

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Кафедра прикладної математики

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан факультету  
математики і інформатики

Григорій ЖОЛТКЕВИЧ



” 08 2023 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

**Наномеханіка і сучасні нанотехнології**

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти другий (магістерський)  
галузь знань 11 – математика та статистика  
(шифр і назва)  
спеціальність 113 - прикладна математика  
(шифр і назва)  
освітня програма прикладна математика  
(шифр і назва)  
спеціалізація \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
вид дисципліни за вибором  
(обов'язкова / за вибором)  
факультет математики і інформатики


2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою факультету математики і інформатики  
 “29” серпня 2023 року, протокол № 8

РОЗРОБНИК ПРОГРАМИ: *Кізілова Наталія Миколаївна*, професор, доктор фіз.-мат. наук,  
 професор кафедри прикладної математики.

Програму схвалено на засіданні кафедри Прикладної математики  
 Протокол від “28” серпня 2023 року №10


Завідувач кафедри прикладної математики

  
 (підпис)

Валерій КОРОБОВ  
 (прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми (керівником проектної  
 групи) Прикладна математика  
 назва освітньої програми

Гарант освітньо-професійної програми  
 (керівник проектної групи) Прикладна математика


  
 (підпис)

Світлана ІГНАТОВИЧ  
 (прізвище та ініціали)

Програму погоджено науково-методичною комісією факультету математики і інформатики Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна  
 назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “29” серпня 2023 року, протокол № 1

Голова науково-методичної комісії факультету математики і інформатики

  
 (підпис)

Ольга АНОЩЕНКО  
 (прізвище та ініціали)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «**Наномеханіка і сучасні нанотехнології**» складена відповідно до **освітньо-професійної** програми підготовки

магістр

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

Спеціальності (напряму) 113 Прикладна математика

спеціалізації \_\_\_\_\_

### 1. Мета та завдання навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни “**Наномеханіка і сучасні нанотехнології**” є надання знань в галузі сучасної наномеханіки, нанореології, нанотрибології, зокрема в математичному моделюванні відповідних проблем, а також використання відповідних математичних методів дослідження наноструктур в сучасних нанотехнологіях.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни “**Наномеханіка і сучасні нанотехнології**” є вивчення студентами основних теоретичних відомостей та набуття практичних навичок розв’язання конкретних прикладних задач наномеханіки, знання властивостей наноструктур, формування вміння використовувати прикладні пакети програм для розв’язання задач наномеханіки.

1.3. Кількість кредитів 6

1.4. Загальна кількість годин 180

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
2-й	
Семестр	
3-й	
Лекції	
18 год.	
Практичні, семінарські заняття	
18 год.	
Лабораторні заняття	
Самостійна робота	
144 год.	
у тому числі індивідуальні завдання	

## 1.6. Заплановані результати навчання

Студенти повинні досягти таких результатів навчання:

### **Знати:**

1. основні типи наноструктур та методи їх створення *in silico* та в лабораторних умовах;
2. механічні властивості та реологічні моделі наноструктурованих твердих та рідких середовищ;
3. сучасну техніку дослідження механічних властивостей, деформацій та руху наноструктур і наноструктурних систем;
4. сучасні MEMS системи та принципи їх роботи;

### **Вміти:**

1. використовувати відомі та будувати нові реологічні співвідношення для рідких і твердих матеріалів на нанорівні;
2. будувати замкнені системи рівнянь для наноструктурованих матеріалів;
3. проводити чисельні розрахунки процесів на нанорівні методами молекулярної динаміки;
4. визначати основні механічні принципи, на яких базується робота MEMS систем;

## 2. Тематичний план навчальної дисципліни.

### **Розділ 1. Механічні властивості наноструктур та експериментальні методи дослідження.**

#### **Тема 1.** Типи і загальна класифікація наноструктурованих матеріалів.

Властивості і математичні моделі нанокомпозитів, тонких плівок, вуглецевих матеріалів, нанопористих структур і нанорідин.

#### **Тема 2.** Основні механічні сили та типи взаємодій на нанорівні.

Молекулярні, електричні і магнітні сили. Тертя на мікро/нанорівні. Рівняння динаміки Ньютона для мікро/нано систем. Крайові умови. Методи чисельного інтегрування.

#### **Тема 3.** Методи та устаткування сучасної експериментальної наномеханіки.

Фізичні експерименти на мікро/нанорівні. Приклади запису даних. Статистична обробка даних. Формулювання робочих гіпотез. Математичні моделі.

#### **Тема 4.** Методи молекулярної динаміки та молекулярних ґрат. Фрактальні моделі.

Підходи і моделі методу молекулярної динаміки. Чисельні розрахунки і візуалізація результатів. Моделі молекулярних ґрат. Фрактальні моделі наноструктурованих поверхонь і пористих середовищ.

### **Розділ 2. Математичні моделі наномеханіки і нанореології.**

#### **Тема 5.** Методи осереднення та перехід від дискретних до континуальних моделей.

Дискретні моделі молекулярних систем у присутності нано- і мікрочастинок. Методи гомогенізації. Порівняння точності моделей. Приклади застосування.

#### **Тема 6.** Основні положення та математичні моделі мікрофлюїдики та нанофлюїдики.

Фізичні властивості мікрорідин і нанорідин. Статистичний аналіз даних експериментів. Реологічні моделі. Математичне моделювання. Приклади задач мікро/нанофлюїдики.

#### **Тема 7.** Реологічні моделі та термомеханіка нанорідин.

Математичні моделі процесів епло- і масо переносу на нанорівні. Особливості фізичних законів і граничних умов. Типи рівнянь. Методи розв'язання.

#### **Тема 8.** Типи MEMS-пристроїв та особливості процесів тепло- і масопереносу в них.

Моделювання процесів в мікропаливних елементах.

Мікрорідинні теплообмінники. Хімічні і біохімічні реактори. Паливні елементи. Мікроприлади для розділення сумішей. Методи оптимізації. Використання штучного інтелекту.

### 3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	Денна форма						Заочна форма					
	Усього	у тому числі					Усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	ср		л	п	лаб	інд	ср
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
<b>Розділ 1. Механічні властивості наноструктур та експериментальні методи дослідження</b>												
Тема 1. Типи та класифікація наноструктурованих матеріалів	22	2	2			18						
Тема 2. Основні механічні сили та типи взаємодій на нанорівні	22	2	2			18						
Тема 3. Методи та устаткування сучасної експериментальної наномеханіки	22	2	2			18						
Тема 4. Методи молекулярної динаміки та молекулярних грат. Фрактальні моделі	24	3	3			18						
<b>Разом за розділом 1</b>	90	9	9			72						
<b>Розділ 2. Математичні моделі наномеханіки і нанореології.</b>												
Тема 5. Методи осереднення та перехід від дискретних до континуальних моделей	22	2	2			18						
Тема 6. Основні положення та моделі мікрофлюїдики та нанофлюїдики	22	2	2			18						
Тема 7. Реологічні моделі та термо-механіка нанорідин	22	2	2			18						
Тема 8. Типи MEMS-пристроїв та особливості процесів тепло- і масопереносу в них. Моделювання процесів в мікро-паливних елементах	22	3	1			18						

<i>Контрольна робота</i>	2		2								
Разом за розділом 2	90	9	9			72					
Усього годин	<b>180</b>	<b>18</b>	<b>18</b>			144					

#### 4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Метод динаміки частинок та його програмна реалізація.	4
2	Реологічні моделі в'язкопружних твердих наноматеріалів	3
3	Реологічні моделі в'язкопружних нанорідин	3
4	Аналітичні розв'язки задач о течіях нанорідин по трубам і каналам	3
5	Розв'язання одновимірної задачі теплопровідності в нанометаріалах	3
6	<i>Контрольна робота</i>	2
	<b>Разом</b>	<b>18</b>

#### 5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Написання та валідація програмного коду для чисельних розрахунків методом динаміки частинок	36
2	Написання та валідація програмного коду для чисельних розрахунків фрактальних розмірностей наноструктур	36
3	Чисельні розрахунки ламінарної течії однорідної нанорідини	36
4	Чисельні розрахунки ламінарної течії трьох незмішуваних нанорідин	36
	<b>Разом</b>	<b>144</b>

#### 6. Індивідуальні завдання (не передбачені робочим планом)

#### 7. Методи навчання

Використовуються пояснювально-ілюстративний і частково-пошуковий методи. Студенти опановують значну частину теоретичного матеріалу шляхом самостійного розв'язання прикладної задачі наномеханіки. Протягом семестру виконується індивідуальний проект, результати якого підсумовують усі теми курсу.

#### 8. Методи контролю

1. Онлайн дискусія за матеріалами кожної лекції (в обсязі 25-30% від часу лекції), список питань для обговорення надається наприкінці кожної лекції.
2. Стисле опитування за матеріалами попередньої лекції
3. Перевірка виконання домашніх завдань
4. Виконання практичних завдань на відкритих онлайн-дошках
5. Проведення контрольної роботи
6. Проведення заліку.

## 9. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання				Сума
Семестровий проєкт	Контрольна робота, передбачена навчальним планом	Індивідуальні завдання	Залік	
40	20	---	40	100

Для допуску до складання підсумкового контролю (заліку) здобувач вищої освіти повинен набрати не менше 10 балів з навчальної дисципліни під час поточного контролю, самостійної роботи.

### Критерії оцінювання

**Контрольна робота** оцінюється у 20 балів. Робота складається з теоретичних та практичних запитань. У разі правильної обґрунтованої відповіді студент отримує за завдання бали; якщо у відповіді є помилки, бал не зараховується.

**Зміст семестрового проєкту:** студентам надана проста прикладна задача з обраної галузі наномеханіки. Потрібно запропонувати математичну модель, сформулювати і розв'язати відповідну систему рівнянь або задачу оптимізації.

Після виконання семестрового проєкту студенти надають звіт, за результатами цього звіту виставляється оцінка до 40 балів за такими критеріями:

0-10 балів - Було проведено аналіз завдання та запропоновано математичну модель прикладної задачі наномеханіки, однак практичної реалізації результату отримано не було.

10-25 балів - Було проведено аналіз завдання та запропоновано математичну модель прикладної задачі наномеханіки. Був використаний метод розв'язання задачі (напіваналітичний або чисельний).

25-35 балів - Було проведено аналіз завдання, статистичний аналіз даних для прикладної задачі наномеханіки, на базі чого була запропонована математична модель задачі і був розроблений програмний код для проведення розрахунків. Код був протестований на спрощеній постановці задачі.

35-40 балів - Було проведено аналіз завдання, статистичний аналіз даних для прикладної задачі наномеханіки, на базі чого були запропоновані кілька (2-3) математичних моделі задачі і був розроблений програмний код для проведення розрахунків. Код був протестований на спрощеній постановці задачі и використаний для розв'язання прикладної задачі з різними параметрами.

**Залікова робота** складається з трьох завдань і передбачає письмову відповідь на два теоретичних питання зі списку, який надається студентам заздалегідь, а також розв'язання практичної задачі наномеханіки.

Кожне теоретичне завдання оцінюється максимально 15 балами, задача – 10 балами.

По кожному завданню залікової роботи нараховується:

- максимальний бал у разі правильної обґрунтованої відповіді;
- за незначні помилки оцінка зменшується від 10 до 30 відсотків;
- за значні логічні помилки оцінка зменшується до 50 відсотків, якщо хід міркувань в цілому правильний;
- якщо відповідь не відповідає жодному з критеріїв – виставляється 0 балів.

### Шкала оцінювання (дворівнева)

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка
50-100	зараховано
1-49	не зараховано

## 10. Рекомендована література

### Основна література

1. Кізілова Н.М. «Прикладні задачі сучасної мікрофлюїдики і нанофлюїдики.» Методичні рекомендації до практичних занять з курсу «Наномеханіка та сучасні нанотехнології» для студентів спеціальності «Прикладна математика». Харків: ХНУ ім. В.Н. Каразіна. - 2020. - 36 с.
2. Кізілова Н.М. Метод скінченних елементів в розв'язанні прикладних задач механіки рідини з AnSys Rluent 2021R1. Харків: ХНУ ім. В.Н. Каразіна. 2021. – 80 с.
3. Kizilova N.N. “Applied problems of microfluidics and nanofluidics.” Методичні рекомендації до практичних занять з курсу «Наномеханіка та сучасні нанотехнології» для студентів спеціальності «Прикладна математика». Харків: ХНУ ім. В.Н. Каразіна. - 2020. - 36 с.
4. Kizilova N.N., Solovjova H.N. “Rheology of materials.” Методичні рекомендації до практичних занять з курсу «Основи реології» для студентів спеціальності «Прикладна математика». Харків: ХНУ ім. В.Н. Каразіна. - 2020. - 52 с.
5. Кізілова Н.М. «Метод скінченних елементів у розв'язанні задач механіки рідини і газу.» Методичні рекомендації до практичних занять та самостійної роботи з курсу «Чисельні методи механіки суцільних середовищ» для студентів спеціальності «Прикладна математика». Харків: ХНУ ім. В.Н. Каразіна. - 2020. - 64 с.
6. Кізілова Н.М. Реологія середовищ. Методичні рекомендації. – Харків. – 2017. – 52 с.
7. Кізілова Н.М., Ромашов Ю.В. Розв'язання внутрішніх та зовнішніх задач обтікання. Методичні рекомендації. – Харків. – 2017. – 48 с.
8. Кізілова Н.М. Метод динаміки частинок в математичному моделюванні динамічних систем. Методичні рекомендації для студентів другого курсу другого (магістерського) рівню вищої освіти зі спеціальності «Прикладна математика». Харків: ХНУ ім. В.Н.Каразіна. - 2023. - 108с.
9. Козлов Г.В., Яновський Ю.Г., Карнет Ю.Н. Фрактальный підхід в механіці композитів. К.: Наук.думка, 2008, 420 с.

### Допоміжна література

1. Meyer E., Overney R.M., Dransfeld K., Gyalog T. Nanoscience. World Scientific Publ., 1998. – 373p.
2. Karniadakis G.E.M., Beskok A. Microflows. Springer Verlag.- 2002. – 340p.
3. Kizilova N. Biomimetic composites reinforced by branched nanofibers. // Nanoplasmonics, Nano-Optics, Nanocomposites, and Surface Studies. Springer Proceedings in Physics, Vol.167. O. Fesenko and L. Yatsenko, (Eds.). – 2015. – P. 7–23.
4. Cherevko V., Kizilova N. Complex flows of immiscible microfluids and nanofluids with velocity slip boundary conditions. // Nanophysics, Nanomaterials, Interface Studies, and Applications, Springer Proceedings in Physics , vol. 183, O. Fesenko, L. Yatsenko (eds.). – 2017. – P. 207–230.



## 11. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. Віртуальний лабораторний практикум "Багатомасштабне моделювання в нанотехнологіях" <http://nanomodel.ua/>
2. NanoLAB. Educational materials. <https://www.nanolab.unimore.it/english-version-materials/>
3. NanoLab Umea University <https://www.umu.se/en/research/infrastructure/nanolab/>
4. Educational Nanoscience at High School  
[https://www.researchgate.net/publication/269361703\\_The\\_NANOLAB\\_Project\\_Educational\\_Nanoscience\\_at\\_High\\_School](https://www.researchgate.net/publication/269361703_The_NANOLAB_Project_Educational_Nanoscience_at_High_School)