

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ
ІМЕНІ І.Р.ЮХНОВСЬКОГО

"ЗАТВЕРДЖУЮ"

Директор

Інституту фізики конденсованих систем
імені І.Р.Юхновського НАН України
чл.-кор. НАН України, професор

Т.М. Брик

"07" січня 2026 р.



ОСВІТНЬО-НАУКОВА ПРОГРАМА

*Освітньо-наукова програма третього рівня вищої освіти
Інституту фізики конденсованих систем НАН України*

Галузь знань: 10 *Природничі науки*

Спеціальність: 104 *Фізика та астрономія*

Рівень освіти: третій (освітньо-науковий)

Вченою радою ІФКС
ім. І.Р. Юхновського НАНУ
Розглянуто та затверджено
(протокол № 58
від «06» січня 2026 р.)

Львів 2026 р.

Керівник:	
Пацаган Т.М.	д.ф.-м.н., старший дослідник, заступник директора з наукових питань ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Члени:	
Брик Т.М.	чл.-кор. НАН України, професор, директор ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Мриглод І.М.	академік НАН України, д.ф.-м.н., гол. наук. співр. ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Ільницький Я.М.	д. ф.-м. н., професор, зав. відділу ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Держко О.В.	д. ф.-м. н., професор, зав. відділу ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Токарчук М.В.	д. ф.-м. н., професор, гол. наук. сп. ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Дудка М.Л.	д. ф.-м. н., завідувач відділу ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Трохимчук А.Д.	д. ф.-м. н., пров. наук. співр. ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Ткачук В. М.	д. ф.-м. н., професор, завідувач кафедри теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука Львівського Нзаціонального університету ім. І. Франка (представник роботодавців)
Сапріянчук П. В.	аспірант другого року навчання ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України
Бзовська І. С.	к.ф.-м.н., вчений секретар ІФКС ім. І.Р.Юхновського НАН України

**Керівник
проектної групи:**



д.ф.-м.н. Пацаган Т.М.

ВСТУП

Освітньо-наукова програма третього рівня вищої освіти Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського Національної академії наук України реалізується з 2016 року відповідно до Закону України «Про вищу освіту» та чинних нормативних документів у сфері підготовки здобувачів ступеня доктора філософії. Програма спрямована на підготовку докторів філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» та з фокусом на фундаментальні дослідження та сучасні напрямки фізичних наук в напрямку теоретичної фізики конденсованої речовини.

Підготовка здобувачів третього рівня вищої освіти здійснюється на базі Інституту, який має визнаний національний і міжнародний науковий авторитет у галузі статистичної фізики, фізики конденсованого стану та фізики м'якої речовини. Зміст освітньо-наукової програми узгоджений з науковими напрямами діяльності Інституту і забезпечує поєднання поглибленої теоретичної та практичної підготовки з виконанням самостійних наукових досліджень.

Навчальні дисципліни, які пропонуються в рамках освітньо-наукової програми, охоплюють вивчення фізики конденсованої речовини, зокрема, квантових і магнітних систем, фізики м'якої речовини і біофізичних систем. Завдяки цьому, здобувачі мають можливість отримувати глибокі знання про процеси і явища, що виникають в таких системах, та оволодівають теоретичними методами їх досліджень. Реалізація програми спирається на наукові традиції Львівської школи статистичної фізики та передбачає використання сучасної обчислювальної інфраструктури Інституту для виконання досліджень, результати яких відповідають актуальним запитам світової науки.

Широка освітньо-наукова програма включає в себе підготовку здобувачів шляхом поєднання обов'язкових і вибіркового освітніх компонентів, що забезпечує відповідність навчального плану тематиці дисертаційних досліджень. Програма реалізується із залученням науково-педагогічних працівників і дослідників, які мають значний досвід фундаментальних досліджень та участі в міжнародних наукових проєктах.

У структурі програми передбачено формування дослідницьких, аналітичних, комунікаційних і організаційних компетентностей, необхідних для провадження наукової та науково-педагогічної діяльності. Особливу увагу приділено опануванню сучасних методів статистичної фізики конденсованого стану, високопродуктивних обчислень і машинного навчання, а також розвитку академічних навичок, пов'язаних із підготовкою наукових публікацій і представленням результатів досліджень.

Освітньо-наукова програма сприяє академічній мобільності здобувачів та реалізацію спільних освітніх і наукових ініціатив із закордонними установами, у тому числі в рамках програм подвійного здобуття ступеня доктора філософії. Результати реалізації програми у попередні роки підтверджують її відповідність вимогам третього рівня вищої освіти та спроможність забезпечувати якісну підготовку здобувачів до подальшої професійної діяльності у науковій, освітній та суміжних сферах.

І. ОСВІТНЯ СКЛАДОВА ОСВІТНЬО-НАУКОВОЇ ПРОГРАМИ

1. Профіль програми доктора філософії з галузі знань 10 *Природничі науки* за спеціальністю 104 *Фізика та астрономія*

1 – Загальна інформація	
Повна назва закладу вищої освіти та структурного підрозділу	Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України
Повна назва кваліфікації мовою оригіналу	Доктор філософії зі спеціальності «Фізика та астрономія» Doctor of Philosophy in Natural Sciences on Physics and Astronomy
Офіційна назва освітньо-наукової програми	Освітньо-наукова програма третього рівня вищої освіти Інституту фізики конденсованих систем НАН України
Тип диплому та обсяг освітньої програми	Диплом доктора філософії (PhD); 49 кредитів ЄКТС; термін навчання 4 роки; очна (денна) форма навчання
Наявність акредитації	Національне агентство із забезпечення якості вищої освіти Сертифікат про акредитацію освітньої програми Освітньо-наукова програма «Освітньо-наукова програма третього рівня вищої освіти Інституту фізики конденсованих систем НАН України» третій (освітньо-науковий) рівень вищої освіти 10 Природничі науки 104 Фізика та астрономія Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України Дата видачі сертифіката про акредитацію освітньої програми 21.05.2021 № 1496. Строк дії сертифіката про акредитацію освітньої програми 01.07.2026 Рішення НА від 18.05.2021, протокол № 8 (51).
Цикл/рівень	НРК України – 8 рівень, FQ-EHEA – третій цикл, EQF-LLL – 8 рівень
Передумови	Наявність освітнього ступеня магістра або освітньо-кваліфікаційного рівня спеціаліста
Мова(и) викладання	українська, англійська (частково)
Термін дії	до наступного планового оновлення, не перевищуючи період акредитації
Інтернет-адреса постійного розміщення опису освітньої програми	https://icmp.lviv.ua/content/аспірантура
Основні поняття та їх визначення	В освітньо-науковій програмі використано основні поняття та їх визначення відповідно до Закону України «Про вищу освіту» від 01.07.2014 р. № 1556-VII зі змінами та доповненнями, Закону України «Про наукову і науково-технічну діяльність» від 26.11.2015 р. № 848-VIII зі змінами та доповненнями, Порядку підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії та доктора наук у вищих навчальних закладах (наукових установах), затвердженого Постановою Кабінету Міністрів від 23.03.2016 р. № 261 зі змінами та доповненнями.
2 – Мета освітньо-наукової програми	
	Поглибити теоретичні знання та практичні уміння і навички у галузі природничих наук за спеціальністю фізика та астрономія, розвинути філософські та мовні компетентності, сформувати універсальні навички дослідника, достатні для проведення та успішного завершення наукового дослідження і подальшої професійної і наукової діяльності.
3 - Характеристика освітньо-наукової програми	
Предметна область (галузь знань, спеціальність)	Галузь знань 10 <i>Природничі науки</i> Спеціальність 104 <i>Фізика та астрономія</i> <i>Об'єкти дослідження:</i> структурні, динамічні та термодинамічні властивості конденсованих систем у класичному та квантовому описі, зокрема твердих тіл, рідин, м'якої речовини та біофізичних систем, а також фазові переходи та нерівноважні явища, колективна динаміка та інші фізичні і фізико-хімічні властивості на різних рівнях деталізації. <i>Цілі навчання:</i> набуття здатності здійснювати фундаментальні та прикладні наукові дослідження у галузі фізики конденсованого стану, класичних і квантових систем з використанням методів теоретичної фізики, в тому числі за допомогою статистичної фізики і комп'ютерного моделювання; продукувати нові наукові знання, застосовувати їх для розв'язання актуальних міждисциплінарних задач науки і техніки, а також здійснювати науково-педагогічну діяльність у галузі фізики.

	<p><i>Теоретичний зміст предметної області:</i> фундаментальні поняття, принципи та концепції теоретичної фізики, зокрема класичної та квантової механіки, статистичної фізики, фізики конденсованого стану, теорії фазових переходів і критичних явищ, теорії багаточастинкових та складних систем.</p> <p><i>Методи, методика та технології:</i> методи теоретичної фізики, аналітичні і чисельні методи дослідження класичних і квантових систем, методи комп'ютерного моделювання (зокрема молекулярна динаміка, Монте-Карло, мезоскопічні та першопринципні методи).</p> <p><i>Інструменти та обладнання:</i> сучасні обчислювальні засоби, включно з високопродуктивними обчислювальними системами, спеціалізоване програмне забезпечення для теоретичного аналізу і комп'ютерного моделювання фізичних систем.</p>
Орієнтація освітньо-наукової програми	Освітньо-наукова програма ґрунтується на фундаментальних розділах сучасної фізики та результатах сучасних наукових досліджень у сфері теоретичної фізики, фізики конденсованого стану та м'якої речовини. Програма спрямована на набуття необхідних дослідницьких навиків для наукової кар'єри, викладання спеціальних дисциплін в області фізики та фізичної хімії, розроблення нових програмних продуктів для комп'ютерного моделювання фізико-хімічних процесів і забезпечує підґрунтя для проведення самостійних наукових досліджень та подальшого зростання в науковій кар'єрі.
Основний фокус освітньо-наукової програми	Освітньо-наукова програма орієнтована на підготовку здобувачів третього рівня вищої освіти за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» галузі знань 10 «Природничі науки» та спрямована на формування глибоких фундаментальних і професійних компетентностей у сфері сучасної фізики. Програма створює умови для ґрунтовного опанування теоретичних основ фізики конденсованого стану, розвитку дослідницьких умінь і навичок, необхідних для самостійного проведення наукових досліджень, розв'язання складних міждисциплінарних задач та генерування нових наукових результатів. Особлива увага приділяється розвитку аналітичного і критичного мислення, здатності до концептуального узагальнення, переосмислення існуючих наукових підходів і формування нових цілісних моделей фізичних явищ, а також набуттю практичних і організаційних компетентностей, необхідних для здійснення науково-педагогічної діяльності та викладання фізичних і суміжних дисциплін у закладах вищої освіти. <i>Ключові слова:</i> теоретична фізика, статистична фізика, квантова механіка, фізика конденсованого стану, класичні та квантові багаточастинкові системи, фізика м'якої речовини, фазові переходи, нерівноважні процеси, комп'ютерне моделювання фізичних процесів та біофізичних систем.
Особливості програми	Освітньо-наукова програма охоплює широке коло сучасних напрямків теоретичної фізики і методів комп'ютерного моделювання у фізиці та фізичній хімії, що формує актуалізовану теоретико-прикладну базу для проведення наукових досліджень. Велика увага приділяється навчанню методам комп'ютерного моделювання фізичних систем та розрахункам на високопродуктивних системах, що, на сьогоднішній час, є важливою частиною теоретичних досліджень. В ІФКС ім. І.Р. Юхновського функціонує сучасний, водночас один з найпотужніших обчислювальних кластерів в Україні, на якому здобувачі набувають необхідного для цього досвіду та отримують результати для своїх дисертаційних робіт. Аспіранти активно залучаються до міжнародної академічної та наукової співпраці в рамках спільних дослідницьких проєктів із закордонними партнерами, а також у рамках договорів про реалізацію програм подвійного керівництва і спільної підготовки доктора філософії. В рамках реалізації програми створюються умови для стимулювання публікаційної активності здобувачів освітньо-наукового третього рівня вищої освіти у міжнародних англійськомовних наукових виданнях, індексованих у наукометричних базах даних Scopus і Web of Science.
4 – Придатність випускників освітньої програми до працевлаштування та подальшого навчання	
Придатність до працевлаштування	Робочі місця у державних та приватних вищих навчальних закладах, наукових і науково-дослідних установах на посадах викладачів та дослідників, на підприємствах і в організаціях різних видів діяльності та форм власності на керівних посадах.

Подальше навчання	Виконання наукової програми четвертого (наукового) рівня вищої освіти для здобуття ступеня вищої освіти доктор наук.
5 – Викладання та оцінювання	
Викладання та навчання	Поєднання лекційних, лабораторних та практичних занять, педагогічного практикуму, консультування наукового керівника та спілкування з науково-педагогічною спільнотою із самостійною науково-навчальною роботою.
Оцінювання	Екзамени, заліки, поточний контроль.
6 – Програмні компетентності	
Інтегральна компетентність (ІНТ)	ІК. Здатність продукувати інноваційні наукові ідеї, оволодіти методологією наукової та педагогічної діяльності, вирішувати комплексні проблеми в процесі інноваційно-дослідницької та професійної діяльності, проводити оригінальні наукові дослідження на національному та світовому рівні.
Загальні компетентності (ЗК)	ЗК1. Глибинні знання сучасних методів проведення досліджень у галузі фізики і астрономії та суміжних галузях; ЗК2. Критичний аналіз, оцінка і генерування нових ідей; ЗК3. Уміння ефективно спілкуватися з інтернаціональною науковою спільнотою та громадськістю з актуальних питань фізики і астрономії; ЗК4. Здатність саморозвиватися і самовдосконалюватися протягом життя, компетентність навчати студентів бакалаврського освітнього рівня на практичних та лабораторних роботах; ЗК5. Уміння використовувати комп'ютерне моделювання для аналізу та верифікації нових наукових проблем; ЗК6. Здатність пропонувати та виконувати оригінальні дослідницько-інноваційні проекти; ЗК7. Лідерство та здатність як автономної, так і командної роботи під час реалізації проектів.
Спеціальні (фахові) компетентності (ФК)	ФК1. Знання про сучасні тенденції розвитку і найбільш важливі нові наукові досягнення в області фізики і астрономії, а також суміжних областях; ФК2. Систематичні знання і розуміння сучасних наукових теорій і методів, та вміння їх ефективно застосовувати для аналізу проблем та задач фізики і фізичної хімії; ФК3. Здатність ефективно застосовувати методи аналізу, математичне моделювання, виконувати фізичні та комп'ютерні експерименти при проведенні наукових досліджень; ФК4. Здатність інтегрувати знання з інших дисциплін, застосовувати системний підхід та враховувати нетехнічні аспекти при розв'язанні наукових задач та проведенні досліджень; ФК5. Здатність розробляти та реалізовувати проекти, включаючи власні дослідження, які дають можливість переосмислювати наявні чи створювати нові знання; ФК6. Здатність аргументувати вибір методу розв'язування спеціалізованої задачі, критично оцінювати отримані результати та захищати прийняті рішення.
7 – Програмні результати навчання	
Знання (ЗН)	ЗН1. Здатність продемонструвати систематичні знання сучасних методів проведення досліджень в області фізики і астрономії; ЗН2. Здатність продемонструвати поглиблені знання у вибраній області наукових досліджень; ЗН3. Здатність продемонструвати розуміння впливу технічних рішень в суспільному, економічному і соціальному контексті.

Уміння (УМ)	<p>УМ1. Здійснювати пошук, аналізувати і критично оцінювати інформацію з різних джерел;</p> <p>УМ2. Застосовувати знання і розуміння для розв'язування задач синтезу та аналізу елементів та систем, характерних обраній області наукових досліджень;</p> <p>УМ3. Досліджувати і моделювати явища та процеси різної складності при вирішенні задач фізики та астрономії;</p> <p>УМ4. Застосовувати системний підхід, інтегруючи знання з інших дисциплін та враховуючи нетехнічні аспекти, під час розв'язання теоретичних та прикладних задач обраної області наукових досліджень;</p> <p>УМ5. Поєднувати теорію і моделювання, а також приймати рішення та виробляти стратегію розв'язання науково-прикладних задач з урахуванням загальнолюдських цінностей, суспільних, державних та виробничих інтересів;</p> <p>УМ6. Ефективно працювати як індивідуально, так і у складі команди;</p> <p>УМ7. Самостійно виконувати експериментальні дослідження та застосовувати дослідницькі навички;</p> <p>УМ8. Оцінювати доцільність та можливість застосування нових методів і теоретичних підходів у задачах фізики і астрономії;</p> <p>УМ9. Аргументувати вибір методів розв'язування науково-прикладної задачі, критично оцінювати отримані результати та захищати прийняті рішення.</p>
Комунікація (КОМ)	<p>КОМ1. Уміння ефективно спілкуватись на професійному та соціальному рівнях;</p> <p>КОМ2. Уміння представляти та обговорювати отримані результати та здійснювати трансфер набутих знань.</p>
Автономія і відповідальність (АіВ)	<p>АіВ1. Здатність самостійно проводити наукові дослідження та приймати рішення;</p> <p>АіВ2. Здатність усвідомлювати необхідність навчання впродовж усього життя з метою поглиблення набутих та здобуття нових фахових знань;</p> <p>АіВ3. Здатність відповідально ставитись до виконуваної роботи та досягати поставленої мети з дотриманням вимог професійної етики.</p>
8 – Ресурсне забезпечення реалізації освітньої програми	
Специфічні характеристики кадрового забезпечення	100% науково-педагогічних працівників, задіяних до викладання циклу дисциплін, що забезпечують спеціальні (фахові) компетентності аспіранта, мають наукові ступені та вчені звання (як правило – доктори наук).
Специфічні характеристики матеріально-технічного забезпечення	Використання сучасного обладнання для наукових досліджень та розрахунків, зокрема обчислювального кластера МЦКМ, що функціонує в ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, і є одним із найпотужніших в Україні. Комп'ютерний клас на 10+1 робочих місць з проектором та мультимедійним екраном.
Специфічні характеристики інформаційно-методичного забезпечення	Використання електронної бібліотеки ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України та програмних продуктів працівників ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України.
9 – Академічна мобільність	
Національна кредитна мобільність	На основі двосторонніх договорів між ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України та університетами і академічними установами України.
Міжнародна кредитна мобільність	На основі двосторонніх договорів між ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України та навчальними закладами країн-партнерів.
Міжнародна дослідницька мобільність	В рамках міжнародних дослідницьких проєктів, в яких бере участь ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України.
Навчання іноземних здобувачів вищої освіти	Можливе.

2. Розподіл змісту освітньої складової освітньо-наукової програми за групами компонентів та циклами підготовки

№ з/п	Цикли підготовки	Обсяг навчального навантаження аспіранта (кредитів / %)		
		Обов'язкові компоненти освітньої складової	Вибіркові компоненти освітньої складової	Всього за весь термін навчання
1.	Цикл дисциплін, що формують загальнонаукові компетентності та універсальні навички дослідника	14	3	17
2.	Цикл дисциплін, що формують фахові компетентності	23	9	32
Всього за весь термін навчання		37/75,5	12/24,5	49/100

3.Перелік компонентів освітньої складової освітньо-наукової програми

Код н/д	Компоненти освітньої складової	Кількість кредитів	Форма підсумк. контролю
1	2	3	4
1. Обов'язкові компоненти освітньої складової			
<i>1.1.Цикл дисциплін, що формують загальнонаукові компетентності та універсальні навички дослідника</i>			
ОК1.1.	Філософія науки та культури	6	Екзамен
ОК1.2.	Іноземна мова професійного спрямування	8	Екзамен
Всього за цикл:		14	
<i>1.3.Цикл дисциплін, що формують фахові компетентності</i>			
ОК2.1.	Нерівноважна статистична фізика і фізична кінетика	5	Екзамен
ОК2.2.	Фізика конденсованого стану і сильно-скорельованих систем	5	Екзамен
ОК2.3.	Фізика м'якої речовини	5	Екзамен
ОК2.4.	Комп'ютерне моделювання фізичних процесів	5	Екзамен
ОК2.5.	Методика викладання фізики	3	Екзамен
Всього за цикл:		23	
2. Вибіркові компоненти освітньої складової*			
<i>2.1.Цикл дисциплін, що формують загальнонаукові компетентності та універсальні навички дослідника</i>			
ВБ1.1	Сучасні тенденції розвитку фізичних досліджень	3	диф. залік
ВБ1.2	Управління науковими проектами	3	диф. залік
ВБ1.3	Методика написання та оформлення наукових статей	3	недиф. залік
ВБ1.4	Комп'ютерна мова LaTeX для наукових публікацій	3	недиф. залік
Всього за цикл (за вибором здобувача не менше однієї дисципліни):		3	
<i>2.2.Цикл дисциплін, що формують фахові компетентності</i>			
ВБ2.1	Спеціальні розділи статистичної фізики	3	Екзамен
ВБ2.2	Теорія магнітних систем	3	Екзамен
ВБ2.3	Комп'ютерне моделювання біофізичних та біохімічних систем	3	Екзамен
ВБ2.4	Фазові переходи	3	Екзамен
ВБ2.5	Моделювання методами першопринципної молекулярної динаміки	3	Екзамен
ВБ2.6	Основи фізики рідкого стану	3	Екзамен
ВБ2.7	Молекулярний дизайн за допомогою машинного навчання	3	Екзамен
ВБ2.8	Засоби високопродуктивних обчислень та методи паралелізації	3	Екзамен
Всього за цикл (за вибором здобувача не менше трьох дисциплін):		9	
РАЗОМ		49	

Примітка:

* - аспірант має змогу обрати дисципліни з п. 1.2; п.2.2 (вибіркові), при цьому частка цих предметів повинна складати не менше як 24.5% загальної кількості кредитів ЄКТС.

**4. Матриця відповідності програмних компетентностей
навчальним компонентам**

	ОК1.1.	ОК1.2.	ОК2.1.	ОК2.2.	ОК2.3.	ОК2.4.	ОК2.5.	ВБ1.1.	ВБ1.2.	ВБ1.3.	ВБ1.4.	ВБ2.1.	ВБ2.2.	ВБ2.3.	ВБ2.4.	ВБ2.5.	ВБ2.6.	ВБ2.7.	ВБ2.8.
ІНТ	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
ЗК1	•			•	•	•			•										
ЗК2	•								•										
ЗК3		•						•	•	•	•								
ЗК4	•							•	•										
ЗК5	•	•						•											
ЗК6	•						•		•	•									
ЗК7	•						•			•									
ФК1			•	•	•	•								•		•	•	•	•
ФК2			•		•	•							•	•	•	•	•	•	•
ФК3					•	•						•			•				
ФК4				•	•	•						•	•		•				
ФК5			•	•	•								•	•		•	•	•	•
ФК6	•			•	•	•						•	•		•				

Умовні позначення: ОКі – обов’язкова дисципліна, ВБі – вибіркова дисципліна, і – номер дисципліни у переліку компонент освітньої складової, ІНТ – інтегральна компетентність, ЗКj – загальна компетентність, ФКj – фахова (спеціальна) компетентність, j – номер компетентності у переліку компетентностей освітньої складової.

**5. Матриця забезпечення програмних результатів навчання
відповідними компонентами освітньої складової**

	ОК1.1.	ОК1.2.	ОК2.1.	ОК2.2.	ОК2.3.	ОК2.4.	ОК2.5.	ВБ1.1	ВБ1.2.	ВБ1.3.	ВБ1.4.	ВБ2.1.	ВБ2.2.	ВБ2.3.	ВБ2.4.	ВБ2.5.	ВБ2.6.	ВБ2.7.	ВБ2.8.
ЗН1	•		•	•	•	•								•		•	•	•	•
ЗН2		•	•	•	•	•			•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
ЗН3	•						•		•	•									
УМ1	•	•		•	•	•			•			•	•		•				
УМ2			•	•	•	•						•	•	•	•	•	•	•	•
УМ3			•	•	•	•						•	•	•	•	•	•	•	•
УМ4	•		•	•	•	•	•		•			•	•	•	•	•	•	•	•
УМ5	•	•	•	•	•	•	•		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
УМ6	•						•	•	•										
УМ7	•		•		•	•						•	•	•	•	•	•	•	•
УМ8			•	•	•	•						•	•	•	•	•	•	•	•
УМ9	•	•		•	•	•			•	•		•	•		•				
КОМ1	•						•	•	•										
КОМ2	•	•		•	•	•		•	•	•	•	•	•		•				
АіВ1			•	•	•	•						•	•	•	•	•	•	•	•
АіВ2	•						•	•	•										
АіВ3	•	•	•	•	•	•	•					•	•	•	•	•	•	•	•

Умовні позначення: ОКі – обов’язкова дисципліна, ВБі – вибіркова дисципліна, і – номер дисципліни у переліку компонент освітньої складової, ЗН_т – програмні результати (знання), УМ_т – програмні результати (уміння), т – номер програмного результату у переліку програмних результатів освітньої складової.

6. Анотації дисциплін

1. ОBOB'ЯЗKOBІ ДИСЦИПЛІНИ

OK1.1. “Філософія науки та культури”

Курс викладається на кафедрі філософії при Західному науковому центрі НАН України та МОН України

Мета: оволодіння загальнонауковими (філософськими) компетентностями, спрямованими на формування системного наукового світогляду, професійної етики та загального культурного кругозору.

Предмет: світоглядне, духовно-практичне, морально-етичне й теоретичне відношення людини до реальності та головні інтелектуальні чинники її перетворення й суб'єктивного преображення особи.

Зміст курсу:

- Виникнення філософії та її актуальність: світогляд, філософія, метафізика і наука.
- Глобальні виклики перед розумом і філософією.
- Метафізика та онтологія в аспекті некласичної філософії
- Природа знання, джерела його істинності та межі наукового пізнання.
- Проблематика розуму і свідомості та її осягнення у феноменології й герменевтиці.
- Філософія «втіленого розуму» в аспекті розвитку когнітивістики.
- Класична, некласична й посткласична моделі розвитку науки.
- Філософська антропологія і проблема людини.
- Соціальна філософія та філософія історії й культури.
- Ситуація постмодернізму в сучасній філософії та її семіотичне обумовленість.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на першому році навчання.

OK1.2. “Іноземна мова професійного спрямування”

Курс викладається на кафедрі іноземних мов при Західному науковому центрі НАН України та МОН України

Мета: розвиток мовленнєвих компетентностей, які відповідають рівню досвідченого користувача іноземної мови С1, а саме, формування навичок і вмінь, які забезпечують необхідне для науковця вільне розуміння усних і письмових наукових текстів, а також вільне та ефективно висловлення і спілкування як на науково-академічні теми, так і на загальні / повсякденні теми в усній та письмовій формах.

Предмет: граматичні, стилістичні та дискурсивні аспекти іноземної мови науково-професійного спрямування.

Зміст курсу:

- Літературна мова та науковий дискурс: спільне і відмінне
- Лінгвокультурні характеристики наукових дискурсів української, англійської, німецької та французької мов. Поняття “інтелектуального стилю.”
- Переклад фахових текстів. Перекладацька еквівалентність та перекладацькі трансформації. Редагування наукових перекладів.
- Особливості жанрів сучасного наукового дискурсу.
- Шляхи до ефективного розуміння прочитаного. Глибинне розуміння тексту: підтекст та імплікації.

- Писемний науковий дискурс: жанри, структура, аргументація, риторика, етикет.
- Редагування наукових текстів.
- Аудіювання та говоріння: два боки однієї медалі. Специфіка монологічного та діалогічного мовлення, усного наукового та повсякденного спілкування.
- Публічні промови та наукові доповіді на конференціях: ключі до успіху.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на першому році навчання.

OK2.1. “Нерівноважна статистична фізика і фізична кінетика”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: опанувати сучасні методи нерівноважної статистичної фізики систем взаємодіючих частинок: метод ланцюжка рівнянь Б-Б-Г-К-І, метод нерівноважного статистичного оператора Зубарева, метод проєкційних операторів Морі, метод моментів Клімонтовича.

Предмет: теоретичні та практичні аспекти методів нерівноважної статистичної фізики в застосуваннях до конденсованих систем.

Зміст курсу:

- Метод нерівноважного статистичного оператора Зубарева.
- Рівняння Ліувілля для нерівноважної функції розподілу системи взаємодіючих частинок.
- Основні закони збереження. Принцип максимуму ентропії.
- Метод рівнянь ланцюжка ББГКІ.
- Кореляційні функції та групові розклади.
- Кінетичні рівняння Больцмана, Фоккера-Планка.
- Метод моментів Клімонтовича.
- Сучасні методи опису стохастичних процесів.
- Рівняння Смолуховського-Фоккера-Планка.
- Ланжевенівський підхід.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на першому або другому році навчання.

OK2.2. “Фізика конденсованого стану і сильно-скорельованих систем”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: дати аспірантам основи фундаментальних знань з квантової статистичної фізики та квантової теорії багаточастинкових систем, ознайомити з основними принципами теоретичного опису квантових багаточастинкових систем, дати приклади використання цих знань у сучасному матеріалознавстві і нанотехнологіях.

Предмет: теоретичні та практичні аспекти методів теорії конденсованого стану та сильно-скорельованих електронних систем.

Зміст курсу:

- Основи квантової статистики.
- Представлення чисел заповнення.
- Еволюція квантових багаточастинкових систем.
- Двочасові (зубарівські) функції Гріна.

- Термодинамічна теорія збурень.
- Фізичні величини у зображенні вторинного квантування.
- Класичні та квантові спінові системи.
- Сильноскорельовані електронні системи.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на першому або другому році навчання.

ОК2.3. “Фізика м’якої речовини”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: викласти основні поняття та методи фізики м’якої речовини. При цьому передбачається, що глибоке засвоєння основних понять та методів фізики м’якої речовини дозволить покращити процес оволодіння іншими теоретичними та спеціальними дисциплінами, зокрема методами комп’ютерного моделювання конденсованих систем, які широко використовується в сучасній статистичній фізиці.

Предмет: теоретичні та практичні аспекти фізики м’якої речовини.

Зміст курсу:

- Поняття про м’яку речовину.
- Прості та полярні розчинники.
- Розчини електролітів.
- Полімери.
- Підхід де Жена до фізики полімерів. Скейлінгові співвідношення.
- Рідкокристалічні системи.
- Фазові перетворення в рідких кристалах.
- Теорія Онзагера рідкокристалічного стану. Теорія Майера-Заупе.
- Біологічні системи. Утворення та самоорганізація макромолекул.
- Застосування методів статистичної фізики до опису біологічних систем.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на першому або другому році навчання.

ОК2.4. “Комп’ютерне моделювання фізичних процесів”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: освоїти основні принципи комп’ютерного моделювання фізичних процесів на різних рівнях деталізації. Опанувати принципи таких методів як: молекулярна динаміка, Монте-Карло, броунівська та дисипативна динаміка та методу коміркового автомату. Познайомитись із практичними застосуваннями цих підходів у таких областях як: розробка нових функціональних наноматеріалів, біофізика та медицина. Навчитись виконувати комп’ютерне моделювання фізичних систем на класичних прикладах моделі Ізінга, леннард-джонсівської рідини та процесах, що описуються комірковими автоматами.

Предмет: методи комп’ютерного моделювання та їх застосування для досліджень структури і динаміки конденсованих систем та м’якої речовини.

Зміст курсу:

- Особливості поведінки систем багатьох частинок на різних просторово-часових масштабах.
- Основні типи міжчастинкових взаємодій.
- Метод молекулярної динаміки.
- Молекулярна динаміка в різних термодинамічних ансамблях.
- Застосування до моделювання властивостей рідких кристалів, рідкокристалічних полімерів та оптично-активних полімерів.
- Метод Монте Карло.
- Алгоритми Метрополіса та Глаубера.
- Застосування методу Монте-Карло до моделювання рідин, полімерів та макромолекул.
- Спеціалізовані алгоритми Монте-Карло.
- Мезоскопічні методи.
- Броунівська та ланжевенівська динаміки.
- Дисипативна динаміка.
- Метод коміркового автомату.
- Переваги та недоліки мезоскопічного моделювання.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на першому або другому році навчання.

ОК2.5. “Методика викладання фізики”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: Метою дисципліни є формування у здобувачів ступеня доктора філософії системних знань з теорії та методики викладання фізики у закладах вищої освіти, а також розвиток професійних педагогічних умінь і навичок, необхідних для ефективної навчальної та науково-методичної діяльності.

Предмет: Предметом дисципліни є теоретичні та практичні засади методики викладання фізики у вищій школі, зокрема принципи, методи, форми та технології організації освітнього процесу під час викладання фізичних дисциплін..

Зміст курсу:

Зміст дисципліни охоплює вивчення методики викладання фізики як наукової галузі, основ дидактики вищої школи, організаційних форм і методів навчання, принципів і засобів навчального процесу, а також особливостей застосування сучасних методик під час викладання фундаментальних розділів фізики (механіки, електродинаміки, квантової механіки, термодинаміки та статистичної фізики). Значну увагу приділено формуванню навичок аналізу та вдосконалення освітнього процесу, організації навчальної і науково-дослідної роботи студентів.

Місце дисципліни в структурі курсу: Дисципліна належить до циклу професійної підготовки освітньо-наукової програми третього рівня вищої освіти та спрямована на формування педагогічної компетентності здобувачів, необхідної для здійснення викладацької діяльності у закладах вищої освіти. Курс забезпечує інтеграцію фахових знань з фізики з сучасними педагогічними підходами та методами навчання і є теоретичною та методичною основою для педагогічної практики та подальшої науково-педагогічної діяльності.

2. ДИСЦИПЛІНИ НА ВИБІР

ВБ1.1. “Сучасні тенденції розвитку фізичних досліджень”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: ознайомлення здобувачів вищої освіти рівня доктора філософії з фізичними основами механізмів та процесів, які лежать в основі новітніх технологій з використанням молекулярних масштабів.

Предмет: міждисциплінарні підходи і методи що охоплюють собою різні розділи фізики, хімії і біології, які за останні роки розвинулися в новий і окремий науковий напрям, що описує явища і процеси в молекулярному режимі – молекулярну інженерію.

Зміст курсу:

- Особливості та сучасний стан фізичних досліджень в молекулярній інженерії.
- Молекулярна інженерія поверхонь, міжповерхневих та приповерхневих областей.
- Квантова та клітинна інженерія.
- Білкова інженерія; транспортування та доставка ліків.
- Молекулярна теорія явищ переносу.
- Взаємозв'язок, що виникає між імпульсом, масою та процесами перенесення енергії.
- Молекулярна інженерія та проблеми коронавірусної інфекції.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на третьому році навчання.

ВБ1.2. “Управління науковими проектами”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: ознайомлення докторантів з основами сучасного наукового маркетингу, оволодіння інструментарієм пошуку наукових грантів, конкурсних програм та проєктів; оформлення конкурсних заявок та запитів; написання проміжних та заключних наукових звітів, підготовка звітної документації. А також ознайомлення з сучасними методами управління проєктами (Agile, Scrum).

Предмет: джерела розміщення інформації про наукові гранти та конкурси, спеціальні інформаційні сервіси; основні характерні особливості сучасного наукового маркетингу; конкурсні заявки чи запити на фінансування; оформлення звітної документації за результатами виконання проєкту.

Зміст курсу:

- Пошук джерел інформації щодо конкурсів наукових проєктів та грантів на фінансування наукових досліджень.
- Конкурсна тематика НАН України, МОН України, Національного фонду досліджень.
- Підготовка, оформлення та подання конкурсних запитів.
- Формування технічного завдання та календарного плану.
- Приклади оформлення запитів в Рамкових програмах ЄС.
- Управління процесом виконання проєкту.
- Ознайомлення з базовими поняттями Agile та Scrum.

- Оформлення звітної документації та наукових звітів за результатами виконання проекту.
- Звітна документація в системах НАН України та МОН України.
- Основи захисту права інтелектуальної власності.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на третьому році навчання.

ВБ1.3. “Методика написання та оформлення наукових статей”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: ознайомитися з сучасними методами наукової комунікації та оприлюднення наукового результату, зокрема – опанувати методіку написання та оформлення його у вигляді статті. Розуміння того, яку роль відіграють способи подачі інформації та засоби її виділення серед подібної для позиціонування вченого у глобальному інформаційному просторі, дає змогу обирати ефективний шлях для оприлюднення власних результатів та збільшення видимості як індивідуального профіля дослідника, так і профіля установи. Особлива увага приділяється темі академічної доброчесності та униканню навіть випадкових порушень її принципів у процесі підготовки матеріалу.

Предмет: особливості загальноприйнятої структури наукової статті та правила її оформлення; метадані наукової публікації; основні наукометричні та інші спеціальні інформаційні сервіси; основні принципи академічної етики.

Зміст курсу:

- Наукова комунікація та методи кількісного аналізу наукової ефективності.
- Стаття у науковому періодичному виданні.
- Сучасні інструменти наукового пошуку та поширення інформації.
- Методологія оприлюднення наукових даних згідно із принципами відкритої науки.
- Типи ОА (Open Access) публікацій.
- Підготовка препринтів.
- Підготовка та оформлення наукової статті.
- Основні компоненти публікацій та технічні вимоги до їх оформлення.
- Оформлення покликів.
- Принципи академічної етики та їх дотримання в процесі підготовки публікацій.
- Плагіат та його види.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на третьому році навчання.

ВБ1.4. “Комп’ютерна мова LaTeX для наукових публікацій”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: вивчити сучасні спеціалізовані комп’ютерні засоби представлення наукових результатів (LaTeX, GNUPlot та суміжне програмне забезпечення). Практичне застосування згаданих засобів дозволить молодим науковцям з легкістю готувати весь спектр наукових публікацій (препринти, статті в міжнародних реферованих журналах, усні доповіді на семінарах та конференціях, постери для конференцій) з найвищою

якістю, високою сумісністю створених робіт і в ногу з часом, а також привчатиме їх до структурування й методичності власної наукової роботи.

Предмет: основи системи LaTeX для створення наукових документів; програма GNUPlot для побудови малюнків з отриманих числових даних; основні формати векторних та растрових цифрових зображень; робота з бібліографією та створення в LaTeX списку бібліографічних покликів для публікації; стильовики та шаблони для препринта і журнальної статті; створення презентації різних типів: для виступу на семінарі, і для конференції.

Зміст курсу:

- Основи роботи з видавничою системою LaTeX.
- Основи LaTeX'у: структура документа, команди, оточення, малюнки, таблиці, поклики, покажчики.
- Розширені можливості видавничої системи LaTeX.
- Робота з бібліографією: створення бази покликів у JabRef; BibTeX, Biber і бібліографічні стилі.
- Розмаїті варіанти оформлення наукових результатів.
- Постер і презентація.
- Візуалізація отриманих даних за допомогою програми GNUPlot.
- Особливості побудови тривимірних графіків.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на третьому році навчання.

ВБ2.1. “Спеціальні розділи статистичної фізики”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: загальний вступ до теорії критичних явищ та теорії складних систем, огляд методів та кола понять, якими вони оперують. Класичне означення критичних явищ, як подій, що відбуваються в околі критичних точок термодинамічних фазових діаграм, сьогодні використовується в значно ширшому сенсі. Поняття далекосяжних кореляцій, масштабної інваріантності, скейлінгу, універсальності, якими оперує ця теорія, спричинили її застосування для опису як традиційних задач статистичної фізики (термодинамічні фазові переходи в магнетиках, сегнетоелектриках, плинах, рідких кристалах) так і геометричних впорядкувань (скейлінг полімерів чи перколяція структурно-невпорядкованих систем) чи так званих складних систем.

Предмет: основи теорії критичних явищ; основи теорії складних систем; основні методи цих теорій; феноменологічний термодинамічний підхід; методи точного розв'язку (трансфер матриця, перевал), теорії збурень (зокрема, асимптотичних оцінок); метод функціонального інтегрування; теорії середнього поля, ренормалізаційної групи, теорії складних мереж.

Зміст курсу:

- Особливості впорядкування в плинах, магнетиках, полімерах, рідких кристалах.
- Параметр порядку, фазова діаграма.
- Термодинаміка фазових переходів.
- Теорія фазових переходів Ландау.
- Критична поведінка в наближенні середнього поля.
- Теорія ван дер Ваальса переходу рідина-газ.
- Полімер в добром розчиннику: макроскопічні властивості полімерного розчину,

ідеальний полімерний ланцюг.

- Метод функціонального інтегрування.
- Перетворення Стратоновича-Габбарда та метод колективних змінних.
- Точні результати в теорії критичних явищ.
- Методи розкладів в ряд в теорії критичних явищ.
- Скейлінг і ренормалізаційна група.
- Екзотичні задачі статистичної фізики.
- Основні поняття теорії мереж. Теорія Ландау фазових переходів на мережах.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на другому році навчання.

ВБ2.2. “Теорія магнітних систем”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: загальний вступ до природи магнетизму і фізики магнітних систем, огляд методів та кола понять, якими оперують у цій ділянці фізики.

Предмет: Обмінна взаємодія як квантове явище; Квантова теорія моменту кількості руху і спіні, багатоелектронні хвильові функції; Спінові хвилі у феромагнетику; Одномагнітні і двомагнітні стани; Антиферомагнітні магніони; Магнетизм металів; Магнітна сприйнятливість; Розсіяння нейтронів; Мультифероїки; Статистична механіка магнітних систем.

Зміст курсу:

- Фермі статистика. Зонна теорія. Експерименти. Молекулярне поле Вайса.
- Модель Гайзенберга.
- Зонні (колективізовані) електрони при 0 К.
- Магнетизм і кристалічна структура.
- Зонні (колективізовані) електрони при скінчених температурах.
- Модель Габбарда.
- Взаємодія між зонними (колективізованими) і локалізованими електронами.
- Обмін і кореляції в металах.
- Спінові флуктуації.
- Статистична механіка спінових моделей.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на другому році навчання.

ВБ2.3. “Комп’ютерне моделювання біофізичних та біохімічних систем”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: вивчити основи методів комп’ютерних досліджень біологічних молекул таких як білки та нуклеїнові кислоти. Опанувати основні концепції цих методів, включаючи атомні силові поля, моделі сольватації, методи розрахунку вільної енергії. Отримати практичні навички з застосування сучасних розрахункових пакетів до біофізичних та біохімічних задач, що необхідні для успішних досліджень в багатьох нових напрямках сучасної науки, таких як нано- та біотехнології.

Предмет: опис білків та нуклеїнових кислот на атомарному рівні; основні силові поля для опису біологічних молекул; основні моделі сольватації; методи симуляцій в

розширених ансамблях; методи розрахунку вільної енергії; елементарні комп'ютерні розрахунки для білків та нуклеїнових кислот.

Зміст курсу:

- Вступ до опису білків та нуклеїнових кислот.
- Атомні силові поля для дослідження білків.
- Електростатичні взаємодії та моделі сольватації.
- Метод реакції поля та обрізання потенціалу.
- Рівняння Пуасона-Больцмана. Узагальнена модель Борна.
- Методи розрахунку вільної енергії.
- Термодинамічне інтегрування.
- Ансамбль Гібса. Метод співвідношення ймовірностей.
- Метод симуляцій “амбрела семлінг”.
- Моделювання методами пришвидченої динаміки.
- Мультиканонічний ансамбль. Метод паралельної термалізації.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на другому році навчання.

ВБ2.4. “Фазові переходи”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: вивчити основні статистичні та ренормгрупові методи розрахунку фізичних величин поблизу точок фазового переходу . Практичне застосування методів теорії середнього поля, колективних змінних, ренормалізаційної групи дозволить виконувати розрахунок таких характеристик, як теплоємність, сприйнятливість (стисливість), намагніченість (чи інший параметр порядку), тощо в околі точки фазового переходу першого чи другого роду, що необхідно для пояснення процесів у фізиці багатьох частинок, магнітних та рідинних системах, а також в багатьох інших важливих напрямках сучасної науки.

Предмет: математичні основи статистичних методів; методи врахування взаємодії у розрахунках; характерні наближення та феноменологічні підходи; методи розв'язання тривимірних модельних задач за допомогою відомих статистичних методів, оцінювання характерних параметрів порядку та оцінки фазової діаграми системи взаємодіючих частинок; методи опису фазових переходів до опису фізичних характеристик.

Зміст курсу:

- Основи класичної теорії фазових переходів.
- Асимптотична поведінка та термодинамічні співвідношення для фізичних систем поблизу точки фазового переходу.
- Фазові переходи та пов'язані з ними критичні явища.
- Метод молекулярного поля в теорії магнітних фазових переходів.
- Метод молекулярного поля в теорії флюїдних фазових переходів.
- Метод колективних змінних до опису фазових переходів.
- Спосіб розрахунку статсуми в методі Юхновського.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на другому році навчання.

ВБ2.5. “Моделювання методами першопринципної молекулярної динаміки”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: опанувати теоретичні та практичні основи методики розрахунків електронної структури твердих тіл та неупорядкованих систем. Практичне застосування методів в рамках функціоналу густини дозволить моделювати електронні процеси на одно- та багатопроцесорних комп'ютерах на мікроскопічному рівні, що необхідно для пояснення процесів у нанofізичі та в багатьох інших важливих напрямках сучасної науки, таких як біотехнологія, біофізика, атмосферна фізика. Практичне застосування методів псевдопотенціалів, та першопринципного комп'ютерного моделювання в рамках функціоналу густини дозволить моделювати процеси утворення хімічного зв'язку, утворення рівноважних структур з перших принципів, електронні процеси переносу.

Предмет: відмінності та межі застосування методів квантового Монте-Карло та першопринципної молекулярної динаміки. основні алгоритми першопринципного моделювання; основні концептуальні підходи до застосовності функціоналу електронної густини та застосовності цього підходу в комп'ютерному моделюванні з перших принципів; комп'ютерні програми для обчислень електронних властивостей систем в різних агрегатних станах.

Зміст курсу:

- Формалізм функціоналу електронної густини.
- Рівняння Кона-Шема.
- Ефективні електрон-іонні взаємодії для першопринципної динаміки.
- Генерування зберігаючих норму псевдопотенціалів.
- Ультрам'які псевдопотенціали Вандербільта.
- PAW-потенціали.
- Першопринципне моделювання молекулярної динаміки.
- Метод Кар-Парріелло.
- Молекулярна динаміка методом мінімізації енергії на поверхні Борна-Опенгеймера.
- Розрахунок властивостей систем з першопринципного моделювання молекулярної динаміки.
- Використання функцій Ваньє для розрахунку поляризованості в першопринципній динаміці.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на другому році навчання.

ВБ2.6. “Основи фізики рідкого стану”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: опанувати основні поняття та методи фізики рідкого стану. При цьому передбачається, що глибоке засвоєння основних понять та методів фізики рідкого стану дозволить покращити процес оволодіння іншими теоретичними та спеціальними дисциплінами, зокрема методами комп'ютерного моделювання конденсованих систем, які широко використовується в сучасній статистичній фізиці. Практичне застосування методів та окремих підходів фізики рідкого стану дозволить краще зрозуміти природу агрегатних станів на атомному рівні, що необхідно для

пояснення процесів у нанofізичі та в багатьох інших важливих напрямках науки, таких як сучасне матеріалознавство, біотехнологія, біofізика, атмосферна фізика.

Предмет: місце фізики рідкого стану у вивченні конденсованого стану речовини; основні методи статистико-механічного дослідження рідкого стану речовини; основні математичні моделі рідкого стану речовини; характерні наближення та емпіричні підходи та розуміти межі їх застосування; розрахунки для конкретних модельних систем.

Зміст курсу:

- Основи рівноважної термодинаміки і статистичної фізики.
- Структурний фактор та зв'язок з експериментами по розсіянню.
- Міжчастинкові взаємодії.
- Модельні дискретні та неперервні потенціали міжчастинкової взаємодії.
- Система твердих сфер.
- Емпіричні рівняння стану твердих сфер. Теорія Перкуса-Йевіка. Підхід Карнагана-Старлінга.
- Фазовий перехід газ-рідина.
- Групові розклади. Віріальне рівняння стану. Другий віріальний коефіцієнт.
- Термодинамічна теорія збурень Вертгайма.
- Метод класичної теорії функціоналу густини.
- Фазова рівновага газ-рідина. Критична точка.
- Основи термодинамічної теорії збурень.
- Метастабільні стани у плинні. Поняття нуклеації.

Місце дисципліни в структурі курсу: аспіранти вивчають на другому році навчання.

ВБ2.7. “Молекулярний дизайн за допомогою машинного навчання”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: формування у здобувачів ступеня доктора філософії теоретичних знань і практичних навичок застосування методів машинного навчання для комп'ютерного моделювання молекул, прогнозування їхніх властивостей та автоматизованого молекулярного дизайну з наперед заданими характеристиками.

Предмет: методи та моделі машинного навчання, що застосовуються для комп'ютерного подання, аналізу, прогнозування властивостей і генерації нових малих органічних молекул у задачах молекулярного дизайну.

Зміст курсу:

- Вступ до молекулярного дизайну та машинного навчання. Мета і завдання курсу. Застосування машинного навчання в молекулярному дизайні, матеріалознавстві та фармацевтичних дослідженнях. Основи молекулярної інформатики.
- Комп'ютерне подання молекул і хемінформатика. Способи подання молекулярних структур: SMILES, InChI, молекулярні графи. Канонічні подання, обробка дублікатів. Побудова молекулярних дескрипторів і відбитків. Використання сучасних хемінформатичних бібліотек.
- Машинне навчання для прогнозування властивостей молекул. Задачі регресії та класифікації. Побудова навчальних вибірок, валідація та оцінка якості моделей. Класичні методи машинного навчання та нейромережеві моделі для прогнозування фізико-хімічних і функціональних властивостей молекул.
- Генеративні моделі в молекулярному дизайні. Основи генеративного моделювання.

Генерація молекул на основі SMILES і графових представлень. Варіаційні автоенкодера, рекурентні нейронні мережі та інші підходи. Критерії якості згенерованих молекул: хімічна коректність, унікальність, новизна.

- Оптимізація молекул і навчання з підкріпленням. Методи оптимізації молекулярних структур із заданими властивостями. Основи навчання з підкріпленням. Використання алгоритмів пошуку та оптимізації (зокрема методів Монте-Карло) для цілеспрямованого молекулярного дизайну.

- Практична реалізація та робота з реальними даними. Реалізація алгоритмів машинного навчання та генеративного дизайну за допомогою Python. Робота з реальними молекулярними наборами даних. Аналіз результатів, інтерпретація моделей і оцінка їх придатності для наукових досліджень.

Місце дисципліни в структурі курсу: Дисципліна належить до циклу професійної та міждисциплінарної підготовки освітньо-наукової програми третього рівня вищої освіти. Вона забезпечує формування компетентностей у сфері застосування методів машинного навчання до задач молекулярного дизайну та доповнює фундаментальну підготовку з фізики, хімії та комп'ютерного моделювання, створюючи основу для виконання міждисциплінарних наукових досліджень, в тому числі в галузях матеріалознавства і біотехнології.

ВБ2.8. “Засоби високопродуктивних обчислень та методи паралелізації”

Курс викладається в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Мета: формування у здобувачів ступеня доктора філософії теоретичних знань і практичних навичок застосування методів паралельного програмування та сучасних апаратних і програмних засобів високопродуктивних обчислень у наукових дослідженнях.

Предмет: методи організації паралельних обчислень, архітектури паралельних обчислювальних систем та програмні засоби реалізації паралельних алгоритмів у середовищах високопродуктивних обчислень.

Зміст курсу:

- Вступ до високопродуктивних обчислень та паралельного програмування.
- Архітектури паралельних обчислювальних систем і комунікаційні середовища.
- Основні технології паралельного програмування (MPI, OpenMP, CUDA).
- Методи розпаралелювання та оптимізації паралельних алгоритмів.
- Аналіз продуктивності, ефективності та масштабованості паралельних програм.
- Застосування паралельних методів у чисельних і моделювальних задачах фізики та суміжних наук.

Місце дисципліни в структурі курсу: Дисципліна належить до циклу професійної підготовки освітньо-наукової програми третього рівня вищої освіти та забезпечує формування компетентностей у сфері використання високопродуктивних і паралельних обчислень. Курс є методичною та технологічною основою для виконання обчислювально-орієнтованих наукових досліджень.

II. Наукова складова освітньо-наукової програми

Наукова складова освітньо-наукової програми передбачає проведення аспірантом власного наукового дослідження під керівництвом одного або двох наукових керівників та оформлення його результатів у вигляді дисертації.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії є самостійним розгорнутим дослідженням, що пропонує розв'язання актуального науково-прикладного завдання за спеціальністю 104 *Фізика та астрономія*, результати якого характеризуються науковою новизною та практичною цінністю і оприлюднені у відповідних публікаціях.

Наукова складова освітньо-наукової програми оформляється у вигляді індивідуального плану наукової роботи аспіранта і є невід'ємною частиною навчального плану аспірантури.

Невід'ємною частиною наукової складової освітньо-наукової програми аспірантури є підготовка та публікація наукових статей, виступи на наукових конференціях, наукових фахових семінарах, робочих нарадах, симпозіумах.

Тематики наукових досліджень за спеціальністю 104 *Фізика та астрономія*:

1. Теорія структурних та термодинамічних властивостей м'якої речовини.
2. Теорія фазових переходів.
3. Фізика складних систем.
4. Теорія магнітних систем.
5. Теорія сегнетоелектриків та іонних провідників.
6. Розроблення ефективних алгоритмів для моделювання мікроскопічної динаміки в м'якій речовині.
7. Першопринципне моделювання структурних та динамічних властивостей неупорядкованих систем.
8. Нерівноважна статистична фізика неупорядкованих систем.
9. Теорія та моделювання систем із сильними електронними кореляціями.
10. Розрахунки електронних та коливних спектрів молекулярних та макромолекулярних систем.
11. Дослідження впорядкованих фаз в макромолекулярних системах.
12. Комп'ютерне моделювання фізичних систем на різних масштабах деталізації.
13. Молекулярний дизайн за допомогою методів машинного навчання.

III. Атестація аспірантів

Атестація здобувача ступеня доктора філософії здійснюється відповідно до вимог чинного законодавства України вченою радою Інституту фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського НАН України протягом строку навчання та разовою спеціалізованою вченою радою у разі виконання здобувачем вимог освітньо-наукової програми. Підсумкова атестація проводиться у формі публічного захисту дисертації за умови відповідності результатів наукової діяльності здобувача вимогам освітньо-наукової програми.