

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет
(назва факультету)

Кафедра фізики металів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Вибрані розділи фізики наносистем

(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
(шифр і назва)
спеціальність 104 Фізика та астрономія
(шифр і назва спеціальності)
освітній ступінь магістр
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)
освітня програма Фізика наносистем
(назва освітньої програми)
вид дисципліни обов'язкова ОК 22

Форма навчання денна
Навчальний рік 2022/2023
Семестр 4
Кількість кредитів ECTS 6
Мова викладання, навчання та оцінювання українська
Форма заключного контролю іспит

Викладачі: професор Котречко Сергій Олексійович, професор Семенько Михайло Петрович
(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробники¹: Котречко Сергій Олексійович, доктор фіз.-мат. наук, професор кафедри фізики металів; Семенко Михайло Петрович доктор фіз.-мат. наук, професор, професор кафедри фізики металів

(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО
Зав. кафедри фізики металів


(підпис)

(Курилюк В.В.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 8 від «20» травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 11 від «10» червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії


(підпис)

(Оліх О.Я.)
(прізвище та ініціали)

¹ Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри (циклової комісії – для коледжів), науково-методичної комісії факультету/інституту (раді навчального закладу - коледжу), підписується завідувачем кафедри (головою циклової комісії), головою науково-методичної комісії факультету/інституту (головою ради) і затверджується заступником декана/директора інституту з навчальної роботи (заступником директора коледжу).

ВСТУП

1. Мета дисципліни – дати студентам основи сучасних знань щодо атомних механізмів, які контролюють стабільність і довговічність тривимірних нанорозмірних кристалів, дво- та одновимірних нанокластерів і, на цій основі, сформувані у студентів базові уявлення щодо зв'язку між атомною будовою нанорозмірних кристалів та їх властивостями.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Мати знання щодо електронної структури та атомної будови твердих тіл. Знати основні типи міжатомного зв'язку. Мати уявлення щодо фізичної природи коливального руху атомів в твердому тілі та кількісних методів його аналізу. Знати закони термодинаміки та основи квантової механіки.
2. Вміти застосовувати знання з курсів математичного аналізу, математичної фізики, фізики твердого тіла для аналізу міжатомної взаємодії в твердому тілі, прогнозування рівноважних станів. Володіти методами аналізу кристалографічної структури.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

В рамках курсу «Вибрані розділи фізики наносистем» розглядаються сучасні уявлення щодо впливу атомної будови та електронної структури нанорозмірних кристалів і кластерів на їх стабільність та довговічність. При цьому, основний акцент робиться на фізичній природі впливу вимірності і розмірів нанокристалів на їх властивості. Мета вивчення дисципліни – дати студентам основи сучасних знань щодо атомних механізмів, які контролюють стабільність і довговічність тривимірних нанорозмірних кристалів, дво- та одновимірних нанокластерів. Навчальна задача курсу полягає у формуванні у студентів базових уявлень щодо зв'язку між атомною будовою тривимірних нанорозмірних кристалів, дво- і одновимірних нанокластерів та їх стабільністю і міцністю.

Результати навчання полягають у розумінні основних факторів, які обумовлюють вплив розмірів нанокристалів на їх стабільність і довговічність; вмінні прогнозувати зміни цих властивостей при переході від три-до дво- і одновимірних наносистем та оцінювати ресурс нанопристроїв.

Методи викладання: Лекції, самостійна робота, лабораторні роботи. Методи оцінювання: опитування в процесі лекції, модульні контрольні роботи після основних розділів спецкурсу, захист лабораторних робіт, іспит. Підсумкова оцінка виставляється на основі проміжних оцінок (60%) та іспиту (40%).

4. Завдання (навчальні цілі) – сформувані у студентів базові уявлення щодо зв'язку між атомною будовою нанорозмірних кристалів, їх стабільністю і міцністю, а також дати фізичні основи прогнозування довговічності та ресурсу нанопристроїв.

Згідно вимог Стандарту вищої освіти України (другий (магістерський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія») дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних **компетентностей**:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми дослідницького та інноваційного характеру у фізиці та астрономії.

Загальних:

ЗК01. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК02. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК03. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК04. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

Фахових:

СК01. Здатність використовувати закони та принципи фізики у поєднанні із потрібними математичними інструментами для опису природних явищ.

СК02. Здатність формулювати, аналізувати та синтезувати рішення наукових проблем в області фізики.

СК05. Здатність сприймати новоздобуті знання в області фізики та астрономії та інтегрувати їх із уже наявними, а також самостійно опановувати знання і навички, необхідні для розв'язання складних задач і проблем у нових для себе деталізованих предметних областях фізики та астрономії й дотичних до них міждисциплінарних областях.

СК06. Здатність розробляти наукові та прикладні проекти, керувати ними і оцінювати їх на основі фактів.

СК08. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в області фізики, вибирати відповідні методи для їх розв'язання, беручи до уваги наявні ресурси.

СК10. Здатність застосовувати сучасні експериментальні методи дослідження та діагностики наносистем.

СК12. Здатність застосовувати теорії опису фізичних властивостей наносистем різних типів.

5. Результати навчання за дисципліною: (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1	Основні відомості про наноструктури: класифікація, фізичні властивості та їх відмінність від властивостей макроскопічних аналогів, причини появи нових властивостей при зменшенні розмірів структур до нанометрового діапазону та фізична природа стабільності цих об'єктів.	Лекції Самостійна робота	Опитування в процесі лекції, модульні контрольні роботи, іспит	10
1.2	Основи уявлень щодо зв'язку між атомною будовою та параметрами міжатомної взаємодії в одно-, дво- та тривимірних нанокристалах.	Лекції Самостійна робота Лабораторні роботи	Опитування в процесі лекції, модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт, іспит	10

* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

1.3	Сучасні термофлуктуаційні моделі втрати стабільності нанорозмірних систем та фактори, які контролюють їх довговічність в широкому інтервалі температур з урахуванням дії механічних напружень.	Лекції Самостійна робота Лабораторні роботи	Опитування в процесі лекції, модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт, іспит	10
1.4	Існуючі експериментальні методи визначення стабільності та міцності наностовпчиків, нанодротів та наноголок.	Лекції Самостійна робота Лабораторні роботи	Опитування в процесі лекції, модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт, іспит	10
2.1	Розраховувати значення критичного напруження втрати стабільності міжатомної взаємодії та величини критичного зміщення атомів в нанокристалі спираючись на значення параметрів потенціалу міжатомної взаємодії.	Лабораторні роботи	Опитування в процесі лекції, модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт, іспит	10
2.2	Оцінювання часу існування нанорозмірних систем в широкому інтервалі температур та величини механічного навантаження.	Лекції Самостійна робота Лабораторні роботи	Опитування в процесі лекції, модульні контрольні роботи, захист лабораторних робіт, іспит	10

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни					
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2
РН01. Використовувати концептуальні та спеціалізовані знання і розуміння актуальних проблем і досягнень обраних напрямів сучасної теоретичної і експериментальної фізики для розв'язання складних задач і практичних проблем.	+					
РН02. Проводити експериментальні та теоретичні дослідження з фізики та астрономії, аналізувати отримані результати в контексті існуючих теорій, робити аргументовані висновки (включаючи оцінювання ступеня невизначеності) та пропозиції щодо подальших досліджень.	+	+	+	+	+	+
РН04. Обирати і використовувати відповідні методи обробки та аналізу даних фізичних досліджень і оцінювання їх достовірності.					+	+
РН05. Здійснювати феноменологічний та теоретичний опис					+	+

досліджуваних фізичних явищ, об'єктів і процесів.						
РН10. Відшукувати інформацію і дані, необхідні для розв'язання складних задач фізики, використовуючи різні джерела, зокрема, наукові видання, наукові бази даних тощо, оцінювати та критично аналізувати отримані інформацію та дані.			+	+		
РН25. Знати методи отримання та особливості структури наносистем, а також вміти встановлювати причинно-наслідковий зв'язок між особливостями їхнього складу та властивостей.			+	+		
РН27. Вміти визначати метод розрахунку, необхідний для розв'язку конкретної наукової проблеми в області фізики наносистем.			+	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання: (max/min)

1. Модульна контрольна робота 1 за темами 1-9 – 20 балів / 12 балів
2. Модульна контрольна робота 2 за темами 10-15 – 20 балів / 12 балів
3. Лабораторні роботи – 15 балів / 9 балів
4. Опитування під час лекцій – 5 балів / 3 бали

- підсумкове оцінювання у формі іспиту.

Іспит проводиться в письмовій формі. Кожен екзаменаційний білет містить два теоретичні питання з необхідністю розгорнутої відповіді. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом за складання іспиту дорівнює 40. Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів. Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом лабораторних робіт.

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні тематичних лекцій.

Захист звітів лабораторних робіт та опитування в процесі лекції проводиться упродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	Самостійна робота
<i>Розділ 1. Одновимірні наносистеми</i>				
1	<p>Тема 1. Вступ. Предмет та задачі курсу. Проблема стабільності і довговічності нанорозмірних 1D-, 2D -та 3D- нанокристалів.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Особливості атомної будови нанорозмірних кристалів та кластерів. Вплив розмірів та вимірності на фізико-механічні властивості нанокристалів. Критерії переходу від макро-до нанооб'єктів.</p>	2		4
2	<p>Тема 2. Механічні властивості одновимірних кристалів. Зв'язок між параметрами потенціалу міжатомної взаємодії та механічними властивостями одновимірних систем.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Парна та непарна (багаточастинкова) взаємодія. Типові парні потенціали та їх використання для моделювання міжатомної взаємодії в одновимірних кристалах.</p>	2		8
3	<p>Тема 3. Втрата стабільності міжатомної взаємодії. Критерії втрати стабільності. Силові та деформаційні характеристики стабільності міжатомної взаємодії та зв'язок їх величин з коефіцієнтом пружності і параметром Грюнайзена.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Зв'язок між енергією міжатомної взаємодії, міцністю та довжиною зв'язку.</p>	2		8
4	<p>Тема 4. Міжатомна взаємодія в нанокристалах вуглецю. Потенціал Бренера.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Особливість ковалентного зв'язку. Кутова залежність характеристик міжатомної взаємодії. Закономірності зміни міцності зв'язку при переході від три- до дво- та одновимірних нанокристалів вуглецю.</p>	2		8
5	<p>Тема 5. Методи отримання карбіну. Електронна структура. Атомна будова. «Кумулен» та «поліін» структури.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Залежність міжатомної віддалі в карбіновому ланцюжку від кількості атомів. Ширина забороненої зони в карбіні та залежність її величини від деформації. Деформаційно-індукований перехід «метал-напівпровідник» в карбіні.</p>	2		8
6	<p>Тема 6. Енергія міжатомної взаємодії в карбіні. Міцність, ламкість та пружні властивості карбінових ланцюжків. Високопольова методика експериментального визначення міцності карбіну.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Залежність енергії міжатомної взаємодії від кількості атомів в карбіні; розмірний та “even-odd” ефекти.</p>	2		8
7	<p>Тема 7. Кінетична природа міцності. Флуктуації. Модель Френкеля. Температурні залежності міцності та довговічності.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Залежність висоти енергетичного бар'єру від величини механічних напружень. Активаційний об'єм.</p>	2		8
8	<p>Тема 8. Силовий критерій флуктуаційно-індукованої нестабільності нанокристала.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p>	2		8

	Дисперсія амплітуди атомних коливань та особливості її температурної залежності при температурах нижчих температури Дебая.			
9	Тема 9. Вплив температури та механічного навантаження на довговічність одновимірних наносистем. Ресурс карбінкових нанопровідників та його залежність від числа атомів в нанопровіднику (розмірний та «even-odd» ефекти). с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Синергізм впливу температури і механічного навантаження на довговічність нанопровідників.	2	6	8
	<i>Модульна контрольна робота 1</i>			
Розділ 2. Дво- та тривимірні наносистеми				
10	Тема 10. Електронна структура та атомна будова графену. Методика експериментального визначення міцності графенового листа. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Фізична природа анізотропії міцності і пружності графену. Міцність вуглецевих нанотрубок «armchair» та «zigzag» конфігурацій.	2	8	8
11	Тема 11. Методи комп'ютерного моделювання деформації і руйнування графенових листів та нанотрубок. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Потенціал Бренера другого покоління (REBO) – переваги і недоліки.	2		8
12	Тема 12. Температурна залежність міцності. Атомістика термоактивованого руйнування графену. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Типи дефектів, які виникають при термомеханічному навантаження графена та їх вплив на міцність.	2		8
13	Тема 13. Ідеальні кристали: поняття «ідеальної міцності»; вплив напруженого стану на «крихкість» та «пластичність» ідеального кристала. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Дві моди втрати стабільності ОЦК кристалів. «Бейн» та «орторомбічна» траєкторії деформації.	2		8
14	Тема 14. Нанорозмірні кристали: основні типи нанорозмірних кристалів та методи їх отримання; атомістика пластичної деформації та руйнування нанорозмірних кристалів. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Фізична природа та прояви «пластичності» і «крихкості» нанорозмірних кристалів. Вплив сил поверхневого натягу на міцність нанокристалів.	2	8	10
15	Тема 15. Експериментальні методи визначення міцності наностовпчиків та наноголок. с.р.с. Вивчення матеріалу лекції. Фізична природа розмірного ефекту для міцності наностовпчиків, отриманих за “FIB” технологією та шляхом травлення композиту.	2	8	10
	<i>Модульна контрольна робота 2</i>			
	ВСЬОГО	30	30	120

Загальний обсяг 180 год., в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Семінари – **0 год.**

Практичні заняття – **0 год.**

Лабораторні заняття – **30 год.**

Тренінги – 0 год.
Консультації – 0 год.
Самостійна робота – 120 год.

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА²:

Основна: (Базова)

1. О.М. Назаров, М.М. Нищенко Наноструктури та нанотехнології. Київ 2012 (Національна бібліотека України імені В. І. Вернадського).
2. В.В. Покропивный, Ю. И. Роговой, В.В. Огородников, А.А. Лисенко. Атомистическое моделирование материалов. Киев 2008 (Національна бібліотека України імені В. І. Вернадського).
3. Kotrechko S, Timoshevskii A, Kolyvoshko E, Matviychuk Yu, Stetsenko N Thermomechanical stability of carbyne-based nanodevices. *Nanoscale Res Lett* 2017, 12: 327–334. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2099-4>
4. Kotrechko Sergiy, Timoshevskii Andrii Kolyvoshko Eugene, MatviychukYuriy, StetsenkoNataliya, Mikhailovskij Igor. Key factors governing lifetime of carbyne-graphene nanoelements. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 2020, v 108, 102609 <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2020.102609>.
5. Kotrechko S, Timoshevskii A, Kolyvoshko E, Matviychuk Yu, Stetsenko N Predicting the lifetime of nanoelements: a new trend in micromechanics (1st Virtual European Conference on Fracture). *Procedia Structural Integrity* 2020, 28: 116–123. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2020.10.015>

Додаткова:

1. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков Предельная прочность. Кристаллы, металлы, конструкции. Киев 2008.
2. Florian Banhart. Chains of carbon atoms: A vision or a new nanomaterial? *J. Nanotechnol.* 2015, 6, 559–569.
3. Alan Van Orden and Richard J. Saykally Small Carbon Clusters: Spectroscopy, Structure, and Energetics *Chem. Rev.* 1998, 98, 2313-2357.
4. A Timoshevskii, S Kotrechko, Y Matviychuk. Atomic structure and mechanical properties of carbyne. *Physical Review B* 2015, 91 (24), 245434.
5. T. I. Mazilova, S. Kotrechko, E.V. Sadanov, V.A. Ksenofontov, I.M. Mikhailovskij High-field formation of linear carbon chains and atomic clusters. *International Journal of Nanoscience* 2010, 9 №3, 151-157.
6. S. Kotrechko, A. Timoshevskii, E. Kolyvoshko and Y. Matviychuk. Relation between the strength and dimensionality of defect-free carbon crystals. *Nanoscale Research Letters.* 2015 10:225.
7. Brenner D.W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Phys. Rev. B.* 1990;42:9458.
8. Smith IWM. The temperature-dependence of elementary reaction rates: beyond Arrhenius. *Chem. Soc. Rev.* 2008; 37: 812-826.
9. G.M. Chechin, V.S. Lapina Universal bi-structures of strained monoatomic chains. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures Volume 122*, August 2020, 114155.
10. Kotrechko S., Ovsjannikov O., Stetsenko N., Mikhailovskij I., Mazilova T. and Starostenkov M.

² В тому числі Інтернет ресурси

Yield strength temperature dependence of tungsten nanosized crystals: experiment and simulation. Philosophical Magazine. 96 (2016) 5, pp. 473-485.

11. Julia R. Greer, Jeff Th.M. De Hosson, Plasticity in small-sized metallic systems: Intrinsic versus extrinsic size effect Progress in Materials Science Volume 56, Issue 6, August 2011, Pages 654–724.
12. Kotrechko S. Timoshevskii, I. Mikhailovskij, T. Mazilova, N. Stetsenko, O. Ovsijannikov, V. Lidych. Atomic mechanisms governing upper limit on the strength of nanosized crystals. Engineering Fracture Mechanics. 150 (2015) pp. 184-196.
13. Kotrechko S., Ovsjannikov O., Mazilova T., Mikhailovskij I., Sadanov E., and Stetsenko N. Inherent hydrostatic tensile strength of tungsten nanocrystals. Philosophical Magazine 97 (2017) 12, pp. 930–943.
14. https://archive.org/details/academicorrents_e54694787f54a7a0096d9b0f062d31a3a3925ae8