГІЙ ТА ДИЗАЙНУ

Кафедра прикладної фізики та вищої математики

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор інституту



Ігор ПАНАСЮК  
(Власне ім'я ПРІЗВИЩЕ)  
2024 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА**

навчальної дисципліни Комп'ютерне моделювання в нанотехнологіях

Рівень вищої освіти перший (бакалаврський).

Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Освітня програма Нано- та мікротехнології в дизайні.

Навчально-науковий інститут інженерії та інформаційних технологій.

Київ 2024 рік

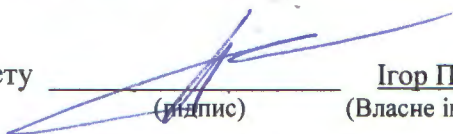
РОЗРОБЛЕНО: Київський національний університет технологій та дизайну

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: Горбачук Микола Тихонович, к. ф.-м. н., доцент  
Олейнікова Ірина Веніамінівна, к. ф.-м. н., доцент

Схвалено Вченою Радою Навчально-наукового інституту інженерії та інформаційних технологій.

Протокол від « 28 » 06 2024 року № 10

Директор інституту/ Декан факультету \_\_\_\_\_

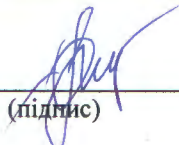


Ігор ПАНАСЮК  
(Власне ім'я ПРІЗВИЩЕ)

Обговорено та рекомендовано на засіданні кафедри прикладної фізики та вищої математики.

Протокол від « 19 » 06 2024 року № 11

Завідувачка кафедри \_\_\_\_\_



Оксана ЛАГОДА  
(Власне ім'я ПРІЗВИЩЕ)

## 1. ОПИС ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, спеціалізація, рівень вищої освіти	Характеристика дисципліни	
		денна форма здобуття вищої освіти	заочна форма здобуття вищої освіти
Кількість кредитів – 5	Галузь знань: <u>10 – Природничі науки</u>  Спеціальність: <u>105 Прикладна фізика та наноматеріали</u>  Освітня програма: <u>Нано- та мікротехнології в дизайні</u>  Рівень вищої освіти: <u>перший (бакалаврський)</u>	обов'язкова	
Змістові модулі – 1		<b>Рік підготовки:</b>	
Розділи –		2-й	__-__-й
Індивідуальне науково-дослідне завдання: _____ (назва)		<b>Семестр</b>	
		3-4-й	__-__-й
Загальна кількість годин – 150		<b>Лекції</b>	
		3 сем. -12 год 4 сем. -12 год	__-__ год.
Тижневих годин для денної форми здобуття вищої освіти: аудиторних – 3 семестр - 3 год 4 семестр – 3 год самостійної роботи здобувача вищої освіти – 3 семестр – 3,25 год 4 семестр – 3,25 год		<b>Практичні</b>	
		3 сем. -24 год 4 сем. -24 год	__-__ год.
		<b>Лабораторні</b>	
	-__ год.	__-__ год.	
	<b>Самостійна робота</b>		
	3 сем. -39 год 4 сем. -39 год	__-__ год.	
<b>Індивідуальне науково-дослідне завдання: __-__ год.</b>			
<b>Вид підсумкового контролю:</b> залік (семестр 3) екзамен (семестр 4)			

\* - при необхідності змістовий модуль може ділитись на розділи.

### Примітка.

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної роботи становить: для денної форми навчання 3 семестр – 36/39, 4 семестр – 36/39

## 2. АНОТАЦІЯ ДИСЦИПЛІНИ

Робоча програма навчальної дисципліни складається з 1 змістового модуля:

### **Змістовий модуль.** Комп'ютерне моделювання в нанотехнологіях

**Мета дисципліни:** оволодіти здатністю до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел, бути здатним розвивати компетентності використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання та опанувати навички використання інформаційних і комунікаційних технологій в професійній діяльності; набути здатності до постійного розвитку компетентностей у сфері прикладної фізики, інженерії та комп'ютерних технологій; розвинути здатність працювати автономно; опанувати здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання в професійній діяльності.

#### **Результати навчання дисципліни:**

*знати:* способи молекулярної самозбірки і методи багатомасштабного моделювання матеріалів і процесів; властивості та методи отримання й застосування наноматеріалів та наноструктурних об'єктів.

*вміти:* застосовувати сучасні математичні методи для побудови й аналізу математичних моделей фізичних процесів, застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів і наукоємних технологій;

*здати:* аналізувати основні методи обчислювальної нанотехнології: квантовомеханічні розрахунки «з перших принципів» і методи, засновані на положеннях молекулярної динаміки і моделях Монте Карло.

*володіти навичками:* роботи із сучасною обчислювальною технікою, вміти використовувати стандартні пакети прикладних програм і програмувати на рівні, достатньому для чисельного розв'язування фізичних задач та моделювання фізичних явищ.

**Необхідні навчальні компоненти (пререквізити, кореквізити і пост реквізити):** фізика, вуглецеві наноструктури, концепції використання наноматеріалів в дизайні, елементи квантової механіки, інженерна та комп'ютерна графіка.

**Програмні результати навчання:** ПРН 9, ПРН 13, ПРН 14.

**Види навчальних занять:** лекція, практичне, семінарське, лабораторне, консультація.

**Методи навчання:** словесний, пояснювально-демонстраційний, метод проблемного викладання, репродуктивний, дослідницький та ін.

**Методи контролю:** усний, письмовий, практичний, графічний, тестовий та ін.

**Форми підсумкового контролю:** залік (семестр 3), екзамен (семестр 4).

**Засоби діагностики успішності навчання:** індивідуальні завдання для розрахункових робіт, перелік питань для модульного, підсумкового контролю та захисту лабораторних робіт, комплекти тестових завдань для захисту лабораторних робіт, до модульного та підсумкового контролю.

**Мова навчання:** українська

### 3. ПРОГРАМА ДИСЦИПЛІНИ

#### СЕМЕСТР 3

**Змістовий модуль 1.** Комп'ютерне моделювання в нанотехнологіях  
(назва змістового модуля)

**Тема 1.** Загальні принципи комп'ютерного моделювання та методологічні основи обчислювальної нанотехнології.

**Тема 2.** Моделювання будови багатоелектронних атомів.

**Тема 3.** Моделювання молекулярних систем.

#### СЕМЕСТР 4

**Змістовий модуль 1.** Комп'ютерне моделювання в нанотехнологіях  
(назва змістового модуля)

**Тема 4.** Міжмолекулярні взаємодії та сили, моделювання методами Монте Карло.

**Тема 5.** Механізм утворення наноструктур. Моделі нанокластерів.

**Тема 6.** Програмне забезпечення моделювання наносистем.

### 4. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛІНИ

Назви змістових модулів (розділів) і тем	Кількість годин														
	Денна форма здобуття вищої освіти							вечірня форма здобуття вищої освіти							
	усьог	у тому числі:						усьог	у тому числі:						
		о	л	пр	лаб	сем	інд		СРС	го	л	пр	лаб	сем	інд
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
<b>Освітній компонент 1</b>															
<b>Семестр 3. Змістовий модуль 1. Комп'ютерне моделювання в нанотехнологіях</b>															
Тема 1. Загальні принципи комп'ютерного моделювання та методологічні основи обчислювальної нанотехнології.	19	2	8	-	-	-	9	-	-	-	-	-	-	-	-
Тема 2. Моделювання будови багатоелектронних атомів.	27	4	8	-	-	-	15	-	-	-	-	-	-	-	-
Тема 3. Моделювання молекулярних систем.	29	6	8	-	-	-	15	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Всього за семестр 3</b>	75	12	24				39								
<b>Семестр 4. Змістовий модуль 1. Комп'ютерне моделювання в нанотехнологіях</b>															
Тема 4. Міжмолекулярні взаємодії та сили, моделювання методами Монте Карло.	25	4	8	-	-	-	13	-	-	-	-	-	-	-	-
Тема 5. Механізм утворення наноструктур. Моделі нанокластерів.	25	4	8	-	-	-	13	-	-	-	-	-	-	-	-
Тема 6. Програмне забезпечення моделювання наносистем.	25	4	8	-	-	-	13	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Всього за семестр 4</b>	75	12	24				39								
<b>Всього годин за модулем 1</b>	150	24	48	-	-	-	78	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Освітній компонент 2</b>															

ІНДЗ (назва)		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Всього годин за дисципліною</b>	150	24	48	-	-	-	78	-	-	-	-	-	-	-

### 5.1 ЛАБОРАТОРНІ ЗАНЯТТЯ

№ з/п	Назва теми лабораторного/практичного/семінарського заняття	Кількість годин
	<b>Всього</b>	-

### 5.2 ПРАКТИЧНІ ЗАНЯТТЯ

№ з/п	Назва теми лабораторного/практичного/семінарського заняття	Кількість годин
	<b>Семестр 3</b>	
1	Математичне і комп'ютерне моделювання, класифікація моделей та приклади	8
2	Обчислювальний та комп'ютерний експеримент. Створення, обчислення	8
3	Технічні моделі. Методи побудови, створення моделей.	8
	<b>Всього за семестр 3</b>	24
	<b>Семестр 4</b>	
4	Методи чисельного розв'язування рівнянь, математичних залежностей.	8
5	Моделювання атомарних та молекулярних систем та їх взаємодій.	8
6	Моделювання наноструктурних об'єктів та систем і взаємозв'язків.	8
	<b>Всього за семестр 4</b>	24
	<b>Всього</b>	48

### 6. САМОСТІЙНА РОБОТА

№ з/п	Види робіт	Кількість годин
1	Підготовка до лабораторних / практичних/ семінарських робіт	20
2	Опрацювання тем, які не викладаються на лекціях	22
3	Підготовка до всіх видів контролю	15
4	Індивідуальні завдання (ІЗ), задачі, переклади, есе, вправи, графічні роботи, презентації, реферати, творчі роботи та ін.	21
	<b>Всього</b>	78

### 7. ІНДИВІДУАЛЬНЕ НАУКОВО-ДОСЛІДНЕ ЗАВДАННЯ

(курсова робота, курсовий проект)

## 8. РОЗПОДІЛ БАЛІВ, ЯКІ ОТРИМУЮТЬ СТУДЕНТИ/АСПІРАНТИ

Семестр 3

Залік

Поточне оцінювання та самостійна робота					МК	Сума
T1	T2	ПК	T3	IЗ(презентація)		
20	20	20	20	10	10	100

### Розподіл балів з дисципліни

Види робіт, що оцінюються в балах	T1	T2	T3	Усього
Виконання і захист практичних робіт, завдань	20	20	20	60
Індивідуальні завдання (презентація)	10			10
Поточний контроль (тестовий) (ПК)	20	-		20
Модульний контроль (МК)	10			10
<b>Всього з дисципліни</b>				<b>100</b>

Семестр 4

Екзамен

Поточне оцінювання та самостійна робота					МК	Екзамен	Сума
T4	T5	ПК	T6	IЗ(презентація)			
20	20	10	20	10	10	10	100

### Розподіл балів з дисципліни

Види робіт, що оцінюються в балах	T4	T5	T6	Усього
Виконання і захист практичних робіт, завдань	20	20	20	60
Індивідуальні завдання (презентація)	10			10
Поточний контроль (тестовий) (ПК)	10	-		10
Модульний контроль (МК)	10			10
Екзамен	10			10
<b>Всього з дисципліни</b>				<b>100</b>

### Критерії оцінювання видів робіт

1. Задача тем курсу (Т) складається із виконання і захисту практичних робіт (відповідно від №1 до №6) – 8 балів, оцінок розв'язку задач (розрахункових робіт) – 4 бали, оцінок знання теоретичних питань відповідної теми – 8 балів. В Т6 входить повторення теорії всіх СРС та практичних робіт курсу.
2. Індивідуальні завдання складаються із підготовки реферату на обрану тему об'ємом 10-20 стор., або виконання 5-ти розрахункових робіт. Оцінювання за десятибальною системою.
3. Поточний контроль проводиться по пройденим темам (1-3) у вигляді контрольної роботи або тесту.
4. Модульний контроль (МК) проводиться у вигляді контрольної роботи по питанням всього курсу та питань СРС. Оцінювання за десятибальною системою.

### Критерії оцінювання заліку, екзамену

Екзамен, залік включає в себе теоретичні питання та практичні задачі і завдання: 5 питань по 2 бали за кожне. Мінімальна оцінка на екзамені не може бути меншою за 6 балів.

### Відповідність шкал оцінок якості засвоєння навчального матеріалу

Оцінка за національною шкалою для екзамену, КП, КР /заліку/	Оцінка в балах	Оцінка за шкалою ECTS	Пояснення
<b>Відмінно/ зараховано</b>	90-100	<b>A</b>	<b>Відмінно</b> (відмінне виконання лише з незначною кількістю помилок)
<b>Добре/ зараховано</b>	82-89	<b>B</b>	<b>Дуже добре</b> (вище середнього рівня з кількома помилками)
	74-81	<b>C</b>	<b>Добре</b> (в загальному вірне виконання з певною кількістю суттєвих помилок)
<b>Задовільно/ зараховано</b>	64-73	<b>D</b>	<b>Задовільно</b> (непогано, але зі значною кількістю недоліків)
	60-63	<b>E</b>	<b>Достатньо</b> (виконання відповідає мінімальним критеріям)
<b>Незадовільно/ незараховано</b>	35-59	<b>FX</b>	<b>Незадовільно</b> (з можливістю повторного складання)
	0-34	<b>F</b>	<b>Незадовільно</b> (з обов'язковим повторним вивченням дисципліни)

## 9. ПОЛІТИКА КУРСУ

3.1 Обов'язкове дотримання академічної доброчесності студентами, а саме:

- самостійне виконання всіх видів робіт, завдань, форм контролю, передбачених робочою програмою даної навчальної дисципліни;
- посилання на джерела інформації у разі використання сторонніх ідей, розробок, тверджень, відомостей;
- дотримання норм законодавства про авторське право і суміжні права;
- надання достовірної інформації про результати власної навчальної (наукової, творчої) діяльності, використані методики досліджень і джерела інформації.

3.2 Отримання мінімальної оцінки з дисципліни можливе за умови виконання всіх лабораторних робіт в повному обсязі. На кожне оформлення та захист індивідуальних, лабораторних робіт та модульний контроль виділяється максимальна кількість балів відповідно до таблиці розподілу балів. Для отримання позитивної оцінки необхідно отримати не менше 60 відсотків максимальної кількості балів для кожного виду роботи.

3.3 При виявленні плагіату робота не оцінюється, а виконується повторно з отриманням нових результатів вимірювання, або зі зміною варіанту індивідуального завдання.

3.4 Мобільні пристрої дозволяється використовувати лише під час виконання розрахунків індивідуальних завдань.

3.5 В разі несвоєчасного виконання робіт бал буде понижений пропорційно часу перевищення терміну здачі.

3.6 Перенесення терміну здачі робіт/перездача:

- з поважних причин (лікарняний, академічна мобільність тощо) не впливатиме на оцінку;
- без поважних причин оцінюється з пониженням балів пропорційно часу перевищення терміну здачі.

3.7 Пропущені заняття мають бути відпрацьовані в позааудиторний час.



- 3.8 Студент має можливість перезарахувати оцінку підсумкового контролю і не складати екзамен або підвищити підсумкові бали за семестр на екзамені.
- 3.9 За наукову роботу та участь в олімпіадах студенти отримують додаткові бали (відвідування наукового гуртка - 5 балів, публікація статті - 5 балів, перемоги у внутрішніх та зовнішніх олімпіадах - 5 та 10 балів відповідно).

#### 10. МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ

1. Електротехнічні матеріали з наночастинками. Конспект лекцій. Для студентів всіх форм навчання, / М.Т.Горбачук. – К.; КНУТД, 2023. - 46 с.
2. Електротехнічні матеріали з наночастинками. Методичні вказівки до практичних занять для студентів всіх форм навчання / М.Т.Горбачук. – К.: КНУТД, 2023. – 24 с.
3. Потапов А.О., Мотіна А.І. Методичні вказівки по використанню МСАД для опрацювання результатів лабораторних робіт фізпрактикума. К.:КНУТД.-2005.112с.
4. М.Т.Горбачук, А.П.Клименко. Фізичні основи прогресивних технологій (конспект лекцій), друк. Київ, ДАЛПУ, 1999р., 39с.

#### 11. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Томашевський, В. М. Моделювання систем: Підручник /В. М. Томашевський. – К. : Видавнича група ВНУ, 2005. – 352 с.
2. Струтинський, В. Б. Математичне моделювання процесів та систем механіки: Підручник / В. Б. Струтинський. – Житомир : ЖІТІ, 2001. - 612 с.
3. Лазарев, Ю. Ф. Моделювання на ЕОМ. Навчальний посібник / Ю. Ф. Лазарев. – К. : Політехніка, 2007. - 290 с.
4. Фельдман, Л. П. Чисельні методи в інформатиці. Підручник / Л. П. Фельдман. – К. : Видавнича група ВНУ, 2006. - 480с.
5. Гаврилюк І. П. Методи обчислень: Підручник: У 2 ч. / І. П. Гаврилюк. – К. : Вища школа, 1995. – 367 с.
6. Кравченко, І. В. Інформаційні технології: Системи комп'ютерної математики [Електронний ресурс]: навч. посіб. для студ. спеціальності «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології» / І. В. Кравченко, В. І. Микитенко; КПІ ім. Ігоря Сікорського. - Електронні текстові дані (1 файл: 5,57 Мбайт). - Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 243 с.
7. Кравченко, І. В. Моделювання оптико-електронних приладів: Практикум [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології» 215/ І. В. Кравченко; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 4,35 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. –113 с.
8. Возняк, Л. С. Чисельні методи: Методичний посібник для студентів природничих спеціальностей / Л. С. Возняк, С. В. Шарин. – Івано-Франківськ : Плай, 2001.- 64 с.
9. Ляшенко, Б. М. Методи обчислень: навчально-методичний посібник для студентів фізико-математичного факультету / Б. М. Ляшенко, О. М. Кривонос, Т. А. Вакалюк. – Житомир : Вид-во ЖДУ, 2014. - 228 с.
10. Задачин, В. М. Чисельні методи / В. М. Задачин. - Х. : ХНЕУ, 2014. –180 с.
11. Моделювання інформаційно-вимірювальних систем: Конспект лекцій для студентів спеціальності 152 «Метрологія та інформаційно-вимірювальна техніка» [Електронне видання] / Укл. І. В. Кравченко. –К. : НТУУ «КПІ», 2017. – 79 с
12. О. М. Ключко, А. О. Пашківський, Д. Ю. Шеремет. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДЕЯКИХ НАНОЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ РАДІОТЕХНІЧНИХ І ТЕЛЕВІЗІЙНИХ СИСТЕМ ISSN 1990-5548 Електроніка та системи управління. 2012. №3(33)
13. Олена Тарасова, Павло Мерзликін. Сучасні методи комп'ютерного моделювання наночастинок і наносистем РОЗДІЛ II. Теоретична фізика. 10 (311), 2015

## 12. ІНТЕРНЕТ РЕСУРСИ

1. <https://msnp.knutd.edu.ua/course/view.php?id=7431>

ПЕРЕЗАТВЕРДЖЕНО

Протокол засідання кафедри від «\_\_» \_\_\_\_\_ 202\_\_ року № \_\_\_\_\_

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_  
підпис

Ірина Олейнікова  
Власне ім'я ПРІЗВИЩЕ

ПЕРЕЗАТВЕРДЖЕНО

Протокол засідання кафедри від «\_\_» \_\_\_\_\_ 202\_\_ року № \_\_\_\_\_

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_  
підпис

\_\_\_\_\_   
Власне ім'я ПРІЗВИЩЕ