

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

Затверджено

На засіданні кафедри фізики металів
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 9 від 29.08.2022 р.)

Завідувач кафедри



проф. Мудрий С. І.

Силабус з навчальної дисципліни
«Фізика металів і матеріалознавство»,
що викладається в межах ОПП *Фізика та астрофізика*
першого (бакалаврського) рівня вищої освіти
для здобувачів з спеціальності *104 Фізика та астрономія*

Львів 2022

Назва дисципліни	ФІЗИКА МЕТАЛІВ І МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО
Адреса викладання дисципліни	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, м. Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	фізичний факультет, кафедра фізики металів
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань – 10 Природничі науки Спеціальність – 104 Фізика та астрономія
Викладачі дисципліни	професор кафедри фізики металів Якібчук Петро Миколайович, д.ф.-м.н.
Контактна інформація викладача	petro.yakibchuk@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/yakibchuk
Консультації по курсу відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/fizyka-metaliv-i-materialoznavstvo-104-op-fizyka-ta-astrofizyka
Інформація про дисципліну	Дисципліна «Фізика металів і матеріалознавство» є нормативною дисципліною для підготовки бакалаврів за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія», яка викладається в 7 та 8 семестрах в обсязі 7 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація дисципліни	Курс розроблено таким чином, щоб надати учасникам відповідні теоретичні знання, уміння, навички, загальні та фахові компетентності для продукування нових ідей, розв'язання комплексних проблем у галузі фізики металів та сучасного матеріалознавства. Тому у курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачене розв'язання задач пов'язаних з вивченням основ фізики металів та фізичного матеріалознавства та практичне використання отриманих знань для вирішення наукових та виробничих проблем.
Мета та цілі дисципліни	Метою і завданням навчальної дисципліни “Фізика металів і матеріалознавство” є навчити майбутніх спеціалістів володіти сучасними методами опису електронних властивостей металічних систем, а саме ознайомити їх з основними поняттями класичних теорій Друде та Зоммерфельда. Навчити майбутніх спеціалістів самостійно проводити розрахунки енергетичного спектру та зонної структури металів із використанням низки методів, серед яких є метод лінійної комбінації атомних орбіталей, метод комірок, метод функцій Гріна, метод плоских хвиль, метод ортогоналізованих плоских хвиль та інші. Ознайомити студентів із методиками першопринципних розрахунків електронних властивостей металів за допомогою побудови рядів теорії збурень за псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії. З практичної точки зору метою курсу є формування у майбутнього фізика системи знань з будови та фізико-хімічних властивостей різного типу матеріалів. Це передбачає виклад закономірностей внутрішньої будови металів, металічних сплавів, полімерів, пластиків, скла та композитних матеріалів, включаючи нанокompозити та газонаповнені металічні сплави (газари), а також фізичні основи методів покращення параметрів, які визначають основні експлуатаційні характеристики. На основі отриманих знань навчити студентів самостійно використовувати вищезгадані методи для теоретичного прогнозування та інтерпретації експерименту.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 1. Якібчук П.М. Фізика металів . Львів, ЛДУ. 2000.

	<p>2. Якібчук П.М. Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з курсу «Фізика металів». Львів, ЛДУ. 2000.</p> <p>3. Мудрий С. І., Штаблавий І. І. Фізичне матеріалознавство, – Львів.: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2012, –418с.</p> <p>Допоміжна:</p> <p>1. Гарнець В.М. Матеріалознавство, Кондор, 2009, 348с.</p> <p>2. Дутка О.І. Матеріалознавство, Кондор, 2009, 156с.</p> <p>Додаткові матеріали також буде запропоновано для кожної теми окремо.</p> <p>Інформаційні ресурси:</p> <p>3. http://www.nbuv.gov.ua/ – Національна бібліотека України імені В.І. Вернадського.</p> <p>4. http://www.lsl.lviv.ua/ - Львівська національна наукова Бібліотека України імені В. Стефаника</p> <p>5. https://lnulibrary.lviv.ua/ - Наукова бібліотека Львівського національного університету імені Івана Франка</p>
Тривалість курсу	два семестри
Обсяг курсу	210 годин, з яких 128 годин аудиторних занять, з них 64 годин лекцій, 64 годин лабораторних занять, та 82 години самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>В результаті вивчення цього курсу студент буде знати: методи побудови базисів, за якими ведеться розклад хвильових функцій електронів провідності; види найпоширеніших локальних та нелокальних модельних потенціалів та псевдопотенціал електрон-іонної взаємодії; методи розрахунку зонної структури з врахуванням спінів та без їх врахування; методи побудови рядів теорії збурень за потенціалом електрон-іонної взаємодії; методи побудови рядів Борна-Грінвуда за часом відгуку системи на зовнішнє збурення. Основні закономірності будови металів та сплавів, їх зв'язок з фізико-хімічними властивостями.</p> <p>Фізичні основи класифікації матеріалів та основні механічні, електричні, магнітні та оптичні властивості наноматеріалів; вплив температури та інших факторів на основні характеристики матеріалів;</p> <p>Фізичні основи металургійних технологій та інших сучасних способів отримання матеріалів;</p> <p>Сфери практичного застосування матеріалів.</p> <p>вміти: оцінювати властивості електронного газу в основному стані, розраховувати його термодинамічні властивості; оцінювати електростатичну провідність, термо-е.р.с. металів; проводити класифікацію твердих тіл на діелектрики, напівпровідники та метали у залежності від особливостей зонної будови таких систем; застосовувати відповідний метод розрахунку зонної структури у залежності від типу досліджуваного об'єкту; проводити розрахунки формфакторів псевдопотенціалів; проводити процедуру екранування локальних та нелокальних модельних потенціалів; вибирати оптимальну модель та метод розрахунку параметрів першопринципних потенціалів та псевдопотенціалів.</p> <p>Застосовувати фундаментальні знання з матеріалознавства до аналізу поведінки металічних, полімерних та інших матеріалів в різних термодинамічних умовах, включаючи і нерівноважні; проводити експериментальні дослідження матеріалів різного типу і</p>

	аналізувати отримані результати; використовувати методи покращення механічних, електричних, магнітних та антикорозійних властивостей матеріалів; вибирати матеріали для конкретних практичних потреб і синтезувати з них нанокompозитні системи різного функціонального призначення.
Ключові слова	Зонна структура, псевдопотенціал, формфактори, термо-е.р.с. металів, матеріалознавство
Формат курсу	Очний
	проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем
Теми	Наведено у табл.1 і табл. 2
Підсумковий контроль, форма	іспит в кінці 8 семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти повинні знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики, квантової механіки, фізики твердого тіла; вміти застосовувати набуті раніше знання з курсів математичного аналізу, диференційних рівнянь, методів математичної фізики, загальної фізики, квантової механіки, статистичної фізики, фізики твердого тіла та комп'ютерних технологій для розв'язку практичних завдань; володіти навиками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференційних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Використовуються такі методи навчання: а) <i>словесні</i> – лекція, пояснення, бесіда, інструктаж (вступний та поточний) під час виконання лабораторних робіт; б) <i>наочні</i> – ілюстрування лекційного матеріалу таблицями, схемами та графіками; в) <i>практичні</i> – виконання лабораторних робіт, що передбачає організацію навчальної роботи для отримання нових знань, перевірки певних наукових гіпотез на рівні досліджень, узагальнень та аналізу та формування вмінь і навичок інтерпретації результатів досліджень різноманітних об'єктів.
Необхідне обладнання	Обладнання навчальної лабораторії, персональний комп'ютер, операційні системи (Windows, Linux), загальнонавчальні комп'ютерні програми, проектор та екран.
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням: • лабораторні/самостійні тощо: 40% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 40 • контрольні заміри (модулі): 10% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 10 • іспит: 50% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 50 Підсумкова максимальна кількість балів 100
Питання до екзамену	1. Методи розрахунку одноелектронних станів квантових систем. 2. Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока. 3. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі. 4. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини. 5. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль. 6. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної

	<p>взаємодії. Обмінно-кореляційні функціонали. Параметричні функціонали.</p> <p>7. Аналітичні та чисельні методи оптимізації геометрії (метод найшвидшого спуску, метод спряжених градієнтів.)</p> <p>8. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля.</p> <p>9. Кластерні методи. $\chi\alpha$ - метод. Кластерне наближення та його застосування.</p> <p>10. Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки.</p> <p>11. Моделювання Кара-Парінелло.</p> <p>12. Моделювання точкових дефектів (вакансії, домішки).</p> <p>13. Метод Монте-Карло. Статистичні ансамблі. Кінетичне Монте-Карло моделювання.</p> <p>14. Чисельні розрахунки кінетики формування моношару.</p> <p>15. Аналіз хімічного зв'язку. Аналіз заселеності за Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду.</p> <p>16. Аналіз хімічного зв'язку на основі розподілу електронної густини. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.</p> <p>17. Спектр уявної частини діелектричної проникності за результатами зонного розрахунку. Розрахунок оптичних спектрів.</p> <p>18. Атомні та пружні характеристики наносистем.</p> <p>19. Розподіли густини станів вуглецевих наноматеріалів.</p> <p>20. Енергетичний спектр низькорозмірних систем в електричному і магнітному полях.</p>
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1

Схема курсу «Фізика металів і матеріалознавство»

Тижні	Тема занять	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1 семестр			
1	Тема 1. Теорія металів Друде. Статична електропровідність металу.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 4 год	1 тиждень
2	Тема 2. Теплопровідність металу. Закон Відемана-Франса.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 4 год	1 тиждень
3	Тема 3. Теорія Зоммерфельда.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
4	Тема 4. Властивості електронного газу в основному стані.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
5	Тема 5. Теорема Блоха. Сфера Фермі.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
6-7	Тема 6. Модель майже вільних електронів.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 3 год	2 тижні
8-9	Тема 7. Модель сильного зв'язку.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 3 год	2 тижні
10	Тема 8. Метод плоских хвиль.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
11	Тема 9. Метод ортогоналізованих плоских хвиль.	Лекції – 2 год,	1 тиждень

		самостійна робота – 3 год	
12	Тема 10. Метод псевдопотенціалу.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
13-14	Тема 11. Метод модельних потенціалів.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
15-16	Тема 12. Обчислення псевдопотенціалів з “перших принципів”.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
2 семестр			
1	Тема 13. Динаміка кристалічної ґратки. Коливання атомів у ґратці.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
2	Тема 14. Лінійна ґратка односортних атомів.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
3-4	Тема 15. Тримірна ґратка. Ґраткова теплоємність.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 3 год	2 тижні
5	Тема 16. Провідність у металах. Термо-е.р.с.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
6	Тема 17. Наближення Айнштайна та Дебая. Ангармонізм.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 3 год	2 тижні
7-8	Тема 18. Магнітні властивості металів. Феромагнетизм.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 3 год	2 тижні
9-10	Тема 19. Модель Хаббарда. Теорія Кондо.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 3 год	2 тижні
11-12	Тема 20. Надпровідність і кінетична температура. Рівняння Лондонів.	Лекції – 4 год, самостійна робота – 4 год	2 тижні
13	Тема 21. Ефект Джозефсона.	Лекції – 2 год, самостійна робота – 3 год	1 тиждень
14-15	Тема 22. Теорія Бардіна-Куппера-Шріффера (БКШ).	Лекції – 4 год, самостійна робота – 3 год	2 тижні
16	Підсумкове	2 год	1 тиждень

Таблиця 2

Теми лабораторних занять

Тижні	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1 семестр			
1,2,3,4	Вступне заняття. Дослідження температурної залежності електроопору металів.	лабораторні заняття– 8 год	4 тижні
5,6,7	Визначення концентраційної залежності електроопору подвійних металевих сплавів.	лабораторні заняття– 6 год	3 тижні
8	Вивчення теплових властивостей металевих сплавів методом диференціального термічного аналізу	лабораторні заняття– 2 год	1 тиждень
9,10,11	Дослідження термоелектричних властивостей металів.	лабораторні заняття– 6 год	3 тижні
12,13,14,15	Вивчення магнітних властивостей металевих сплавів.	лабораторні заняття– 8 год	4 тижні
16	Підсумкове заняття	лабораторні заняття– 2 год	1 тиждень
2 семестр			
1,2,	Основи мікроскопічного аналізу	лабораторні заняття– 4 год	2 тижні

3	Дослідження твердості за Роквеллом	лабораторні заняття– 2 год	1 тиждень
4	Вимірювання мікротвердості	лабораторні заняття- 2 год	1 тиждень
5,6,7	Визначення температур кристалізації металів і сплавів та побудова діаграм стану термічним методом	лабораторні заняття– 6 год	3 тижні
8	Проміжне підсумкова заняття	лабораторні заняття- 2 год	1 тиждень
9,10	Мікроаналіз заліза та сталей в рівноважному стані	лабораторні заняття– 4 год	2 тижні
11,12	Мікроаналіз чавунів	лабораторні заняття– 4 год	2 тижні
13,14	Мікроаналіз кольорових металів та сплавів	лабораторні заняття– 4 год	2 тижні
15	Визначення теплостійкості полімерних матеріалів	лабораторні заняття- 2 год	1 тиждень
16	Підсумкове заняття	лабораторні заняття– 2 год	1 тиждень