



Національна академія наук України  
Інститут проблем матеріалознавства  
ім. І.М. Францевича



Силабус (робоча програма) навчальної дисципліни  
**ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА І ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДИХ ТІЛ**  
**ELECTRONIC STRUCTURE AND PROPERTIES OF SOLIDS**

**Реквізити навчальної дисципліни**

Рівень вищої освіти	<i>третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	10 - Природничі науки
Спеціальність	105 - Прикладна фізика та наноматеріали
Освітня програма	Прикладна фізика та наноматеріали
Статус дисципліни	<i>дисципліна вільного вибору</i>
Форма навчання	<i>денна (очна), он-лайн/офф-лайн</i>
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс навчання, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>3 кредити ECTS, 90 годин</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>залік</i>
Розклад занять	<i>лекція – раз на тиждень (32 години); практика/семінар/консультації – 1 раз на два тижні (16 годин); самостійна робота 41 год., у тому числі на виконання індивідуальних/домашніх завдань 20 год, залік – 1 год</i>
Мова викладання	<i>українська</i>
Інформація про викладачів	<i>кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник Лужний Іван Васильович, 0968219842, <a href="mailto:i.luzhnyi@ipms.kyiv.ua">i.luzhnyi@ipms.kyiv.ua</a></i>
Розміщення курсу	Google Classroom; доступ за запрошенням викладача

**Програма навчальної дисципліни**

**1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання**

Навчальна дисципліни присвячена глибокому вивченню природи електронних станів у кристалічних матеріалах та їх впливу на фізичні властивості таких матеріалів. Курс охоплює різноманітні методи дослідження електронної структури, зокрема обчислювальні підходи, такі як теорія функціонала густини (DFT) та інші методи квантово-механічних розрахунків. Велика увага приділяється вивченню кристалічної симетрії, зон Бриллюена і зонної структури, що формуються у твердих тілах.

Особливу увагу курс приділяє аналізу електронних властивостей металів, напівпровідників та ізоляторів. Вивчаються принципи провідності та взаємодії між квазічастинками, такими як електрони, екситони та фонони, що визначають поведінку електронів у матеріалах. Особливий акцент робиться на дослідженні матеріалів з незвичайними електронними властивостями, таких як магнітні і надпровідні системи.

Курс також охоплює сучасні дослідження дихалькогенідів перехідних металів (TMD) та їх використання у новітніх технологіях. Вивчаються поліморфні переходи між різними кристалічними структурами, що значною мірою змінюють електронні властивості матеріалів. Використання спектроскопічних методів, таких як рентгенівська фотоелектронна спектроскопія (XPS) та інші, дозволяє визначити структуру електронних зон та взаємодії на основі експериментальних даних.

Цей курс дає систематичне розуміння взаємозв'язку між електронною структурою і фізичними властивостями твердих тіл, що важливо для сучасної фізики матеріалів, нанотехнологій, електроніки і енергетичних систем.

**Предмет освітньої компоненти** - вивчення природи електронних станів в твердих тілах та їхньому впливі на фізичні властивості матеріалів. Основна увага зосереджена на розумінні взаємозв'язку між електронною структурою матеріалу, його кристалічною симетрією, зонною структурою, а також електричними, оптичними, магнітними та тепловими властивостями.

Дисципліна також охоплює теоретичні методи моделювання електронної структури, такі як теорія функціонала густини (DFT), спектроскопічні методи експериментального дослідження та сучасні підходи до аналізу квантових ефектів у твердих тілах.

**Метою освітньої компоненти** є формування у здобувачів вищої освіти (з.в.о.) рівня PhD компетентностей:

**Інтегральна компетентність:**

Здатність продукувати нові ідеї, розв'язувати комплексні проблеми професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності у сфері прикладної фізики та наноматеріалів, застосовувати методологію наукової та педагогічної діяльності, проводити власне наукове дослідження, результати якого мають наукову новизну, теоретичне та практичне значення.

**Загальні компетентності:**

ЗК01. Здатність до освоєння і системного аналізу через наукове сприйняття і критичне осмислення нових знань.

ЗК02. Здатність до критичного аналізу і креативного синтезу нових ідей.

ЗК03. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК04. Здатність до оприлюднення наукових результатів перед академічною аудиторією та громадськістю як на національному, так і на міжнародному рівні.

ЗК05. Здатність працювати в команді, мотивувати інших у досягненні поставленої мети, формувати позитивні відношення з колегами.

ЗК07. Здатність дотримуватися етичних норм та авторського права при проведенні наукових досліджень, діяти на основі принципів академічної доброчесності, а також ставитися із повагою до національних та культурних традицій, способів роботи і мислення інших.

Фахові компетентності:

ФК01. Здатність самостійно здійснювати наукову діяльність у галузі прикладної фізики з використанням новітніх наукових теорій, методів та інноваційних технологій.

ФК02. Здатність розвивати теоретичні засади, створювати і застосовувати сучасні об'єкти і процеси прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК03. Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі прикладної фізики та наноматеріалів з урахуванням міжгалузевих зв'язків для забезпечення потреб у високоефективних матеріалах, енерго- та ресурсозберігаючих технологіях.

ФК04. Здатність переосмислити наявне та створити нове цілісне знання та/або професійну практику та реалізувати проекти, включаючи власні дослідження, в сфері прикладної фізики та наноматеріалів та споріднених галузях.

ФК06. Здатність до ініціювання інноваційних комплексних технічних проектів, лідерства та повної автономності під час їх реалізації.

ФК07. Соціальна відповідальність за результати прийняття стратегічних технічних рішень і впровадження нових технологій і матеріалів з огляду на їх вплив на навколишнє середовище.

**Програмні результати навчання.** Після засвоєння освітньої компоненти аспіранти мають продемонструвати такі результати навчання:

РН01. Проявляти наукові погляди та підходи при оцінюванні варіантів створення нових перспективних матеріалів з заданим рівнем властивостей.

РН02. Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі прикладної фізики та наноматеріалів бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності на межі предметних галузей.

РН03. Інтегрувати існуючі методики та методи досліджень та адаптувати їх для розв'язання наукових завдань при проведенні дисертаційних досліджень.

РН04. Вміти визначити об'єкт і суб'єкт, предмет досліджень, використовуючи гносеологічні підходи до розв'язання наукових та технічних проблем.

РН05. Описати закономірності та принципи виготовлення і застосування сучасних багатофункціональних матеріалів (особливо наноматеріалів) у виробничому комплексі.

РН8: Спланувати та реалізувати на практиці оригінальне самостійне наукове дослідження, яке має суттєву новизну. Це може включати розробку нових методів дослідження електронної структури.

РН11: Використовувати сучасні інформаційні джерела національного та міжнародного рівня для оцінки стану вивченості об'єкту досліджень. Це важливо для розуміння актуальності проблем, пов'язаних з електронною структурою.

РН14. Вміти доступно, на високому науковому рівні доносити сучасні наукові знання та результати досліджень до фахової та нефахової аудиторії.

РН18. Дотримуватись етичних норм, враховувати авторське право та норми академічної доброчесності при проведенні наукових досліджень, презентації їх результатів та у науково-педагогічній діяльності.

**2. Місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою**

Перелік освітніх компонент, знань та умінь, володіння якими необхідні аспіранту для успішного засвоєння освітньої компоненти:

<b>Пререквізити:</b>	
<i>Фізика твердого тіла</i>	<i>Глибокі знання основ квантової механіки, що описують поведінку електронів у матеріалах; термодинамічні принципи, які впливають на фазові переходи; електродинаміка, що дозволяє зрозуміти електромагнітні властивості матеріалів.</i>
<i>Матеріалознавство</i>	<i>Розуміння механізмів, які визначають фізичні і хімічні властивості матеріалів; знання про структуру і типи матеріалів, їх стійкість та відповідність до специфікацій; вміння оцінювати вплив різних факторів на властивості матеріалів.</i>
<i>Кристалографія</i>	<i>Знання про кристалічні решітки, симетрії та структури кристалів; вміння використовувати рентгенівську дифракцію для визначення структури кристалів; розуміння впливу кристалічної структури на електронні властивості матеріалів.</i>
<i>Хімія матеріалів</i>	<i>Основи хімічних зв'язків і реакцій, що впливають на властивості матеріалів; знання про синтез і модифікацію матеріалів для досягнення бажаних електронних властивостей; вміння аналізувати вплив хімічного складу на електронну структуру.</i>
<i>Експериментальні методи</i>	<i>Уміння проводити лабораторні експерименти для вимірювання електронних та фізичних властивостей матеріалів; знання про сучасне лабораторне обладнання та техніки, такі як спектроскопія, мікроскопія та електронна мікроскопія.</i>
<i>Теоретичні дослідження</i>	<i>Знання методів обчислення, таких як DFT (теорія функціоналу густини), для моделювання електронної структури; вміння проводити чисельні розрахунки та симуляції для прогнозування поведінки матеріалів; критичний аналіз та верифікація результатів.</i>
<i>Критичне мислення</i>	<i>Здатність оцінювати та аналізувати наукові публікації; вміння формулювати нові наукові питання та гіпотези; навички виявлення проблем та пошуку рішень на основі наукового підходу.</i>
<i>Комунікативні навички</i>	<i>Уміння ефективно спілкуватися та презентувати результати досліджень як фахівцям, так і непрофесіоналам; навички написання наукових статей та підготовки доповідей; вміння працювати в команді та координувати дослідницькі проекти.</i>
<i>Етика наукових досліджень</i>	<i>Розуміння етичних норм, пов'язаних із науковими дослідженнями; знання про авторське право та відповідальність за дотримання академічної доброчесності; вміння оцінювати соціальну відповідальність своїх досліджень.</i>
<b>Постреквізити:</b>	
<i>Наукова складова</i>	<i>Планування і виконання експериментальних досліджень з використанням сучасних методів та методик дослідження, критичний аналіз результатів досліджень.</i>

### **3. Зміст освітньої компоненти**

#### **Тема 1. Вступ до електронної структури і властивостей твердих тіл**

Основи електронної теорії твердих тіл, визначення електронних зон, квазічастинок і їх значення для розуміння фізичних властивостей матеріалів.

#### **Тема 2. Методи розрахунку електронної структури**

Огляд основних теоретичних методів, таких як DFT та Hartree-Fock, а також практичне використання програмного забезпечення, наприклад, Quantum ESPRESSO для розрахунків електронної структури.

#### **Тема 3. Кристалічна симетрія і зони Бриллюена**

Вивчення кристалічної симетрії, її ролі у формуванні електронних зон, а також принципи побудови зон Бриллюена для різних кристалічних структур.

#### **Тема 4. Електронні зони у твердих тілах**

Дослідження впливу електронних зон на провідність, магнітні та оптичні властивості, а також взаємодію електронів із кристалічною решіткою.

#### **Тема 5. Квазічастинки і їх взаємодії**

Концепція квазічастинок, таких як електронні дірки, їх роль у фізичних властивостях матеріалів, а також взаємодії з зовнішніми факторами.

#### **Тема 6. Метали, напівпровідники та ізолятори**

Класифікація матеріалів за їх електронними властивостями, дослідження впливу домішок і дефектів на електронну структуру та властивості матеріалів.

#### **Тема 7. Магнетизм у твердих тілах**

Основи магнетизму, типи магнетичних матеріалів (ферромагнітні, антиферромагнітні), вплив електронної структури на магнітні властивості.

#### **Тема 8. Надпровідність**

Основи теорії надпровідності, зокрема BCS теорія, вивчення електронної структури надпровідників та їх застосування.

#### **Тема 9. Спектроскопічні методи дослідження**

Огляд спектроскопічних методів, таких як XPS та EELS, які використовуються для дослідження електронної структури, а також практичні заняття з аналізу спектрів.

#### **Тема 10. Квантові матеріали**

Вивчення квантових матеріалів, таких як квантові точки та топологічні матеріали, їх електронні властивості і потенційні застосування в нових технологіях.

#### **Тема 11. Сучасні проблеми електронної структури**

Аналіз сучасних досліджень у галузі електронної структури, обговорення актуальних проблем і відкриттів, а також їх значення для промисловості та науки.

#### **Тема 12. Вплив дефектів на електронну структуру**

Аналіз ролі кристалічних дефектів (дислокацій, вакансій, домішок) у змінах електронної структури та фізичних властивостей матеріалів.

#### **Тема 13. Наноматеріали та їх електронні властивості**

Дослідження електронної структури наноматеріалів, їх унікальних властивостей, а також застосувань у різних технологіях.

#### **Тема 14. Перспективи розвитку електроніки та матеріалознавства**

Обговорення сучасних тенденцій та перспектив у розвитку електроніки, нових матеріалів і технологій, а також їх вплив на суспільство.

#### 4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці інституту, а також може бути надана в електронному вигляді. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні.

##### **Базова література:**

1. Jena, A. K., & Chaturvedi, M. C. (1992). *Phase Transformations in Materials*. Prentice Hall.
2. Martin, R. M. (2004). *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*. Cambridge University Press.
3. Kittel, C. (1996). *Introduction to Solid State Physics*. 7th ed. John Wiley & Sons.
4. Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics*. Saunders College Publishing.
5. Ziman, J. M. (1972). *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge University Press.
6. Saitoh, E., & Nakata, Y. (2016). *Magnetism in Nanostructured Materials*. Springer.

##### **Додаткова література:**

1. *Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy* (edited by C. D. Wagner et al.). Perkin-Elmer Corporation, 1979.
2. Meisel, A., Leonhardt, G., & Szargan, R. (1989). *X-Ray Spectra and Chemical Binding*. Springer-Verlag.
3. Briggs, D., & Seah, P. M. (Eds.). (1990). *Practical Surface Analysis: Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy*. John Wiley & Sons.
4. Brundle, C. R., & Baker, A. D. (Eds.). (1997). *Electron Spectroscopy: Theory, Techniques and Applications: Vol. 1*. Academic Press.
5. Kohanoff, J., & Gidopoulos, N. I. (2003). *Density Functional Theory: Basics, New Trends and Applications*. In: *Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry*. John Wiley & Sons.

### Навчальний контент

#### 5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Передбачено комплексний підхід, що поєднує лекції та семінари, а також розгляд питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій застосовується ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені в Google Classroom. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої. Метою практичних занять є закріплення теоретичних знань, отриманих на лекціях та в процесі самостійної роботи з літературними джерелами в ході вивчення освітньої компоненти.

#### 6. Самостійна робота

Самостійна робота включає повторення лекційного матеріалу, опрацювання рекомендованої літератури, що дозволяє розширити та поглибити знання з дисципліни, підготовку до практичних завдань та заліку.

### Політика та контроль

#### 7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Відвідування лекційних та семінарських занять, які можуть проводитись як он-лайн, так і офф-лайн, є обов'язковим. У випадку відсутності на занятті аспіранти

зобов'язані повідомити викладача заздалегідь і надати документальне підтвердження причини відсутності, якщо це можливо. На початку кожної лекції проводиться опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою та підвищення зацікавленості. Під час сигналу повітряної тривоги заняття негайно припиняється, а всі учасники навчального процесу повинні пройти в найближче укриття. Для завершення заняття організується додатковий час.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів. Заохочувальні бали можуть нараховуватись викладачем за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітньої компоненти або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату. Але їх сума не може перевищувати 25% від рейтингової шкали. Штрафні бали в рамках освітньої програми не передбачені.

Політика дедлайнів та перескладань. Дедлайни здачі завдань та контрольних робіт є обов'язковими. У разі поважних причин, аспіранти можуть звернутись до викладача для можливої зміни продовження термінів. Запити на продовження дедлайну повинні бути подані заздалегідь.

## **8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)**

В рамках навчальної дисципліни передбачено кілька видів контролю та систему рейтингування результатів навчання, а саме:

Поточний контроль: опитування під час лекцій та на семінарських заняттях.

Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання формується з суми балів, набраних під час поточного та семестрового контролю. Рейтинг аспіранта  $R$  розраховується за 100 бальною шкалою та складається з балів, що він отримує протягом семестру (стартовий рейтинг)  $S$  та диференційованого заліку  $C$ . Додаткові бали  $D$  можна отримати за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітньої компоненти або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату. Таким чином, сумарний рейтинговий бал розраховується як

$$R=S + C + D$$

Стартовий рейтинг  $S$  складається з балів, що аспірант отримує за відвідування занять (1 бал), активну роботу на занятті (2 бали), правильну відповідь при поточному опитуванні (2 бали), виконання творчого завдання (5 балів). Максимальна сума балів, яку аспірант може набрати протягом семестру (стартовий рейтинг), складає 50 балів. Умовою допуску до заліку є кількість рейтингових балів не менше 30.

На заліку аспіранти виконують письмову тестову роботу, що складається з 50 питань. Кожне запитання (завдання) оцінюється в 1 бал. Умовою успішної здачі заліку є кількість отриманих за залікову роботу балів не менше 30.

Сумарний рейтинговий бал розраховується за формулою:

$$R=S + C + D,$$

де  $S$  – стартовий рейтинг;

$C$  – залік;

$D$  – додаткові бали.

Відповідність між кількістю балів, оцінкою за національною шкалою та шкалою ECTS наведена в таблиці.

<i>Кількість балів</i>	<i>Шкала ECTS</i>	<i>Оцінка за національною шкалою</i>
<i>90-100</i>	<i>A</i>	<i>Відмінно</i>
<i>85-89</i>	<i>B</i>	<i>Добре</i>
<i>75-84</i>	<i>C</i>	
<i>65-74</i>	<i>D</i>	<i>Задовільно</i>
<i>60-64</i>	<i>E</i>	
<i>Менше 60</i>	<i>FX</i>	<i>Незадовільно</i>
<i>Не виконані умови допуску</i>		<i>Не допущено</i>

### **9. Додаткова інформація з освітньої компоненти**

*Робочу програму освітньої компоненти (силабус):*

*Складено зав.від., ст.наук.співроб., д.ф.-м.н., Хижунюм О.Ю та наук.співроб., к.ф.-м.н., Лужним І.В.*

*Ухвалено Вченою радою Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича Національної академії наук України (протокол №10 від «06» серпня 2024р.).*