

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
Інститут фізики НАН України



ЗАТВЕРДЖУЮ

Директором Інституту фізики НАН
України, член-кор. НАНУ, д.ф.-м.н.

 **М.В. Бондар**
(підпис)

« 27 » жовтня 2023 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ВК.10

Субнаноматеріали: атомарні кластери

для аспірантів

спеціальності: 104 Фізика і астрономія

третього (освітньо-наукового) рівня
вищої освіти – доктор філософії

Київ - 2023

1. Загальні відомості

Найменування показників	Характеристика дисципліни за денною формою навчання
Вид дисципліни	вибіркова
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Загальний обсяг кредитів / годин	4/120
Курс	2
Семестр	2
Кількість змістових модулів з розподілом	1
Обсяг кредитів	4
Обсяг годин, В тому числі:	120
Лекції	30
Практичні заняття	15
Самостійна робота	75
Форма підсумкового контролю	екзамен

2. Мета, завдання та очікувані результати навчальної дисципліни

Робоча програма навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери» є нормативним документом, який розроблений на основі освітньо-наукової програми, далі ОП, (затверджена Вченою радою Інституту фізики НАН України, протоколом № 10 від 26 жовтня 2023 року) підготовки здобувача третього рівня відповідно до навчального плану спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Передумова вивчення. Навчальний курс ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери» є складовою циклу професійної підготовки фахівців третього освітньо-кваліфікаційного рівня “доктор філософії”. Програма курсу орієнтована на аспірантів, які самостійно або під керівництвом наукового керівника планують та здійснюють наукові дослідження відповідно до планів навчання у аспірантурі. Курс розроблений з орієнтацією як на аспірантів, які спеціалізуються у області фізики твердого тіла, так і на слухачів, які спеціалізуються у інших напрямках фізики та астрономії.

Мета навчальної дисципліни. ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»: ознайомити студентів з фізичними принципами будови кластерів, особливостями їхньої структури, основними експериментальними методами виготовлення і дослідження кластерів, обчислювальними методами моделювання їхньої структури і властивостей та навчити застосовувати ці методи в науковій роботі.

Зміст навчальної дисципліни. Теоретичні та практичні знання, набуті при вивченні дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери» формують систематичних знань з розділу фізики, що вивчає основи будови речовини на проміжному рівні між молекулами і твердим тілом — на рівні атомарних кластерів.

Предметом навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери» є гіпотези, теоретичні моделі та експериментальні результати у галузі фізики твердого тіла, основи будови речовини на проміжному рівні між молекулами і твердим тілом, тощо.

Основними завданнями навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери» є формування базису знань в межах матеріалу, що вивчається. Дисципліна готує аспірантів до сприймання матеріалу інших спецкурсів, передбачених програмою спеціалізації.

Фахові програмні результати навчання (вимоги до знань та вмінь)

В результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен

Знати:

основні принципи будови кластерів, причини виникнення і особливості структури “магічних” кластерів, їхні основні фізичні властивості, експериментальні методи дослідження і комп’ютерні способи моделювання кластерів.

Уміти:

застосувати набуті знання в науково-дослідних і навчальних установах та на виробничих підприємствах.

Завданням навчальної дисципліни (відповідно до переліку ОП) ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери» набути

компетентності:

Загальні: ЗК1,ЗК2, ЗК3.

Спеціальні: СК1, СК2, СК5, СК6

Програмні результати навчання: РН1, РН4, РН5, РН6, РН7, РН8, РН9.

3. Тематичний план

(структура залікового кредиту)

з навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

(2 курс – 2 семестр)

№ теми	Зміст	Лекції, год.	Практичні, год.	Самостійна робота, год.	Разом, год.
1	тема 1. Вступ. Актуальність дослідження кластерів. Термінологія.	3	0	9	12
2	Тема 2. Огляд методів виготовлення і дослідження кластерів. Практичне заняття 1. Фемтосекундна лазерна абляція в рідині. Практичне заняття 2. Трансмісійна електронна мікроскопія. Практичне заняття 3. Динамічне розсіяння світла.	4	6	10	19
3	Тема 3. Комп'ютерне моделювання кластерів. Практичне заняття 4. Діаграми Шлегеля. Квантово-хімічні методи обчислень. Алгоритми пошуку стабільних кластерів. Програмні засоби для моделювання і квантово-хімічних обчислень кластерів.	3	3	9	16
4	Тема 4. Особливості структури кластерів. Серії «магічних» кластерів простих речовин і бінарних сполук. Методики класифікації кластерів: многогранники Голдберга, система Конвея.	4	0	10	14

№ теми	Зміст	Лекції, год.	Практичні, год.	Самостійна робота, год.	Разом, год.
5	<p>Тема 5. Кластери і наночастинки сполук A2B6. Наночастинки CdSe. Квантово-розмірний ефект. «Магічні» кластери A2B6. Структура заповнених оболонки. Нанопластинки A2B6. Особливості оптичних спектрів нанопластинок.</p> <p>Практичне заняття 5. Приготування “магічних” кластерів CdSe.</p> <p>Практичне заняття 6. Вимірювання спектрів поглинання і люмінесценції кластерів CdSe.</p>	4	6	9	19
6	<p>Тема 6. Особливості кластерів ZnO. Особливості мас-спектрів оксиду цинку. Прекурсори для кластерів оксиду цинку. «Магічні» кластери оксиду цинку. Структура вкладених оболонки. Тетраподи.</p>	4	0	9	13
7	<p>Тема 7. Кластери елементів IV групи. Кластери вуглецю. Кластери кремнію і германію. Мас-спектри галогенідів кремнію і германію. Серії кластерів кремнію і германію.</p>	4	0	10	14
8	<p>Тема 8. Перовскітні матеріали. Структура перовскітів. Оксидні перовскіти. Галоїдні перовскіти. Толерантність до дефектів. Низькорозмірні галоїдні перовскіти.</p>	4	0	9	13
Всього		30	15	75	120

Методичне забезпечення навчальної дисципліни забезпечують:

опорні конспекти лекцій, бібліотечні посібники зі списку рекомендованої літератури, електронні посібники, мультимедійні презентації, діючі нормативно-правові законодавчі акти України, довідково-інформаційні інтернет-джерела тощо.

4. Зміст навчальної дисципліни

ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

- 1 **Тема 1.** Вступ.
Актуальність дослідження кластерів. Термінологія. Точки дотику тем досліджень аспірантів і тематики курсу.
Література: 7, 10.
- 2 **Тема 2.** Методики виготовлення і дослідження кластерів.
Основні методи виготовлення кластерів: імпульсна лазерна абляція, хімічний синтез.
Експериментальні методики дослідження кластерів: часопротитна мас-спектроскопія, трансмісійна і сканувальна електронна мікроскопія, мікроскопія атомних сил, електронна і рентгенівська дифракція, динамічне розсіяння світла, оптична спектроскопія.
Література: Д4.
- 3 **Тема 3.** Комп'ютерне моделювання кластерів.
Діаграми Шлегеля. Квантово-хімічні методи обчислень. Алгоритми пошуку стабільних кластерів. Програмні засоби для моделювання і квантово-хімічних обчислень кластерів.
Література: 1, Д7-Д10.
- 4 **Тема 4.** Структура кластерів.
Особливості будови кластерів. Серії «магічних» кластерів простих речовин і бінарних сполук. Методики класифікації кластерів: многогранники Голдберга, система Конвея.
Література: 8, Д2, Д5, Д6.
- 5 **Тема 5.** Кластери і наночастинки сполук А2В6.
Наночастинки CdSe. Квантово-розмірний ефект. «Магічні» кластери А2В6. Структура заповнених оболонки. Нанопластинки А2В6. Особливості оптичних спектрів нанопластинок.
Література: 9, 5, 4, Д12.
- 6 **Тема 6.** Особливості кластерів ZnO.
Особливості мас-спектрів оксиду цинку. Прекурсори для кластерів оксиду цинку. «Магічні» кластери оксиду цинку. Структура вкладених оболонки. Тетраподи.
Література: 1, 2, Д3.
- 7 **Тема 7.** Кластери елементів IV групи.
Кластери вуглецю. Кластери кремнію і германію. Мас-спектри галогенідів кремнію і германію. Серії кластерів кремнію і германію.
Література: 7, 8, 3, Д1, Д11.
- 8 **Тема 8.** Перовскітні матеріали.
Структурна будова перовскітів. Оксидні перовскіти. Галоїдні перовскіти. Толерантність до дефектів. Низькорозмірні галоїдні перовскіти.
Література: 6, Д13-Д15.

5. Практичні заняття

з навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

Практичне закріплення лекційного матеріалу та наукові доповіді аспіранта пов'язані з темами лекцій і є частиною змісту дисципліни.

6. Самостійна робота

з навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

№	Зміст самостійної роботи аспірантів	Обсяг, годин
1.	Вивчення матеріалу лекції	30
2.	Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення	45
Усього за навчальну дисципліну		75

7. Методи викладання:

з навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

У процесі викладання дисципліни використовуються такі методи:

- 1) методи організації та здійснення навчально-пізнавальної діяльності (бесіда, лекція; ілюстрація; практичні роботи; самостійна робота студентів);
- 2) методи стимулювання й мотивації навчально-пізнавальної діяльності (навчальні дискусії, модульно-рейтингова система знань);
- 3) методи контролю (самоконтролю, взаємоконтролю), корекції (самокорекції, взаємокорекції) за ефективністю навчально-пізнавальної діяльності.

8. Рейтингова система оцінювання

з навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

Основними формами організації контролю у процесі вивчення студентами даної дисципліни є індивідуальна, групова та фронтальна перевірка знань, вмінь та навичок студентів (усна та письмова). Рейтинг аспіранта складається з наступних отриманих балів:

1. Експрес-контроль – 20 балів. (усне опитування чи самостійні роботи під час навчального процесу)
2. Практичні заняття та самостійна робота – 40 балів.
3. Екзамен – 40 балів.

Заохочувальні та штрафні бали

1. При відсутності на лекції/практичному занятті без поважних причин -2 бали
2. Подана в журнал стаття чи виступ на конференції за темою курсу +10 балів.

Сума як штрафних так і заохочуваних балів розраховується за формулою $0,1R$, де R – загальна кількість балів, і не має перевищувати в цілому 10 балів.

Шкала рейтингів.

Загальна кількість балів, яку аспіранта може отримати під час вивчення курсу складається із суми вагових балів отриманих протягом вивчення дисципліни

$$R=20+40+40=100 \text{ (балів)}$$

Шкала відповідності оцінок

Рейтингова оцінка	Значення оцінки	Рейтинг у відсотках, %
A	Відмінно – відмінний рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з, можливими незасними недоліками.	90-100
B	Дуже добре – достатньо високий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу без суттєвих (грубих) помилок.	82-89
C	Добре – добрий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з незначною кількістю помилок.	75-81
D	Задовільно – посередній рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу із значною кількістю недоліків, достатній для подальшого навчання або ж професійної діяльності.	69-74
E	Достатньо - мінімально можливий допустимий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу.	60-68
FX	Незадовільно з можливістю повторного складання – незадовільний рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з можливістю повторного перескладання після самостійного доопрацювання.	35-59
F	Незадовільно з з обов'язковим повторним вивченням курсу – низький рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу, що вимагає повторного вивчення матеріалів курсу.	1-34

9. Орієнтовний перелік екзаменаційних питань з навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

1. ТЕМ. Дифракція електронів. Формула Шеррера.
2. Кластери лужних металів: оболонки електронів і атомів.
3. Формула Ейлера для многогранників.
4. Методика динамічного розсіяння світла.
5. “Магічні числа” і структура кластерів ZnO.
6. Особливості спектра поглинання нанопластинок A_2B_6 .
7. Структура галоїдних перовскітів, від 3D до 0D.
8. Оптичні властивості свинцево-галоїдних перовскітів.
9. Часопрольотна мас-спектрометрія.
10. Довжини зв'язків у кластерах в порівнянні з об'ємним кристалом: більші чи менші? Чому?
11. Чому для вуглецевого фулерена пасиватори не потрібні, а для кремнієвого потрібні?
12. XRD. Формула Шеррера.
13. Чи можна відрізнити в мас-спектрі кластери Ag_{13}^+ і Ag_{26}^{2+} ? Чому / як?
14. Що означає «толерантний до дефектів напівпровідник»?
15. Електронна мікроскопія.
16. Структура вуглецевих “цибулин”, формула оболонок.
17. Діаграми Шлегеля.
18. Зондова мікроскопія.
19. “Магічні числа” і структура кластерів CdSe.
20. Вплив розміру на оптичні властивості напівпровідникових наночастинок.

10.Рекомендована література

з навчальної дисципліни ВК.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

Основна

1. C. R. A. Catlow, S. T. Bromley, S. Hamad, M. Mora-Fonz, A. A. Sokol, S. M. Woodley. Modelling nano-clusters and nucleation. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2010, **12**, 786.
2. A. Dmytruk, I. Dmitruk, Y. Shynkarenko, R. Belosludov, A. Kasuya. Zinc oxide nested shell magic clusters as tetrapod nuclei. *RSC Adv.* 2017, **7**, 21933.
3. A. Dmytruk. Atomic composition, structure, and vibrational spectra of germanium clusters terminated by iodine. *J. Cluster Sci.* 2015, **26**, 877.
4. S. Ithurria, M. D. Tessier, B. Mahler, R. P. S. M. Lobo, B. Dubertret, Al. L. Efros. Colloidal nanoplatelets with two-dimensional electronic structure. *Nature Materials* 2011, **10**, 936.
5. A. Kasuya, R. Sivamohan, Yu. A. Barnakov, I. M. Dmitruk, T. Nirasawa, V. R. Romanyuk, V. Kumar, S. V. Mamykin, K. Tohji, B. Jeyadevan, K. Shinoda, T. Kudo, O. Terasaki, Z. Liu, R. V. Belosludov, V. Sundararajan, Y. Kawazoe. Ultra-stable nanoparticles of CdSe revealed from mass spectrometry. *Nature materials* 2004, **3**, 99.
6. M. V. Kovalenko, L. Protesescu, M. I. Bodnarchuk. Properties and potential optoelectronic applications of lead halide perovskite nanocrystals. *Science* 2017, **358**, 745.
7. H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley. C60: Buckminsterfullerene. *Nature* 1985, **318**, 162.
8. T. P. Martin. Shells of atoms. *Phys. Reports* 1996, **273**, 199.
9. C. M. Murray, D. J. Norris, M. G. Bawendi. Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E= sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites. *J. Am. Chem. Soc.* 1993, **115**, 8706.
10. A. Rosen. A sightseeing tour in the world of clusters — serendipity and scientific progress. *J. Mol. Graphics Modell.* 2001, **19**, 236.

Додаткова

- Д1.D. Ugarte. Curling and Closure of Graphitic Networks Under Electron-Beam Irradiation. *Nature* 1992, **359**, 707.
- Д2.A. Levskaya. polyHédronisme v0.2. <http://levskaya.github.io/polyhedronisme/>
- Д3.Z. L. Wang. Nanostructures of zinc oxide. *Mater. Today* 2004, **7**, 26.
- Д4.ISOPRO (<http://sites.google.com/site/isoproms/home>)
- Д5.M. Goldberg. A Class of Multi-Symmetric Polyhedra. *Tohoku Math. J.* 1937, **43**, 104.
- Д6.J. H. Conway, H. Burgiel, C. Goodman-Strass. The Symmetries of Things; A. K. Peters, Eds.; CRC Press, Taylor and Francis: New York, 2008, p. 448.
- Д7.G. A. Andrienko. ChemCraft. <http://www.chemcraftprog.com>
- Д8.B. M. Bode, M. S. Gordon. Macmolplt: a graphical user interface for GAMESS. *J. Mol. Graphics Mod.* 1998, **16**, 133.
- Д9.AVOGADRO: an open-source molecular builder and visualization tool. Version 1.0.3. <http://avogadro.openmolecules.net/>
- Д10. <https://orcaforum.cec.mpg.de/>
- Д11. A. Dmytruk, Y.-S. Park, A. Kasuya, H. Kikuchi, M. Takahashi, Y. Kawazoe, A. Watanabe. Silicon Subiodide Clusters. *J. Nanosci. Nanotech.* 2007, **7**, 3788.
- Д12. S. V. Gaponenko. Optical properties of semiconductor nanocrystals (Cambridge Studies in Modern Optics). Cambridge: Cambridge University Press. doi:10.1017/CBO9780511524141
- Д13. C. C. Stoumpos, M. G. Kanatzidis. Halide Perovskites: Poor Man's High-Performance Semiconductors. *Adv. Mater.* 2016, **28**, 5778–5793.
- Д14. Y.-F. Li, J. Feng, H.-B. Sun. Perovskite quantum dots for light-emitting devices. *Nanoscale*, 2019, **11**, 19119-19139.
- Д15. L. Protesescu, S. Yakunin, M. I. Bodnarchuk, F. Krieg, R. Caputo, C. H. Hendon, R. X. Yang, A. Walsh, M. V. Kovalenko. Nanocrystals of Cesium Lead Halide Perovskites (CsPbX₃, X = Cl, Br, and I): Novel Optoelectronic Materials Showing Bright Emission with Wide Color Gamut. *Nano Lett.* 2015, **15**, 3692–3696.