НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича

ЗАТВЕРДЖЕНО:
В.о. директора ІПМ НАН України
Чл.-кор. НАН України
_____ Г.А.Баглюк

СХВАЛЕНО:
Вченою радою ІПМ НАН України

Протокол №_6_ від 24 жовтня 2023 р.

Силабус з навчальної дисципліни
«Електронна структура і властивості твердих тіл»,
складається в межах ОПН підготовки доктора філософії
третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти
для здобувачів за спеціальністю:
105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

Київ – 2023

1. Загальна характеристика курсу

Назва дисципліни	«Електронна структура та властивості твердих тіл»
Адреса викладання дисципліни	вул. Омеляна Пріцака (Кржижановського), 3, Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ, 03142, Україна
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Відділ «Фізичного матеріалознавства тугоплавких сполук»
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 - «Природничі науки», 105 - «Прикладна фізика та наноматеріали»
Викладачі дисципліни	д.ф.-м.н., ст. н. співр., зав.від. В.І. Іващенко
Контактна інформація викладачів	тел. 050-1442687 e-mail: ivashchenko@icnanotox.org
Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються	В дні лекцій за попередньою домовленістю
Інформація про дисципліну	Курс надає слухачам додаткову інформацію про електронну будову та пов'язаною з нею властивостями твердих тіл. Акцент зроблено на вивченні зонної структури, поверхні Фермі, енергозонних методів розрахунків та фазових діаграм, розрахованих «із перших принципів». Отримані знання допоможуть слухачам розуміти більш глибше властивості матеріалів виходячи з особливостей їх електронної структури (магнітні, кінетичні, пружні, міцностні та інші), їх стабільності залежно від складу і температури.
Коротка анотація дисципліни	Дисципліна «Електронна структура і властивості твердих тіл» є дисципліною за вільним вибором аспірантів зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» для освітньої програми підготовки доктора філософії, яка викладається в Інституті проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України в 4 семестрі в обсязі 1 кредиту (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Мета та цілі дисципліни	Метою і завданням навчальної дисципліни «Електронна структура і властивості твердих тіл» є опанування теоретичними знаннями для розуміння і інтерпретації властивостей твердих тіл на основі їх електронної структури.
Вимоги навчальної дисципліни	Курс є дисципліною за вільним вибором аспірантів. Обсяг курсу – 1 кредит ECTS, 20 год аудиторних занять, з них 10 год лекційних занять і 10 год практичних занять, та 10 год самостійної роботи (очна форма навчання). Вивчення наукової дисципліни вимагає обов'язкове відвідування аудиторних занять, активну участь в обговорені питань, якісне і своєчасне виконання завдань самостійної роботи, а також участь у всіх видах контролю.
Підсумкова форма контролю знань	Залік
Очікувані результати навчання	*Після завершення цього курсу студент буде:* - ***знати:*** Приципи формування енерго-зонної структури матеріалів, її вплив на формування структурних і механічних

	властивостей. - ***вміти:*** застосувати отримані знання для інтерпретації отриманих дисертантами теоретичних і експериментальних результатів виходячи з особливостей електронної будови об'єктів що досліджуються.
Ключові слова	*Зони Бріллюена, енергетичні зони, щільності електронних станів, методи розрахунків, електронні властивості, стабільність, механічні властивості*
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань зі спеціальних дисциплін (глибинні знання зі спеціальності) та знань з дисциплін, що розвивають загальнонаукові компетентності, які вивчають на першому та другому році навчання в аспірантурі.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентація, лекції, дискусія
Необхідне обладнання	Мультимедійне обладнання

2. План викладання дисципліни

Тема, план	Кількість годин			
	усього	у тому числі		
		аудиторні	практичні	Самостійна робота
Тема 1 «Зони Бриллюена. Енерго-зонная структура» - *принип побудови зон Бріллюена, функції Блоха, зонна структура, електронні щільності станів, методи розрахунків.*	15	5	5	5
Тема 2 "Електронна будова і властивості" - *магнітні і кінетичні властивості, пружні властивості, співвідношення напруження-деформація, стабільність, фазові діаграми.*	15	5	5	5

3. Контроль знань

В основі методів контролю знань використовуються поточне індивідуальне опитування та залік. Залік проводиться на другому році навчання.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Оцінка ECTS	Сума балів за навчальну діяльність	Оцінка за національною шкалою
A	90–100	Відмінно
B	82–89	Добре
C	74–81	
D	64–73	Задовільно
E	60–63	Достатньо

F_X	35–59	Незадовільно з можливістю повторного складання
F	1–34	Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням курсу

4. Список базової літератури

1. Jena A.K., Chaturvedi M.C. Phase transformations in materials. Prentice Hall, New Jersey, 1992. P. 66-131.

2. R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press, 2004.

3. Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy (edited by C.D. Wagner, W.M. Riggs, L.E. Davis, J.F. Moulder, and G.E. Muilenberg), Perkin-Elmer Corporation, Minnesota, 1979.

4. A. Meisel, G. Leonhardt, R. Szargan, X-Ray Spectra and Chemical Binding, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 1989.

5. Practical Surface Analysis (the 2nd Edition): Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy (Edited by D. Briggs and P.M. Seach), John Willey & Sons Ltd., Chichester, 1990.

6. A.K. Jena, M.C. Chaturvedi. Phase transformations in materials. Prentice Hall, New Jersey, 1992. P. 66-131.

7. Charles Kittel. Introduction to Solid State Physics. 7th ed. John Wiley & Sons, Inc. New York – London, 1996.

8. Electron Spectroscopy: Theory, Techniques and Applications: Vol. 1 (C.R. Brundle, A.D. Baker, Eds), Academic Press, London/New-York/San Francisco, 1997.

9. J. Kohanoff, N.I. Gidopoulos, Density Functional Theory: Basics, New Trends and Applications, In: Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry (Ed. by S. Wilson) (Volume 2, Part 5, Chapter 26), John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2003, pp. 532-568.