

СИЛАБУС

“Сучасні тенденції розвитку фізичних досліджень”

Національна академія наук України
Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського
Спеціальність: 104 Фізика та астрономія (Е5 Фізика та астрономія)

Лектор: докт. фіз.-мат. наук А. Д. Трохимчук
adt@icmp.lviv.ua
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, вул. Свенціцького 1, Львів
(032) 2761978

Опис курсу

Курс «Сучасні тенденції розвитку фізичних досліджень» покликаний дати можливість здобувачам вищої освіти рівня доктора філософії ознайомитися з фізичними основами механізмів та процесів, які лежать в основі сучасних технологій з використанням молекулярних масштабів. Окремо обговорюються можливості застосування молекулярної інженерії для вирішення проблем коронавірусних інфекцій.

Стрімкий технологічний прогрес, особливо в останньому десятилітті призвів до того що сучасна наука отримала можливість все більше концентруватися на об'єктах дуже малих – атомних/молекулярних – розмірів. Це зумовлено тим, що звичні для нас об'єкти з навколишнього середовища, як наприклад рідини чи кристали, демонструють цілком відмінну і водночас багату поведінку коли їх розглядати на молекулярних масштабах. Відомо що багато оптичних, електронних і інших властивостей твердих тіл кардинально змінюються коли їхній розмір сягає кількох атомів. Унікальні властивості систем молекулярних масштабів призвели до їх широкого застосування як в фундаментальних дослідженнях так і в різних галузях прикладної науки. Зміни які настають в системах атомарних/молекулярних розмірів настільки суттєві, що для їх дослідження стає вже недостатньо методів традиційних наукових дисциплін. Для того щоб повноцінно описати і зрозуміти поведінку таких систем науковим дослідникам доводиться використовувати міждисциплінарні підходи і методи що охоплюють собою різні розділи фізики, хімії і біології. За останні роки, ці методи розвинулися в новий і окремий науковий напрям, що описує явища і процеси в молекулярному режимі – молекулярну інженерію.

Розвиток таких методів стає особливо актуальним у наші дні, коли процеси пошуку розв'язання проблем, інспірованих коронавірусною пандемією, як в Україні, так і глобально, висвітлили особливу потребу в знаннях та розумінні фізичних основ молекулярної інженерії.

Мета курсу

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

Внаслідок вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен бути здатним продемонструвати такі **результати навчання** :

1. Знати можливості та області застосування молекулярної інженерії;
2. розуміти фізичні основи молекулярної інженерії в залежності від області застосування;
3. вміти критично оцінювати можливості молекулярної інженерії при її застосуваннях до вирішення конкретних проблем.

Структура навчальної дисципліни

Найменування показників	Всього годин
	Денна форма
Кількість кредитів/год.	3/90
Усього годин аудиторної роботи, у т.ч.:	48
• лекційні заняття, год.	16
• семінарські заняття, год.	20
• практичні заняття, год.	12
• лабораторні заняття, год.	-
Усього годин самостійної роботи, у т.ч.:	42
• контрольні роботи, к-сть/год.	-
• розрахункові (розрахунково-графічні), к-сть/год.	-
• індивідуальне науково-дослідне завдання, к-сть/год.	18
• підготовка до навчальних занять та контрольних заходів, год.	24
Екзамени	-
Заліки	1

Частка аудиторного навчального часу студента у відсотковому вимірі – 53.3%

Опис навчальної дисципліни

Лекційні заняття

№ п/п	Назви тем	К-сть годин
1.	Особливості та сучасний стан фізичних досліджень в молекулярній інженерії. Історія становлення молекулярної інженерії, базові науки, що лежать як в основі молекулярної інженерії, так і інших новітніх технологій, сучасний стан та перспективи молекулярних досліджень. Молекулярна інженерія поверхонь, міжповерхневих та приповерхневих областей, фазові перетворення та самоорганізація атомних, молекулярних та колоїдних моношарів.	4
2.	Про квантову та клітинну інженерії. Квантова механіка лежить в основі багатьох галузей сучасної техніки, включаючи матеріалознавство, фотоніку, електроніку, метрологію та обробку інформації. Теми, які будуть обговорюватися, включають власні значення та власні стани, гармонічні генератори, оператори, симетрії, спин, імпульс кута, теорію збурень та еволюцію часу. Клітинна інженерія - це галузь, яка вивчає взаємозв'язок структури і функції клітини та молекули. Це розробка та застосування інженерних підходів та технологій до біологічних молекул та клітин. Теми, які будуть обговорюватися, включають фундаментальну клітинну та молекулярну біологію; білкова інженерія; транспортування та доставка ліків.	4
3.	Молекулярна теорія явищ переносу. Будуть обговорюватися основні аспекти процесів молекулярного транспорту, включаючи динаміку рідин, процеси масового транспорту та дифузії, а також процеси транспортування енергії та тепла. Також обговорюватиметься взаємозв'язок, що виникає між імпульсом, масою та процесами перенесення енергії.	4
4.	Про використання першо-принципних підходів у моделюванні технологічних процесів. Моделі технологічних процесів є математичними представленнями властивостей і механізмів функціонування фізико-хімічних систем та слугують інструментом для встановлення зв'язку між вхідними й вихідними параметрами процесу. У сучасному інженерному моделюванні застосовуються два основні підходи: моделі на основі перших принципів (First-Principles Models) та моделі, керовані даними (Data-Driven Models). Йтиметься про побудову моделей, застосування законів збереження, а також використання фундаментальних рівнянь для опису переносу маси, енергії та імпульсу. Окремо окреслюються ключові компетенції, необхідні для ефективного процесного моделювання.	4
Усього годин		16

Практичні заняття

№ теми	Назви тем	Кількість Годин
1.	Можливості сучасної атомно-силової і скануючої зондової мікроскопії з метою отримання зображень різного роду поверхонь: металів, кераміки, полімерів, біологічних молекул та живих клітин. Принцип роботи <i>Scanning Tunneling Microscope (STM)</i> – приладу для дослідження структури електропровідної поверхні з атомною точністю.	4
2.	Міжмолекулярні та поверхневі сили. Принцип роботи <i>Surface Force Apparatus (SFA)</i> – приладу для вимірювання поверхневих сил. Застосування методів статистичної фізики до розрахунку міжмолекулярних та поверхневих сил.	4
3.	Сучасні тенденції у розвитку методів комп'ютерного експерименту та їх застосування в молекулярній інженерії. Перспективи машинного навчання – machine learning – в застосуваннях молекулярної інженерії.	4
Усього годин		12

Семінарські заняття

№ теми	Назви тем	Кількість годин
1	Опрацювання статті Feynman R.P. (1992). There's plenty of Room at the bottom. <i>J. Microelectromech. Systems</i> , 1 , 60-66.	4
2	Опрацювання статті Wu J. (2004). Integrating Novel Examples into Thermodynamics Courses, <i>Int. J. Engineering Ed.</i> 20 , No. 2, pp. 293-301.	4
3	Опрацювання статті F. Noe <i>et al.</i> (2020) Machine learning for molecular simulations. <i>Annu. Rev. Phys. Chem.</i> 71 , 361–390.	6
4	Опрацювання статті E.F. Marques-Riquelme <i>et. al.</i> (2026) First-Principles Process Engineering Modeling: A Review from a Practitioner's Perspective. <i>Industrial & Engineering Chemistry Research</i> https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5c03726	6
Усього годин		20

Самостійна робота

№	Найменування робіт	кількість год.
1.	Індивідуальне науково-дослідне завдання (тематичні презентаційні доповіді)	18
2.	Підготовка до навчальних занять та контрольних заходів	24
Усього годин		42

Критерії оцінювання результатів навчання студентів

Максимальна оцінка в балах						
Поточний контроль				Екзаменаційний контроль		Разом за дисципліну
Лабораторні заняття	Практичні і семінарські заняття	Самостійна робота	Разом балів (ПК)	Письмова компонента	Усна компонента	
-	40	10	50	-	50	100

Нижні межі оцінок:

88% A

80% B

70% C

Рекомендована література

Базова

1. Israelachvili J.N. (2011). Intermolecular and Surface Forces. 3rd edition. Elsevier.
2. Опрацювання статті Feynman R.P. (1992). There's plenty of Room at
3. the bottom. *J. Microelectromech. Systems*, **1**, 60-66.
4. Poon K.C.W., et. al. (2020) Soft matter science and COVID-19 pandemic. *Soft Matter*, **16**, 8310-8324.
5. Noe F. et al. (2020) Machine learning for molecular simulations. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **71**, 361–390.
6. Wu J. (2004). Integrating Novel Examples into Thermodynamics Courses, *Int. J. Engineering Ed.* **20**, No. 2, pp. 293-301.
7. E.F. Marques-Riquelme et. al. (2026) First-Principles Process Engineering Modeling: A Review from a Practitioner's Perspective. *Published as part of Industrial & Engineering Chemistry Research special issue "Importance of First-Principles Modeling in the Era of Growing AI"*.
<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5c03726>

Допоміжна

1. Sun W. *et al.*, (2019). Machine learning–assisted molecular design and efficiency prediction for high-performance organic photovoltaic materials. *Science Advances*, **5**, eaay4275.
2. Hla S.W., Rieder K.H. (2002) Invited Review Engineering of single molecules with a scanning tunneling microscope tip. *Superlattices and Microstructures*, 31, 63-72.

Інформаційні ресурси

Віртуальне навчальне середовище ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, авторські розробки та наукові статті науково-педагогічних працівників, бібліотечний фонд ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України.