

Кафедра фізики твердого тіла

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан фізичного факультету

_____ проф. Якібчук П.М.

“ _____ ” _____ 2018 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ПРОБЛЕМИ ФІЗИКИ НАНОСТРУКТУР

підготовки магістра

з галузі знань 10 Природничі науки

за спеціальністю 105 Прикладна фізика і наноматеріали

фізичного факультет

Робоча програма **Проблеми фізики наноструктур** для студентів за спеціальністю 105 Прикладна фізика і наноматеріали.

Розробник:

Коваленко М.В., канд. фіз.-мат. наук, доцент кафедри фізики твердого тіла

Робочу програму схвалено на засіданні кафедри фізики твердого тіла

Протокол від “ ____ ” _____ 2018 року № ____

Завідувач кафедри фізики твердого тіла

_____ (проф. Капустяник В.Б.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

Ухвалено Вченою радою фізичного факультету

Протокол від “ ____ ” _____ 20__ року № ____

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
		<i>денна форма навчання</i>
Кількість кредитів – 4	галузь знань 10 Природничі науки	Нормативна
Модулів – 1	Спеціальність 105 Прикладна фізика і наноматеріали	<i>Рік підготовки:</i> 5-й
Змістових модулів – 2		<i>Семестр</i>
Загальна кількість годин - 120		9-й <i>Лекції</i>
Тижневих годин для денної форми навчання:		16 год.
<i>Аудиторних:</i>		<i>Практичні</i>
9 семестр – 3 год	Освітньо-кваліфікаційний рівень:	<i>Лабораторні</i>
<i>Самостійної роботи студента:</i>	магістр	32 год.
9 семестр – 4,5 год		<i>Самостійна робота</i>
		72 год.
		<i>Вид контролю: іспит</i>

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Курс «Проблеми фізики наноструктур» є нормативною дисципліною циклу професійно-орієнтованих дисциплін магістрів за спеціальністю 105 «Прикладна фізика і наноматеріали».

Мета: розглянути основні види наноструктур, способи їх отримання та методи дослідження, структурні, механічні, оптичні, теплові, електронні, магнітні властивості різних типів наноструктур та їхнє практичне застосування у вигляді наноматеріалів та технічних пристроїв, що покладаються в основу нанотехнологій.

Завдання: ознайомити студентів з основними фізико-хімічними властивостями різних видів нанорозмірних об'єктів, а також із способами їх отримання, методами дослідження та практичним застосуванням.

В результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати основні види наноструктур, їх основні фізико-хімічні властивості, способи отримання, методи дослідження, практичне використання;

вміти: використовувати отримані знання на практиці при розв'язанні завдань теоретичного та прикладного характеру.

Для вивчення дисципліни необхідні знання одержані при вивченні загальних та спеціальних дисциплін спеціальності, насамперед “Механіки”, “Молекулярної фізики”, “Електрики”, “Оптики”, “Атомної фізики”, “Термодинаміки і статистичної фізики”, “Фізики твердого тіла”, “Фізики нанорозмірних об'єктів”.

3. Програма навчальної дисципліни

МОДУЛЬ 1

Змістовий модуль 1. Методи дослідження та фізичні властивості нанорозмірних об'єктів

Вступ

Основні поняття й визначення наук про наносистеми і нанотехнології. Історія виникнення нанотехнологій і наук про наносистеми. Міждисциплінарність і мультидисциплінарність. Приклади нанооб'єктів і наносистем, їхні особливості й технологічні застосування. Об'єкти й методи нанотехнологій. Принципи й перспективи розвитку нанотехнологій.

Тема 1. Особливості фізичних взаємодій у наномасштабах.

Роль об'єму й поверхні у фізичних властивостях нанорозмірних об'єктів. Механіка нанооб'єктів. Механічні коливання й резонанси в нанорозмірних системах.

Оптика нанооб'єктів. Співвідношення довжини хвилі світла й розмірів наночастинок. Відмінності у поширенні світла в однорідних й наноструктурованих середовищах.

Тема 2. Властивості електронного спектру нанорозмірних об'єктів.

Квантова механіка наносистем. Квантоворозмірні ефекти в нанооб'єктах. Квазічастинки у твердому тілі та у наноструктурованих матеріалах.

Квантові точки. Нитковидні кристали, волокна, нанотрубки, тонкі плівки і гетероструктури.

Квантові ефекти в наноструктурах у магнітному полі. Електропровідність нанооб'єктів. Поняття балістичної провідності. Одноелектронне тунелювання і кулонівська блокада.

Оптичні властивості квантових точок. Спінтроніка нанооб'єктів.

Змістовий модуль 2. Використання комп'ютерного моделювання для дослідження наноструктур та матеріалів на їх основі.

Тема 1. Метод функціоналу густини

Самоузгоджене поле, метод Хартрі-Фока. Локальне наближення для обмінного потенціалу. Типи базисних функцій і матричних елементів оператора Фока. Теорема і варіаційний принцип Хоенберга-Кона. Теорія Томаса-Фермі. Принцип Кона-Шема і наближення локальної густини. Поправки до наближення локальної густини. Метод псевдопотенціалу. Формалізм плоских хвиль. Сучасні методи врахування електронної кореляції (вихід за рамки методу самоузгодженого поля): варіанти методу конфігураційної взаємодії.

Тема 2. Напівемпіричні методи розрахунку

Метод молекулярних орбіталей Хюккеля. Розширений метод Хюккеля. Метод сильного зв'язку.

Тема 3. Емпіричні методи розрахунку

Емпіричні потенціали і метод молекулярної динаміки. Парні потенціали. Багаточастинкові потенціали. Моделювання Кара-Парінілло. Зв'язок розрахованих параметрів та експериментально вимірюваних характеристик.

Тема 4. Статистичні методи розрахунку

Метод Монте-Карло. Статистичні ансамблі. Кінетичне Монте-Карло моделювання. Міграція атомів по поверхні як процес випадкового блукання. Енергія активації і частота стрибків. Ймовірності елементарних подій. Основні алгоритми кінетичного Монте-Карло моделювання.

Тема 5. Аналіз результатів розрахунків властивостей наноструктур

Підходи до аналізу результатів розрахунків енергетичної структури квантових систем. Електронна структура твердих тіл біля поверхні. Стани Тамма і Шоклі. Основні пакети програм для виконання вчислювальних задач у фізиці наноструктур.

Тема 6. Топологічне моделювання наноструктур

Молекулярне конструювання. Комп'ютерна візуалізація нанооб'єктів. Аналіз заселеності за Маллікеном і альтернативні схеми розподілу заряду. Топологія електронної густини, деформаційна електронна густина, лапласіан електронної густини.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Усього	Денна форма				
		у тому числі				
1	2	л	п	лаб	інд	ср
	3	4	5	6	7	
МОДУЛЬ 1						
Змістовий модуль 1. Методи дослідження та фізичні властивості нанорозмірних об'єктів						
Тема 1. Особливості фізичних взаємодій у наномасштабах	14	2		4		8
Тема 2. Властивості електронного спектру нанорозмірних об'єктів	14	2		4		8
<i>Разом – зм. модуль 1</i>	28	4		8		16
Змістовий модуль 2. Використання комп'ютерного моделювання для дослідження наноструктур та матеріалів на їх основі						
Тема 1. Метод функціоналу густини	14	2		4		8
Тема 2. Напівемпіричні методи розрахунку	14	2		4		8
Тема 3. Емпіричні методи розрахунку	16	2		4		10
Тема 4. Статистичні методи розрахунку	16	2		4		10
Тема 5. Аналіз результатів розрахунків властивостей наноструктур	16	2		4		10
Тема 6. Топологічне моделювання наноструктур	16	2		4		10
<i>Разом – зм. модуль 2</i>	92	12		24		56
Усього годин	120	16		32		72

5. Темі семінарських занять

Семінарських занять в курсі не передбачено

6. Темі практичних занять

Практичні заняття в курсі не передбачені.

7. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
I семестр		
1	Вступне заняття	1
2	Розрахунок з перших принципів параметрів ґратки на прикладі напівпровідникової сполуки.	3
3	Комп'ютерне моделювання зонно-енергетичної структури та густини станів наноматеріалів	4
4	Моделювання процесу адсорбції молекул на поверхні напівпровідникової сполуки	4
5	Моделювання та розрахунки оптичних властивостей наноматеріалів	4
6	Розрахунок еластичних констант напівпровідникових кристалів.	4
7	Розрахунки фононних спектрів феромагнітних сполук	4
8	Комп'ютерне моделювання густини заряду наноматеріалів	4
9	Моделювання електронного транспорту в наноматеріалі	3
10	Заключне заняття	1
	Разом	32

8. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
I семестр		
1	Енергетичний спектр низькорозмірних систем	6
2	Неорганічні та органічні функціональні наноматеріали	6
3	Оптичні властивості нанорозмірних структур	6
4	Методи дослідження й діагностика наноб'єктів і наносистем.	8
5	Електрооптика нанорозмірних напівпровідників	8
6	Фонони в наноструктурах та механічні властивості наноструктурних об'єктів	8
7	Вуглецеві наноматеріали і наноструктури в лазерних технологіях	8
8	Каталіз і нанотехнології.	6
9	Пристрої й прилади нанофотоніки. Фотонні кристали.	8
10	Магнітні нанопристрої для запису та зберігання інформації. Сенсорні елементи мікро- і наносистемної техніки.	8
	Разом	72

10. Методи контролю

Контроль засвоєння матеріалу включає поточний контроль (проміжний контроль за двома змістовими модулями – 10 балів), оцінку відповідей та роботи на лабораторних заняттях та самостійна робота (4×10=40 балів) — разом за семестр 50 балів; іспит — 50 балів. Сумарна оцінка за семестр виставляється за 100-бальною шкалою.

11. Розподіл балів, що присвоюються студентам

Приклад розподілу балів, які отримують студенти (для заліку)

Поточне тестування та самостійна робота								Робота на лабораторних	Підсумковий тест (іспит)	Сума
Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2								
T1	T2	T1	T2	T3	T4	T5	T6			
2	2	4	2	2	2	2	4	30	50	100

Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Оцінка ЄКТС	Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
A	90 – 100	відмінно	зараховано
B	81-89	добре	
C	71-80		
D	61-70	задовільно	
E	51-60		
FX	21-50	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
F	0-20	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

13. Рекомендована література

Базова

1. В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабіч, А.В. Коротун, А.П. Шпак "Нанофізика і нанотехнології", Запоріжжя: ЗНТУ, 2011. - 380 с.
2. А.П.Шпак, Ю.А.Куницький, О.О.Коротченко, С.Ю.Смик. Квантові низькорозмірні системи. К.: Академперіодика, 2003.- 310 с.
3. [Д.М.Заячук. Низькорозмірні структури і надгратки. НУ „Львівська політехніка”, 2006. – 220 с.](#)
4. [R.Martin Electronic Structure. Basic theory and practical methods. – Cambridge – 2004. – 642 p.](#)
5. [Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. | Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.](#)
6. [Н.Ф.Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М., Мир, Изд-во Моск. ун-та, 2001.](#)
7. [Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. - М.: Наука, 1995.-144 с.](#)
8. Стрижак П.Є. Квантова хімія : Підруч. для студ. ВНЗ. – К. : Вид. дім "Києво-Могилянська академія", 2009. – 458 с.
9. K. Varga and J. A. Driscoll, “Computational Nanoscience, Applications for Molecules, Clusters, and Solids”, Cambridge University Press, Cambridge, 2011.
10. [D. Marx & J. Hutter, “Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods”, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.](#)

Допоміжна

1. Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы. М.: Физматлит. 2000.
2. Вудраф Д., Делчар Т. Современные методы исследования поверхности. М.: Мир, 1989.

14. Інформаційні ресурси

1. www.nanohub.org
2. www.znannya.org
3. <http://nauka.name/>
4. www.skybox.net.ua
5. www.nbu.gov.ua/portal/natural/nano/