

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича

ЗАТВЕРДЖЕНО:

В.о. директора ІПМ НАН України

Чл.-кор. НАН України



Г.А.Баглюк

СХВАЛЕНО:

Вченою радою ІПМ НАН України

Протокол № 6 від 24 жовтня 2023 р.

**Силабус з навчальної дисципліни
«Основи фізики конденсованого стану речовини»,
складається в межах ОПН підготовки доктора філософії
третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти
для здобувачів за спеціальністю:
102 «Хімія»**

1. Загальна характеристика курсу

| | |
|--|---|
| Назва дисципліни | «Основи фізики конденсованого стану речовини» |
| Адреса викладання дисципліни | вул. Омеляна Прицака (Кржижановського), 3, Інститут проблем матеріало-знавства ім. І.М.Францевича НАН України, Київ, 03142, Україна |
| Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна | Відділ «Фізичного матеріалознавства тугоплавких сполук» |
| Галузь знань, шифр та назва спеціальності | 10 «Природничі науки», 102 «Хімія |
| Викладачі дисципліни | д.ф.-м.н., ст. н. співр, зав.від. В.І. Іващенко д.ф.-м.н., ст. н. співр, зав.від. О.Ю. Хижун |
| Контактна інформація викладачів | В.І. Іващенко: тел. 050-1442687 e-mail: ivashchenko@icnanotox.org О.Ю. Хижун: тел. 050-1442687 e-mail: khyzhun@ipms.kiev.ua |
| Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються | В дні лекцій за попередньою домовленістю |
| Інформація про дисципліну | Курс надає слухачам додаткову інформацію про електронну будову і експериментальні можливості її дослідження та пов'язаними з нею властивостями твердих тіл. Акцент зроблено на вивченні можливостей отримання інформації про загальний розподіл валентних електронних станів та парціальних станів окремих атомів у розкладі по типу їх симетрії, величини перенесення електронної густини від атомів одного сорту до атомів іншого сорту за даними досліджень рентгенівських емісійних смуг та рентгенівських фотоелектронних спектрів внутрішніх та валентних електронів; зонної структури, поверхні Фермі, енерго-зонних методів розрахунків та фазових діаграм, розрахованих «із перших принципів». Отримані знання допоможуть слухачам глибше розуміти властивості матеріалів виходячи з особливостей їх електронної структури та характеру хімічного зв'язку (магнітні, кінетичні, пружні, міцнісні та інші), їх стабільності залежно від складу і температури. |
| Коротка анотація дисципліни | Дисципліна «Основи фізики конденсованого стану речовини» є дисципліною за вільним вибором аспірантів зі спеціальностей 102 «Хімія» для освітньої програми підготовки доктора філософії, яка викладається в Інституті проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України в 2 семестрі в обсязі 2 кредити (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). |
| Мета та цілі дисципліни | Метою і завданням навчальної дисципліни «Основи фізики конденсованого стану речовини» є опанування теоретичними знаннями для розуміння і інтерпретації властивостей твердих тіл на основі їх електронної структури; опанування теоретичними знаннями можливостей рентгенівської емісійної спектроскопії (РЕС) та рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (РФС) для розуміння фізичної суті цих методів і можливостей отримання необхідної інформації стосовно електронної |

| | |
|---|---|
| | структури і особливостей хімічного зв'язку твердих тіл та експериментальне дослідження РЕС- і РФС-спектрів. |
| Вимоги навчальної дисципліни | Курс є дисципліною за вільним вибором аспірантів. Обсяг курсу – 2 кредити ECTS, 28 год аудиторних занять, з них 24 год лекційних занять і 4 год практичних занять, та 32 год самостійної роботи (очна форма навчання). Вивчення наукової дисципліни вимагає обов'язкове відвідування аудиторних занять, активну участь в обговоренні питань, якісне і своєчасне виконання завдань самостійної роботи, а також участь у всіх видах контролю. |
| Підсумкова форма контролю знань | Залік |
| Очікувані результати навчання | <i>Після завершення цього курсу студент буде:</i> - знати: Приципи формування енерго-зонної структури матеріалів, її вплив на формування структурних і механічних властивостей; основні фізичні принципи РФС- і РЕС-методів та їх можливості для пояснення енергетично-зонної структури матеріалів та хімічного зв'язку в них. - вміти: застосувати отримані знання для інтерпретації отриманих дисертантами теоретичних і експериментальних результатів виходячи з особливостей електронної будови та хімічного зв'язку об'єктів що досліджуються. |
| Ключові слова | <i>Електронна структура, електронні стани, симетрія електронних станів, щільність електронних станів, зони Бриллюена, енергетичні зони, методи розрахунків, електронні властивості, стабільність, механічні властивості, хімічний зв'язок, РФС-спектри, РЕС-спектри.</i> |
| Пререквізити | Для вивчення курсу студенти потребують базових знань зі спеціальних дисциплін (глибинні знання зі спеціальності) та знань з дисциплін, що розвивають загальнонаукові компетентності, які вивчають на першому та другому році навчання в аспірантурі. |
| Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу | Презентація, лекції, дискусія |
| Необхідне обладнання | Мультимедійне обладнання |

2. План викладання дисципліни

| Тема, план | Кількість годин | | | |
|--|-----------------|--------------|-----------|---------------------------|
| | усього | у тому числі | | |
| | | аудиторні | практичні | Само- стійна робота |
| Модуль 1 «Електронна структура і властивості твердих тіл» Іващенко В.І. | | | | |
| Тема 1 «Зони Бриллюена. Енерго-зонная структура» - принцип побудови зон Бриллюена, функції Блоха, зонна структура, електронні щільності станів, методи | 14 | 6 | - | 8 |

| | | | | |
|---|----|----|---|----|
| <i>розрахунків.</i> | | | | |
| Тема 2 "Електронна будова і властивості" <i>- магнітні і кінетичні властивості, пружні властивості, співвідношення напруження-деформація, стабільність, фазові діаграми.</i> | 16 | 8 | 2 | 8 |
| Всього за модулем | 30 | 14 | 2 | 16 |
| Модуль 2 «Рентгенівська емісійна та фотоелектронна спектроскопія» Хижун О.Ю. | | | | |
| Тема 1 «Рентгенівська емісійна спектроскопія» <i>- фізичні основи виникнення рентгенівської емісійних спектрів, рентгенівські діаграмні лінії, рентгенівські емісійні смуги, типи рентгенівських спектрометрів, вторинні і первинні методи збудження РЕС-спектрів, їх інтерпретація.</i> | 14 | 6 | - | 8 |
| Тема 2 «Рентгенівська фотоелектронна спектроскопія» <i>- фізичні основи методу, рентгенівські фотоелектронні спектри внутрішніх електронів, рентгенівські фотоелектронні спектри валентних електронів, спіно-орбітальне розщеплення, джерела випромінювання для отримання РЕС-спектрів, методи калібрування рентгенівських фотоелектронних спектрометрів, застосування РФС-методу для дослідження електронної структури та хімічного зв'язку.</i> | 16 | 8 | 2 | 8 |
| Всього за модулем | 30 | 14 | 2 | 16 |
| Всього | 60 | 28 | 4 | 32 |

3. Контроль знань

В основі методів контролю знань використовуються поточне індивідуальне опитування та залік. Залік проводиться на другому році навчання.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

| Оцінка ECTS | Сума балів за навчальну діяльність | Оцінка за національною шкалою |
|----------------|------------------------------------|---|
| A | 90–100 | Відмінно |
| B | 82–89 | Добре |
| C | 74–81 | |
| D | 64–73 | Задовільно |
| E | 60–63 | Достатньо |
| F _x | 35–59 | Незадовільно з можливістю повторного складання |
| F | 1–34 | Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням курсу |

4. Список базової літератури

1. F. Wooten, Optical Properties of Solids, Academic Press, New York, 1972.
2. J.M. Ziman. Principles of the Theory of Solids. Cambridge University Press, 1972.
3. J. Tauc, Amorphous and Liquid Semiconductors, Plenum, New York, 1974.
4. N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. Solid State Physics. Saunders College, Philadelphia, 1976.

5. O. Madelung. Introduction to Solid-State Theory, Springer Series in Solid-State Sciences, 2 1978th Edition.
6. A.O.E. Animaly. Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids. Prentice-Hall Physics Series, New Delhi, 1978.
7. Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy (edited by C.D. Wagner, W.M. Riggs, L.E. Davis, J.F. Moulder, and G.E. Muilenberg), Perkin-Elmer Corporation, Minnesota, 1979.
8. A. Meisel, G. Leonhardt, R. Szargan, X-Ray Spectra and Chemical Binding, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 1989.
9. Practical Surface Analysis (the 2nd Edition): Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy (Edited by D. Briggs and P.M. Seach), John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 1990.
10. A.K. Jena, M.C. Chaturvedi. Phase transformations in materials. Prentice Hall, New Jersey, 1992. P. 66-131.
11. Charles Kittel. Introduction to Solid State Physics. 7th ed. John Wiley & Sons, Inc. New York – London, 1996.
12. Electron Spectroscopy: Theory, Techniques and Applications: Vol. 1 (C.R. Brundle, A.D. Baker, Eds), Academic Press, London/New-York/San Francisco, 1997.
13. J. Kohanoff, N.I. Gidopoulos, Density Functional Theory: Basics, New Trends and Applications, In: Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry (Ed. by S. Wilson) (Volume 2, Part 5, Chapter 26), John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2003, pp. 532-568
14. S. Hüfner, Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications, 3rd ed. (Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg), 2003.
15. R. M. Martin. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press, 2004.
16. J.A. van Bokhoven, C. Lamberti. X-Ray Absorption and X-Ray Emission Spectroscopy: Theory and Applications. Wiley, 2016.