


**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**Львівський національний університет імені Івана Франка**  
**Фізичний факультет**  
**Кафедра фізики твердого тіла**

**Затверджено**

На засіданні кафедри фізики твердого тіла  
фізичного факультету  
Львівського національного університету  
імені Івана Франка  
(протокол № 1 від 25 серпня 2023 р.)

Завідувач кафедри   
проф. Володимир КАПУСТЯНИК

**Силабус**

**з навчальної дисципліни «Проблеми фізики наноструктур»,**

**що викладається в межах**

**ОПШ Прикладна фізика та наноматеріали**

**другого (магістерського) рівня вищої освіти для здобувачів**

**зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»**

<b>Назва курсу</b>	<b>Проблеми фізики наноструктур</b>
<b>Адреса викладання курсу</b>	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005 Львів
<b>Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна</b>	фізичний факультет, кафедра фізики твердого тіла
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	10 Природничі науки / 105 Прикладна фізика та наноматеріали
<b>Викладачі курсу</b>	доцент кафедри фізики твердого тіла, к.ф.-м.н Коваленко Марія Василівна
<b>Контактна інформація викладачів</b>	<a href="mailto:mariya.kovalenko@lnu.edu.ua">mariya.kovalenko@lnu.edu.ua</a> <a href="https://physics.lnu.edu.ua/employee/kovalenko-m-v">https://physics.lnu.edu.ua/employee/kovalenko-m-v</a>
<b>Консультації по курсу відбуваються</b>	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту та на платформі Microsoft Teams.
<b>Сторінка курсу</b>	<a href="https://physics.lnu.edu.ua/course/problem-y-fizyky-nanostruktur">https://physics.lnu.edu.ua/course/problem-y-fizyky-nanostruktur</a>
<b>Інформація про курс</b>	Дисципліна «Проблеми фізики наноструктур» є нормативною дисципліною зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали для другого (магістерського) рівня вищої освіти, яка викладається в 2 семестрі в обсязі 4 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
<b>Коротка анотація курсу</b>	Курс «Проблеми фізики наноструктур» розроблено таким чином, щоб надати магістрам відповідні теоретичні знання, уміння, навички, загальні та фахові компетентності для продукування нових ідей, розв'язання комплексних проблем у галузі прикладної фізики. Тому у курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачене розв'язання практичних задач, пов'язаних зі застосуванням квантово-механічних і класичних моделей твердих тіл і наноструктур на їхній основі для моделювання структурних, електронних та фізичних властивостей таких структур. Додатково курс покликаний надати студентам необхідні знання та навички, обов'язкові для того, щоб розкрити власний науковий потенціал та оформити наукові результати у цілісний продукт. Курс є важливим елементом становлення фахівців не лише у області прикладної фізики, але й науковому середовищі загалом.
<b>Мета та цілі курсу</b>	Метою вивчення дисципліни є оволодіння студентами основними фундаментальними уявленнями про сучасні методики розрахунків та принципи моделювання у галузі фізики твердого тіла, формування в студентів вмінь та навичок практичної роботи для розв'язання проблемних завдань, а також ознайомлення студентів з принципами та навиками опрацювання власних наукових результатів і їхнього представлення у вигляді наукової, зокрема, магістерської роботи, а також статей, тез доповідей, усних та стендових доповідей, пошуку необхідної інформації в базах даних, використання можливостей різних інтерактивних ресурсів для взаємодії між науковцями.
<b>Література для вивчення дисципліни</b>	<b>Базова:</b> 1. Martin R. Electronic Structure. Basic theory and practical methods / R. Martin. – Cambridge, 2nd Edition. – 2020. – 788 p. 2. Погосов В.В. Нанофізика і нанотехнології / В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабіч, А.В. Коротун, А.П. Шпак. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2011. – 380 с.

	<p>3. Banerjee J.P. Physics of Semiconductors and Nanostructures / J.P. Banerjee, S. Banerjee. – CRC Press, 2019. – 434 p.</p> <p>4. Бірта Г. О., Бургу Ю. Г. Методологія і організація на-укових досліджень: навч. посіб. – К.: «Центр учбової літератури», 2014. – 142 с.</p> <p>5. Рудиш М. Я. Зонна структура та рефрактивні параметри кристалів з ізотропною точкою : монографія / М. Я. Рудиш, П. А. Щепанський, В. Й. Стадник, Р. С. Брезвін. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2022. – 264 с.</p> <p>6. Pratharan K. Research Methodology for Scientific Research. / K. Pratharan. – Dreamtech Press, 2019. – 272 p.</p> <p><b>Допоміжна:</b></p> <p>1. Handbook of materials modeling / editor S. Yip. – Springer, 2020. – 2965 p.</p> <p>2. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підруч. для студ. ВНЗ / П.Є. Стрижак. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с.</p> <p>3. Погосов В.В. Елементи фізики поверхні, наноструктур і технологій / В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабіч, А.В. Коротун. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2010. – 365 с.</p> <p>4. Brázdová V. Atomistic Computer Simulations: A Practical Guide / V. Brázdová, D. R. Bowler. – Wiley-VCH Verlag GmbH &amp; Co. KGaA, 2013. – 341 p.</p> <p>5. Atomic-Scale Modeling of Nanosystems and Nanostructured Materials: Lecture Notes in Physics / editors C. Massobrio, H. Bulou, Ch. Goyhenex. – Berlin Heidelberg: Springer, 2010. – 374 p.</p> <p>6. Carol E. McGraw-Hill's Concise Guide to Writing Research Papers / E. Carol. – New York: McGraw-Hill, 2010. – 220 p.</p> <p>7. Glasman-Deal H. Science research writing for non-native speakers of English / H. Glasman-Deal. – London: Imperial College Press, 2010, 272 p.</p> <p><b>Інформаційні ресурси:</b></p> <p>1. <a href="http://www.nanohub.org">www.nanohub.org</a></p> <p>2. <a href="http://www.quantum-espresso.org">www.quantum-espresso.org</a></p> <p>3. <a href="http://www.skybox.net.ua">www.skybox.net.ua</a></p> <p>4. <a href="http://www.nbu.gov.ua/portal/natural/nano/">www.nbu.gov.ua/portal/natural/nano/</a></p> <p>5. <a href="http://www.elsevier.com">www.elsevier.com</a></p> <p>6. <a href="http://pubs.acs.org/">http://pubs.acs.org/</a></p> <p>7. <a href="https://www.scopus.com/">https://www.scopus.com/</a></p> <p>8. <a href="http://webofknowledge.com/">http://webofknowledge.com/</a></p> <p>Додаткові матеріали також буде запропоновано для кожної теми окремо</p>
<b>Тривалість курсу</b>	один семестр
<b>Обсяг курсу</b>	120 годин, з яких 48 годин аудиторних занять, з них 16 годин лекцій, 32 годин лабораторних занять, та 72 години самостійної роботи
<b>Очікувані результати навчання</b>	В результаті вивчення цього курсу здобувач має оволодіти такими компетентностями:

**Інтегральна компетентність:**

Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми в сфері прикладної фізики та наноматеріалів та/або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень, впровадження інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог.

**Загальні компетентності (ЗК):**

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

ЗК 2. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово.

ЗК 4. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК 5. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 6. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК 7. Здатність працювати в команді.

ЗК 8. Навички міжособистісної взаємодії.

ЗК 9. Здатність працювати автономно.

ЗК 10. Навики здійснення безпечної діяльності.

ЗК 11. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК 12. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

**Спеціальні (фахові) компетентності спеціальності (СК):**

СК 1. Здатність виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

СК 2. Здатність оптимально визначити матеріальні засоби, необхідні для проведення наукового дослідження або науково-технічної розробки (матеріали, апаратура, обладнання, обчислювальна техніка та інше).

СК 3. Здатність аналізувати отримані результати, презентувати їх фахівцям у даній галузі, оформлювати наукові статті та науково-технічні звіти.

СК 4. Здатність відповідно до поставленої задачі виконувати науково-технічні розробки в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

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

СК 6. Здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання для опису фізичних об'єктів, пристроїв та процесів.

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі **програмні результати навчання:**

ПРН 1. Використовувати знання в галузі прикладної фізики та наноматеріалів, інформаційних технологій для виконання наукових досліджень та розв'язання виробничих задач.

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 3. Вміти обговорювати та знаходити прогресивні та інноваційні рішення проблем і завдань при здійсненні професійної діяльності.

	<p>ПРН 4. Встановлювати та аргументувати нові залежності між параметрами та характеристиками фізичних систем.</p> <p>ПРН 7. Мати розуміння спеціальних математичних методів та інформаційних технологій та навички їхнього застосування для здійснення досліджень та/або інновацій у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.</p> <p>ПРН 8. Вміти використовувати сучасну фізичну апаратуру та обладнання, оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.</p>
<b>Ключові слова</b>	Нанооб'єкти, метод функціоналу густини, метод молекулярної динаміки, метод Монте-Карло, оптимізація геометрії, електронний спектр, оптичні властивості, дефекти.
<b>Формат курсу</b>	Очний
	проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем
<b>Теми</b>	Наведено у табл.1 і табл. 2
<b>Підсумковий контроль, форма</b>	іспит в кінці семестру
<b>Пререквізити</b>	Для вивчення курсу студенти повинні знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики, квантової механіки, фізики нанорозмірних об'єктів; вміти застосовувати набуті раніше знання з курсів методів математичної фізики, загальної фізики, квантової механіки, прикладної спектроскопії, основ експертних систем, прикладних проблем фізики низьких температур і комп'ютерних технологій для розв'язку практичних завдань; володіти навиками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференціальних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.
<b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</b>	<p>Використовуються такі методи навчання:</p> <p>а) <i>словесні</i> – лекція, пояснення, бесіда, інструктаж (вступний та поточний) під час виконання лабораторних робіт;</p> <p>б) <i>наочні</i> – ілюстрування лекційного матеріалу презентаціями, що включають в себе таблиці, схеми та графіки;</p> <p>в) <i>лабораторні</i> – виконання лабораторних робіт, що передбачає організацію навчальної роботи для отримання нових знань, перевірки певних наукових гіпотез на рівні досліджень, узагальнень та аналізу та формування вмінь і навичок інтерпретації результатів досліджень різноманітних об'єктів.</p>
<b>Необхідне обладнання</b>	персональний комп'ютер, операційні системи (Windows, Linux), спеціальне програмне забезпечення (Quantum ESPRESSO), загальноживані комп'ютерні програми, мультимедійний проектор
<b>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</b>	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• лабораторні: 7 лабораторних робіт, максимальна кількість балів 24: <ul style="list-style-type: none"> <li>Лабораторні роботи № 1–4 по 3 бали;</li> <li>Лабораторні роботи № 5–7 по 4 бали;</li> </ul> </li> <li>• підготовка індивідуального проекту: 16 балів (4 бали презентація, 4 бали представлення, 8 балів оформлення проекту), максимальна кількість балів 16;</li> <li>• модулі: 10 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 10 (2 модулі по 5 балів);</li> </ul>

	<p>• іспит: 50% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 50. Підсумкова максимальна кількість балів 100.</p>
<b>Питання до екзамену</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. В чому суть квантова-механічного підходу розрахунків «із перших принципів» для моделювання структур?</li> <li>2. Які комп'ютерні пакети використовуються для проведення моделювання структури та фізичних властивостей? Переваги та недоліки.</li> <li>3. В чому головна суть теорії функціонала густини?</li> <li>4. Що означає розрахунок «з перших принципів»? В чому складність розрахунків з перших принципів?</li> <li>5. Види псевдопотенціалів.</li> <li>6. Види обмінно-кореляційних потенціалів.</li> <li>7. Якими методами можна скористатися для часо-залежних розрахунків?</li> <li>8. В чому полягає суть збіжності самоузгоджених розрахунків?</li> <li>9. Що описує термін «електронна структура»? Зонно-енергетична структура твердого тіла.</li> <li>10. Відповідно до теореми Блоха який параметр є квазі-періодичним? Як обирається набір k-точок у теорії функціоналу густини?</li> <li>11. Методи розрахунку одноелектронних станів кристалу. Метод МО-ЛКАО.</li> <li>12. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока.</li> <li>13. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока.</li> <li>14. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі.</li> <li>15. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини.</li> <li>16. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль.</li> <li>17. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії.</li> <li>18. Обмінно-кореляційні функціонали. Параметричні функціонали.</li> <li>19. Аналітичні та чисельні методи оптимізації геометрії (метод найшвидшого спуску, метод спряжених градієнтів.)</li> <li>20. Кластерні методи. <math>X\alpha</math> - метод. Кластерне наближення та його застосування.</li> <li>21. Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки.</li> <li>22. Моделювання Кара-Парінелло.</li> <li>23. Моделювання точкових дефектів. Електронна структура твердих тіл біля поверхні.</li> <li>24. Розрахунок електростатичної енергії іонного кристалу методом Евальда.</li> <li>25. Аналіз хімічного зв'язку. Аналіз заселеності по Маллікену і альтернативні схеми розподілу заряду.</li> <li>26. Аналіз хімічного зв'язку на основі розподілу електронної густини. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.</li> <li>27. Спектр уявної частини діелектричної проникності за результатами зонного розрахунку.</li> </ol>

	<p>28. Аналіз Крамерса- Кроніга. Розрахунок оптичних спектрів.</p> <p>29. Атомні та пружні характеристики твердих тіл.</p> <p>30. Ab initio розрахунки фоновних спектрів кристалів і надграток.</p> <p>31. Обчислення енергетичних характеристик і термодинамічних функцій, передбачення стійкості системи.</p> <p>32. Розрахунок деяких характеристик ІЧ, ЕПР, ЯМР–спектрів.</p> <p>33. Вплив зовнішніх полів (температура, тиск, магнітне поле) на зонно-енергетичну структуру твердих тіл.</p> <p>34. Розподіли густини станів вуглецевих нанотрубок</p> <p>35. Розрахунок параметрів екранування далекодіючого кулонівського вкладу в потенціал парної міжіонної взаємодії.</p> <p>36. Наука як система знань. Основні поняття науки</p> <p>37. Поняття наукового дослідження: основні ознаки та характеристики.</p> <p>38. Основні види наукових досліджень</p> <p>39. Методологія дослідження.</p> <p>40. Загальнонаукові принципи дослідження.</p> <p>41. Емпіричні методи: вимірювання, порівняння, узагальнення</p> <p>42. Сутність та характеристика теоретичних методів наукового дослідження.</p> <p>43. Алгоритм науково-дослідного процесу</p> <p>44. Організаційна стадія науково-дослідного процесу</p> <p>45. Ефективність наукових досліджень</p> <p>46. Форми викладу матеріалів дослідження та наукові видання.</p> <p>47. Форми висвітлення підсумків наукової роботи та відображення її результатів.</p> <p>48. Усна передача інформації про наукові результати.</p>
<b>Опитування</b>	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

## Схема курсу «Проблеми фізики наноструктур»

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Література	Термін виконання
<b>Змістовий модуль 1. Методи дослідження, фізичні властивості нанорозмірних об'єктів та використання комп'ютерного моделювання для дослідження наноструктур та матеріалів на їхній основі</b>				
1,2	<p><b>Вступ</b></p> <p>Наука як система знань. Основні поняття й визначення наук про наносистеми і нанотехнології. Міждисциплінарність і мультидисциплінарність. Приклади нанооб'єктів і наносистем, їхні особливості й технологічні застосування. Об'єкти й методи нанотехнологій. Принципи й перспективи розвитку нанотехнологій.</p> <p>Інформаційне забезпечення наукових досліджень. Методи пошуку та збору наукової інформації. Систематизація наукової інформації. Бази даних, наукометричні бази, реферативні бази. Кількісні показники досягнень науковця / установи / країни: кількість публікацій, кількість цитувань, індекс Гірша.</p> <p>Алгоритм проведення наукового дослідження. Методологія наукових досліджень. Основні складові наукового методу: якісне спостереження, кількісне спостереження, гіпотеза, експеримент, теорія, закон. Поняття про компетентності.</p> <p><b>Тема 1. Особливості фізичних взаємодій у наномасштабах.</b></p> <p>Роль об'єму й поверхні у фізичних властивостях нанорозмірних об'єктів. Механіка нанооб'єктів. Оптика нанооб'єктів. Співвідношення довжини хвилі світла й розмірів наночастинок.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 4 год	Базова: 2, 3, 4; Допоміжна: 3	2 тижні
3,4	<p><b>Тема 2. Властивості електронного спектру нанорозмірних об'єктів.</b></p> <p>Квантова механіка наносистем. Квантоворозмірні ефекти в нанооб'єктах. Квазічастинки у твердому тілі та у наноструктурованих матеріалах. Квантові точки. Нитковидні кристали, волокна, нанотрубки, тонкі плівки і гетероструктури. Квантові ефекти в наноструктурах у магнітному полі. Електропровідність нанооб'єктів. Поняття балістичної провідності. Одноелектронне тунелювання і кулонівська блокада. Оптичні властивості квантових точок. Спінтроніка нанооб'єктів.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 4 год	Базова: 1, 2; Допоміжна: 3	2 тижні



5,6	<p><b>Тема 3. Метод функціоналу густини</b> Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	Базова: 1, 5; Допоміжна: 2, 4	2 тижні
7,8	<p><b>Тема 4. Емпіричні та статистичні методи розрахунку</b> Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали. Моделювання Кара-Парінелло. Зв'язок розрахованих параметрів та експериментально вимірюваних характеристик. Метод Монте-Карло. Статистичні ансамблі. Кінетичне Монте-Карло моделювання. Міграція атомів по поверхні як процес випадкового блукання. Енергія активації і частота стрибків. Ймовірності елементарних подій. Основні алгоритми кінетичного Монте-Карло моделювання.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 4 год	Базова: 1; Допоміжна: 1, 2	2 тижні
9,10	<p><b>Тема 5. Аналіз результатів розрахунків властивостей наноструктур</b> Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем. Електронна структура твердих тіл біля поверхні. Основні пакети програм для виконання вчислювальних задач у фізиці наноструктур. Фінансування та оцінка ефективності наукових досліджень</p> <p><b>Тема 6. Топологічне моделювання наноструктур</b> Молекулярне конструювання. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів. Аналіз заселеності за Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 4 год	Базова: 1, 5; Допоміжна: 1	2 тижні

	<p><b>Тема 7. Розрахунок спектральних характеристик наноструктур</b>          Розрахунок оптичних спектрів. Атомні та пружні характеристики. Енергетичний спектр низькорозмірних систем в електричному і магнітному полях.</p>			
<b>Змістовий модуль 2. Представлення результатів наукових досліджень</b>				
11,12	<p><b>Тема 8. Реалізація результатів наукового дослідження. Основи наукової етики.</b> Структура наукової публікації. Основна частина статті. Правила оформлення літературних посилань згідно з вимогами. Оформлення графічного матеріалу. Представлення таблиць. Основні українські та світові наукові видавництва. Ознайомлення з правилами для авторів. Вибір наукового журналу. Рецензування наукової статті. Наукова репутація. Основи академічної доброчесності Спеціальні (hard skills) та універсальні (soft skills) навички. Механізми взаємодії між науковцями.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	Базова: 4, 6; Допоміжна: 6, 7	2 тижні
13,14	<p><b>Тема 9. Наукові конференції та наукова співпраця.</b>          Представлення наукових результатів на конференціях у вигляді усної та стендової доповіді. Тези доповіді на конференції. Етика ведення наукової дискусії. Актуальні напрямки наукових досліджень. Міждисциплінарні дослідження. Засоби посилення якості досліджень. Використання світових інструментальних ресурсів. Впровадження наукових ідей. Інтелектуальний захист: патенти, авторські свідоцтва. Інновації. Наукові парки.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	Базова: 4, 6; Допоміжна: 6, 7	2 тижні
15,16	<p><b>Тема 10. Підготовка та оформлення кваліфікаційної (магістерської) роботи.</b> Поняття, характеристика та вимоги до магістерських робіт. Лексика наукової роботи. Основні етапи підготовки магістерської роботи. Оформлення презентації та підготовка до захисту. Дотримання правил академічної доброчесності та процедура перевірки кваліфікаційних робіт на плагіат.</p>	Лекції – 2 год, самостійна робота – 6 год	Базова: 4, 6; Допоміжна: 6, 7	2 тижні

## Теми лабораторних занять

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1	Розрахунок з перших принципів параметрів ґратки на прикладі напівпровідникової сполуки.	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	1 тиждень
2	Комп'ютерне моделювання зонно-енергетичної структури та густини станів наноматеріалів	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	1 тиждень
3, 4	Моделювання процесу адсорбції молекул на поверхні металевої сполуки	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
5	Моделювання та розрахунки оптичних властивостей нанооб'єктів	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
6–10	Проведення досліджень в межах індивідуального проекту	лаборатор. заняття – 10 год, самостійна робота – 4 год	5 тижнів
11, 12	Оформлення результатів виконання проекту у вигляді наукової статті	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
13, 14	Написання тез доповіді, оформлення стендів та підготовка презентації для усної доповіді на конференції або захисті магістерської роботи.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 4 год	1 тиждень
15, 16	Основні етапи підготовки магістерської роботи	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні