Силабус дисципліни «Проблеми комп'ютерного моделювання фізичних процесів»
2020–2021 н.р.

Назва курсу	Комп'ютерне моделювання фізичних процесів
Адреса викладання дисципліни	вул. Драгоманова, 19, 79005 Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	фізичний факультет, кафедра загальної фізики
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки / 105 Прикладна фізика та наноматеріали
Викладачі дисципліни	професор кафедри загальної фізики, д.ф.-м.н. Демків Тарас Михайлович
Контактна інформація викладачів	taras.demkiv@lnu.edu.ua, tmdemkiv@gmail.com
Консультації з дисципліни відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Можливі також он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/problemy-komp-iuternoho-modeliuvannia-fizychnykh-protsesiv-105d-prykladna-fizyka-ta-nanomaterialy-aspiranty-2-ho-r-n
Інформація про дисципліну	Чисельне моделювання фізичних процесів складає невід'ємну частину сучасної фундаментальної і прикладної науки. За важливістю воно наближається до традиційних експериментальних і теоретичних методів. Тому майбутні наукові робітники, інженери та викладачі обов'язково повинні володіти технологією комп'ютерного моделювання, вміти досліджувати різні фізичні явища та процеси за допомогою комп'ютера. Курс комп'ютерного моделювання фізичних процесів розширює знання майбутніх бакалаврів в області дискретної математики, дає навики опису складних фізичних процесів за допомогою математичного апарату, складання алгоритму вирішення завдання, переклад алгоритму на одну з мов програмування, отримання результатів за допомогою комп'ютера та проведення їх аналізу.
Коротка анотація дисципліну	Програма вивчення навчальної дисципліни "Комп'ютерне моделювання фізичних процесів" складена відповідно до освітньо-професійної програми бакалаврів спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали (складова 1: глибинні знання зі спеціальності). Її викладають у 8 семестрі в обсязі 4 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Програма навчальної дисципліни складається з двох змістових модулів: 1. Математичне моделювання оптичних процесів у матеріалах. 2. Математичне моделювання перенесення заряду у напівпровідниках та явища самоорганізації.
Мета та цілі дисципліни	Метою навчальної дисципліни " Проблеми комп'ютерного моделювання фізичних процесів" є розглянути методи комп'ютерного моделювання фізичних процесів та особливості їх застосуванням з використанням бібліотек мови програмування Python; завданням – сформувати навики формулювати задачу, визначати проблеми та шляхи їх розв'язання для комп'ютерних моделей фізичних процесів та застосовувати методи комп'ютерного моде-

	лювання до практичних задач з фундаментальної та прикладної фізики.
Література для вивчення дисципліни	**Основна література:** 1. Lutz M. Learning Python – Published by O'Reilly Media, Inc., 2013. 2. Yen W., Shionoya S., Yamamoto H. Phosphor handbook – CRC Press: Laser and Opt. Science and Tech. Series. – 2007. –1056 p. 3. Савчин В.П., Шувар Р.Я. Електронне перенесення в напівпровідниках та напівпровідникових структурах. – Видавничий центр ЛНУ імені І.Франка. – 2008. – 688с. 4. Білий М.У. Основи нелінійної оптики та її застосування: навч. посібник / М.У. Білий. – К.: Видавничий центр „Київський Університет", 1999. – 172 с. 5. Шкловський Б.И., Ефрос А.Л. Електронні властивості легованих напівпровідників. – М.: Наука. – 1979. – 351с. (рус.) 6. Barry P. Head First Python (2nd Edition). – All IT books. – 2016. – 624 p. 7. Гулд Х., Тобочник Я. Комп'ютерне моделювання у фізиці. Т. 1- М.: Мир, 1990 (рус.). 8. Гулд Х., Тобочник Я. Комп'ютерне моделювання у фізиці. Т. 2- М.: Мир, 1990. (рус.). 9. Б.М.Аскеров. Електронні явища перенесення у напівпровідниках. – М.: Наука. – 1985. – 320с. (рус.) **Додаткова література:** 10. Майер Р.В. Комп'ютерне моделювання фізичних явищ. – Глазов: ГГПИ. – 2009. – 112с. (рус.) 11. С.В.Шокалюк. Основи роботи в SAGE. – К.: НПУ ім. Драгоманова. – 2008. – 64 с. 12. Поршнєв С.В. Комп'ютерне моделювання фізичних процессов в пакете MATLAB. – М.: Телком, 2003. – 592 с. (рус.) 13. Хуторова О.Г., Стенин О.М., Фахртдинов Р.Х., Морозова Л.В., Журавлев А.А., Теплов В.Ю., Зыков Е.Ю. Комп'ютерне моделювання фізичних процесів. – Казань. – 2001. – 50 с. (рус.) 14. Шкловський Б.И., Ефрос А.Л. Електронні властивості легованих напівпровідників. – М.: Наука. – 1979. – 351с. (рус.) 15. Андреєв А.В. Колективне спонтанне випромінювання (надвипромінювання Діке) / Емельянов В.И., Ильинский Ю.А. // Усп. физ. н. – 1980, Т.132, С.653 (рус.) Наукові статті у періодичних виданнях за тематикою дисципліні.
Тривалість дисципліни	один семестр
Обсяг дисципліни	90 год, з яких 48 год аудиторних занять, з них 32 год лекцій, 16 год практичних занять та 42 год самостійної роботи
Очікувані результати навчання	Після завершення цього курсу студент буде: - **знати** методи чисельного інтегрування та диференціювання функцій;чисельні методи рішення задач математичної фізики; синтаксис та бібліотеки для математичних обчислень мови програмування Python; можливості бібліотек 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, Python, SAGE, кінетичні ефекти у напівпровідниках, екситон, люмінесценція, наночастинки, полістирольний композит
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 дисципліни студенти потребують знань із загальних курсів з фізики, 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	персональний комп'ютер, загальновживані комп'ютерні програми і операційні системи, програмне середовище Python, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Контроль засвоєння матеріалу включає: • поточний контроль (виконання 6 лабораторних робіт за темами 1-8, перша з яких оцінюється в 5 балів, решта – по 9 балів); • екзаменаційний контроль – 50 балів. Сумарна оцінка за 2 змістовими модулями виставляється за 100-бальною шкалою.
Питання до модульних контролів (замірів знань)	1. Комп'ютерний експеримент. Етапи та співвідношення з реальним експериментом. 2. Явище надвипромінювання. Умови спостереження. Причини скорочення часу загасання люмінесценції. 3. Екситони Френкеля та Мотта. Випадок напівпровідникових кристалів. 4. Особливості прояву квантово-розмірного ефекту у діелектриках та напівпровідниках. Модель, що описує температурну залежність часу загасання люмінесценції. 5. Синглетні та триплетні рівні екситонів. Моделі, що описують заповнення синглетних та триплетних рівнів. 6. Етапи сцинтиляційного процесу. 7. Релаксація електронів та дірок Довжина вільного пробігу, довжина термалізації електронів та довжина пробігу екситонів як критичні параметри люмінесценції у наночастинках. 8. Механізми передачі енергії у наночастинках та полістирольних нанокомпозитах з вкрапленими наночастинками. 9. Інверсна заселеність енергетичних рівнів. Моделі заселеності рівнів у багаторівневих системах. 10. Статистика Фермі-Дірака, розподіл Больцмана. Вироджені та невироджені напівпровідники. Ефективна маса електронів та дірок. 11. Рівняння електронейтральності у випадку параболічних та непараболічних зон. Вплив підзон на температурні залежності провідності. 12. Температурні залежності коефіцієнта Холла та термое.р.с. у напівпровідниках різного типу. Механізми розсіяння. 13. Умови, за яких реалізується спінодальний розпад. Модель Кана Хілларда.

	14. Термодинамічні умови утворення композитного матеріалу "кристал у кристалі". Стандартна енергія Гіббса хімічної реакції. Перше наближення Уліха. 15. Константа рівноваги реакції. Температурні залежності константирівноваги. 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 «**Комп'ютерне моделювання фізичних процесів**»

Тиждень	Тема занять (перелік питань)	Форма діяльності та обсяг годин	Додаткова література / ресурс для виконання завдань (за потреби)	Термін виконання
1, 2	Місце комп'ютерного експерименту у фізиці. Використання ООП Python та математичних середовищ.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 3 год.		2 тижні
3,4	Скорочення часу загасання люмінесценції перовськитів при переході від об'ємних кристалів до наночастинок.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 5 год.		2 тижні
5, 6	Явище надвипромінювання.	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні
7, 8	Електронний механізм люмінесценції у полістирольних композитах	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 5 год.		2 тижні
9 - 10	Моделювання середовища з інверсною заселеністю рівнів	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 5 год.		2 тижні
11-12	Кінетичні ефекти у напівпровідниках.	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні
13-14	Термодинаміка утворення мікрофаз у діелектричних матрицях	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні
15-16	Моделі самоорганізованої критичності. Спінодальний розпад	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.		2 тижні