

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)

«25» лютого 2021 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ДВА.10

Субнаноматеріали: атомарні кластери

для аспірантів

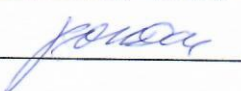
спеціальності: 104 Фізика і астрономія

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

Київ - 2020

Розробник:

с.н.с, відділу фотонних процесів Інституту фізики НАНУ

доктор. фіз.-мат. наук,  /А.М. Дмитрук/**Робочу програму узгоджено науково-методичною радою**Протокол № 1 від 30.09 2021р.Головою науково-методичної ради  /М.В. Бондар/**Робочу програму затверджено Вченою радою Інституту фізики НАНУ**Протокол № 10 від 21.10. 2021р.Голова Вченої ради  /М.В. Бондар/**Робочу програму погоджено з гарантом освітньо-наукової програми зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія» 21.10. 2021р.**Гарант освітньої програми  /М.В. Бондар/**Пролонговано Вченою радою Інституту фізики НАН України:**

навчальні роки пролонгації	Голова Вченої ради ІФ НАН України	підпис	№ протоколу	дата протоколу
20____/20____				
20____/20____				
20____/20____				
20____/20____				

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 ДВА.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери» є нормативним документом, який розроблений на основі освітньо-наукової програми, далі ОП, (затверджена Вченою радою Інституту фізики НАН України, протоколом № від 20 року) підготовки здобувача третього рівня відповідно до навчального плану спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Передумова вивчення. Навчальний курс ДВА.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. ДВА.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 ДВА.05.08 «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 ДВА.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 ДВА.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:

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

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

Загальні: ЗК1,ЗК2, ЗК3, ЗК4, ЗК5, ЗК6, ЗК7, ЗК8.

Фахові: ФК1, ФК2, ФК3, ФК7

Програмні результати навчання ПРН2, ПРН3, ПРН4, ПРН5, ПРН6, ПРН7, ПРН8, ПРН9, ПРН10, ПРН11, ПРН12, ПРН13, ПРН14.

3. Тематичний план

(структура залікового кредиту)

з навчальної дисципліни ДВА.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 розсіювання світла.	3	6	10	19
3	Тема 3. Часопролітна мас-спектроскопія. 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.	4	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	Тема 5. Кластери і наночастинки сполук A2B6. Наночастинки CdSe. Квантово-розмірний ефект. «Магічні» кластери A2B6. Структура заповнених оболонок. Нанопластинки A2B6. Особливості оптичних спектрів нанопластинок. Практичне заняття 5. Приготування прекурсорів для кластерів CdSe. Практичне заняття 6. Приготування “магічних” кластерів CdSe. Динамічне розсіяння світла. Вимірювання спектрів поглинання. Практичне заняття 7. Вимірювання спектрів люмінесценції кластерів CdSe.	4	6	9	19
6	Тема 6. Особливості кластерів ZnO. Особливості мас-спектрів оксиду цинку. Прекурсори для кластерів оксиду цинку. «Магічні» кластери оксиду цинку. Структура вкладених оболонок. Тетраподи.	4	0	9	13
7	Тема 7. Кластери елементів IV групи. Кластери вуглецю. Кластери кремнію і германію. Мас-спектри галогенідів кремнію і германію. Серії кластерів кремнію і германію.	4	0	10	14
8	Тема 8. Перовскітні матеріали. Структура перовскітів. Оксидні перовскіти. Галоїдні перовскіти. Толерантність до дефектів. Низькорозмірні галоїдні перовскіти.	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

ДВА.05.10 «Субнаноматеріали: атомарні кластери»

- Тема 1.** Вступ.
Актуальність дослідження кластерів. Термінологія. Точки дотику тем досліджень аспірантів і тематики курсу.
Література: 7, 10.
- Тема 2.** Методики виготовлення і дослідження кластерів.
Основні методи виготовлення кластерів: імпульсна лазерна абляція, хімічний синтез.
Експериментальні методики дослідження кластерів: часопротітна мас-спектроскопія, трансмісійна і сканувальна електронна мікроскопія, мікроскопія атомних сил, електронна і рентгенівська дифракція, динамічне розсіювання світла, оптична спектроскопія.
Література: Д4.
- 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-Д11.
- 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.
- Тема 5.** Кластери і наночастинки сполук A₂B₆.
Наночастинки CdSe. Квантово-розмірний ефект. «Магічні» кластери A₂B₆. Структура заповнених оболонок. Нанопластинки A₂B₆. Особливості оптичних спектрів нанопластинок.
Література: 9, 5, 4, Д13.
- Тема 6.** Особливості кластерів ZnO.
Особливості мас-спектрів оксиду цинку. Прекурсори для кластерів оксиду цинку. «Магічні» кластери оксиду цинку. Структура вкладених оболонок. Тетраподи.
Література: 1, 2, Д3.
- 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, Д12.
- Тема 8.** Перовскітні матеріали.
Структурна будова перовскітів. Оксидні перовскіти. Галоїдні перовскіти. Толерантність до дефектів. Низькорозмірні галоїдні перовскіти.
Література: 6, Д14-Д16.

5. Практичні заняття

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

У процесі викладання дисципліни використовуються такі методи:

- 1) методи організації та здійснення навчально-пізнавальної діяльності (бесіда, лекція; ілюстрація; лабораторні роботи, реферати; 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 ДВА.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 незнасними 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.	60-100
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 ДВА.05.08 «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 defect-tolerant 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 ДВА.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, 745–750.
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

- D. Ugarte. Curling and Closure of Graphitic Networks Under Electron-Beam Irradiation. *Nature* 1992, **359**, 707.
- A. Levskaya. polyHédronisme v0.2. <http://levskaya.github.io/polyhedronisme/>
- Z. L. Wang. Nanostructures of zinc oxide. *Mater. Today* 2004, **7**, 26.
- ISOPRO (<http://sites.google.com/site/isoproms/home>)
- M. Goldberg. A Class of Multi-Symmetric Polyhedra. *Tohoku Math. J.* 1937, **43**, 104.
- 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.
- G. A. Andrienko. ChemCraft. <http://www.chemcraftprog.com>
- B. M. Bode, M. S. Gordon. Macmolplt: a graphical user interface for GAMESS. *J. Mol. Graphics Mod.* 1998, **16**, 133.
- AVOGADRO: an open-source molecular builder and visualization tool. Version 1.0.3. <http://avogadro.openmolecules.net/>
- A. A. Granovsky, FIREFLY version 8.0.0, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)
- <https://orcaforum.cec.mpg.de/>
- A. Dmytruk, Y.-S. Park, A. Kasuya, H. Kikuchi, M. Takahashi, Y. Kawazoe, A. Watanabe. Silicon Subiodide Clusters. *J. Nanosci. Nanotech.* 2007, **7**, 3788.
- S. V. Gaponenko. Optical properties of semiconductor nanocrystals (Cambridge Studies in Modern Optics). Cambridge: Cambridge University Press. doi:10.1017/CBO9780511524141
- C. C. Stoumpos, M. G. Kanatzidis. Halide Perovskites: Poor Man's High-Performance Semiconductors. *Adv. Mater.* 2016, **28**, 5778–5793.
- Y.-F. Li, J. Feng, H.-B. Sun. Perovskite quantum dots for light-emitting devices. *Nanoscale*, 2019, **11**, 19119–19139.
- 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.