

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

**ДЕРЖАВНИЙ ЗАКЛАД «ПІВДЕННОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ К.Д. УШИНСЬКОГО»**

Фізико-математичний факультет

Методичні рекомендації до практичних занять і виконання самостійної роботи
з навчальної дисципліни

«Функціональні наноматеріали»

для здобувачів вищої освіти третього (освітньо-наукового) рівня
вищої освіти зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

Одеса – 2023

Друкується за рішенням вченої ради Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» (протокол №11 від 25 травня 2023 року).

Голованов В. В. Методичні рекомендації до практичних занять і виконання самостійної роботи з навчальної дисципліни «Функціональні наноматеріали» для здобувачів вищої освіти третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»: Одеса, Університет Ушинського, 2023. 35 с.

Рецензенти:

Олександр ТЮРІН - доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри обліку і фінансів,
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Олександр ГОХМАН - доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри фізики,
Державний заклад «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського»

Методичні рекомендації розроблено для допомоги здобувачам вищої освіти третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали». Подано анотацію дисципліни, плани практичних занять, завдання для самостійної роботи, рекомендовану літературу, вимоги до знань і вмінь здобувачів, набутих у процесі вивчення дисципліни.

Ключові слова: наноматеріали, наноелектроніка, методи квантового обчислення, напівпровідники, дипольний момент, спінова щільність.

ЗМІСТ

1. Опис навчальної дисципліни	4
2. Пояснювальна записка.....	5
3. Програма навчальної дисципліни.....	9
4. Організація та форми проведення роботи здобувачів вищої освіти.....	11
5. Основні теоретичні поняття	14
6. Теми практичних занять	16
7. Критерії оцінювання за різними видами роботи	30
8. Рекомендовані джерела інформації.....	35

Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, рівень вищої освіти	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 4	Галузь знань 10 «Природничі науки»	Статус дисципліни: обов'язкова	
Модулів – 1	Спеціальність 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»	Мова навчання: українська	
Змістових модулів – 2		Рік навчання: 2-й	
Загальна кількість годин – 120		Семестр: 3-й	
Індивідуально-дослідне завдання – тези			
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 1 самостійної роботи аспіранта – 3	Рівень вищої освіти третій (освітньо- науковий) Ступінь освіти: Доктор філософії (PhD)	Лекції	
		28 год.	4 год.
		Практичні	
		12 год.	4 год.
		ІНДЗ	
		12 год.	12 год.
		Самостійна робота	
		68 год.	100 год.
	Вид контролю: іспит		

Примітка.

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить:

для денної форми 33% : 67%

для заочної форми 7% : 93%

Пояснювальна записка

Мета та завдання навчальної дисципліни: формування теоретичної бази знань студентів з основ фізики наноматеріалів, цілісного уявлення про фізичні явища, принципи, ідеї, що складають основу сучасного вчення про нанотехнології, навичок застосування набутих знань на практиці, зокрема при розв'язуванні задач різного рівня складності й роботі з наноелектронними приладами. Особливі акценти наголошено на застосуванні методів квантово-хімічного моделювання поверхні напівпровідникових, металевих та діелектричних структур.

Передумови для вивчення дисципліни: для вивчення навчальної дисципліни «Функціональні наноматеріали» студенти мають опанувати знання з таких навчальних дисциплін, як «Загальна фізика» (розділи «Оптика», «Електрика та магнетизм», «Атомна та ядерна фізика»), «Фізика твердого тіла», «Теоретична фізика», «Вища математика», «Додаткові розділи теоретичної та експериментальної фізики».

Очікувані програмні результати навчання:

ПРН 03. Креативно мислити, формулювати висновки і розробляти рекомендації з використання новітніх технологій у розв'язанні поставлених професійних завдань.

ПРН 09. Використовувати нормативно-правове та науково-методичне забезпечення вищої освіти, сучасні засоби і технології організації та здійснення освітнього процесу, різноманітні аспекти виховної роботи, інноваційні методи навчання.

ПРН 10. Визначати проблеми і шляхи їх вирішення у сфері професійної діяльності з урахуванням досвіду світових практик.

ПРН 11. Розуміти особливості різних класів наноматеріалів, використовувати сучасні фізичні підходи, концепти та методи прикладної фізики з урахуванням цих особливостей.

ПРН 12. Конструювати дизайн, розробляти програму та виконувати комплексні дослідження наноматеріалів з використанням широкого кола прикладних методів, технологій та інструментарію аналізу.

ПРН 15. Професійно виконувати наукові дослідження, дорадчі та консультаційні функції з прикладної фізики на регіональному, національному та міжнародному рівні.

Очікувані результати навчання дисципліни:

Здобувач вищої освіти повинен знати:

- основи систематики фізики наноматеріалів;
- сутність явищ в наноструктурах; ідей, що складають основу сучасного вчення про наносистеми, закони і закономірності, яким ці явища підкорюються;
- фундаментальні й прикладні аспекти розділу «Фізика функціональних наноматеріалів»;
- історію розвитку нанотехнологій, вирішальні експерименти, винаходи і сучасні проблеми в фізиці наноприладів.

Здобувач вищої освіти повинен вміти:

- аналізувати явища і процеси в наноструктурах з погляду фундаментальних фізичних теорій, принципів і знань, а також на основі відповідних математичних методів;
- застосовувати методи комп'ютерного моделювання молекулярних систем та використати прикладні програми що реалізують ab initio квантово-хімічні розрахунки;
- приймати рішення та діяти в процесі вирішення науково-дослідницьких задач сучасної квантової теорії твердого тіла;
- розв'язувати задачі з фізики наноприладів доцільним чином інтегруючи знання з різних галузей відповідних наук, застосовувати при розв'язанні задач відповідні математичні методи;

– знаходити, обробляти та аналізувати інформацію з різних джерел, насамперед за допомогою інформаційних технологій; застосовувати сучасні інформаційні технології при виконанні завдань.

У результаті вивчення дисципліни аспірант повинен мати наступні компетентності:

Інтегральна компетентність (ІК): Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та дослідницько-інноваційної діяльності у сфері прикладного матеріалознавства та наноматеріалів, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних фізичних знань та/або професійної практики.

Загальні компетентності:

ЗК 3 Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел із застосуванням та використанням сучасних інформаційних технологій.

ЗК 4 Здатність фахово спілкуватися державною та іноземною мовами як усно, так і письмово у процесі наукової комунікації та досліджень.

ЗК 7 Вміння виявляти, формалізувати, ставити та розв'язувати комплексні проблеми..

ЗК 8 Описувати відповідні задачі таким чином, щоб розвивати та трансформувати наукові знання та розуміння.

Спеціальні компетентності:

СК 3 Креативно мислити, формулювати висновки і розробляти рекомендації з використанням новітніх технологій у розв'язанні поставлених професійних завдань..

СК 4 Опанувати універсальними навичками дослідника, зокрема застосування сучасних інформаційних технологій, розробки, організації та управління науковими проектами та/або науковими дослідженнями,

презентації їх результатів у професійному середовищі через сучасні форми наукової комунікації (академічні наукові публікації, семінари, конференції), в засобах масової інформації та в публічній сфері у національному та міжнародному контексті.

СК 5 Ідентифікувати наукові та практичні проблеми, готувати наукові тексти та доповіді, здійснювати публічну апробацію результатів досліджень як державною, так і іноземною мовами, демонструвати вміння усної та писемної комунікації.

СК 8 Аналізувати й узагальнювати педагогічні явища та проблеми, виявляти гнучкість у прийнятті рішень на основі логічних аргументів та перевірених фактів в умовах обмеженого часу і ресурсів на засадах загальнонаукової методології.

СК 9 Використовувати нормативно-правове та науково-методичне забезпечення вищої освіти, сучасні засоби і технології організації та здійснення освітнього процесу, різноманітні аспекти виховної роботи, інноваційні методи навчання.

Опановуючи зміст навчальної дисципліни здобувач повинен дотримуватися принципів академічної доброчесності:

– сумлінно, вчасно й самостійно (крім випадків, які передбачають групову роботу) виконувати навчальні завдання, завдання проміжного та підсумкового контролю;

– бути присутнім на всіх навчальних заняттях, окрім випадків, викликаних поважними причинами;

– ефективно використовувати час на навчальних заняттях для досягнення навчальних цілей, не марнуючи його на зайві речі;

– сумлінно виконувати завдання з самостійної роботи, користуватися інформацією з надійно перевірених джерел, опрацьовувати запропоновані та додаткові літературні джерела та Інтернет-ресурси.

Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. Фізика наноструктур та функціональна наноелектроніка

Тема 1. Властивості індивідуальних наночастинок

Металеві та вуглецеві наноструктури. Магічні числа. Геометрична і електронна структура. Реакційна здатність. Магнітні кластери. Напівпровідникові наночастинки. Оптичні властивості. Фулерени і вуглецеві нанотрубки.

Тема 2. Наноструктуровані матеріали

Квантово-розмірні ефекти наночасток. Отримання наночастинок. Двовимірні, квазіодномірні, нульмірні нанооб'єкти. Квантові точки, кластери та композиційні матеріали. Фрактальні кластери. Невпорядковані твердотільні структури. Принцип квантування і квантове обмеження. Структури з двовимірним електронним газом. Транспорт носіїв заряду вздовж потенційних бар'єрів. Тунелювання носіїв заряду. Структури з вертикальним перенесенням і квантові надгратки.

Тема 3. Технології створення твердотільних наноструктур

Методи синтезу. Основні властивості. Хімічний зв'язок. Квантово-розмірні ефекти наночасток. Методи осадження плівок. Реакція в дендримерів. Фотохімічний синтез. Золь-гель метод. Нанолітографія. Нанодрук. Саморегулюючі процеси. Самоорганізація і самозбірка.

Змістовий модуль 2. Фізичні принципи наноелектроніки. Области застосування.

Тема 4. Молекулярна наноелектроніка

Зонна теорія твердого тіла, кристалічна структура і способи моделювання наноструктур, квантова хімія нанорозмірних систем, одноелектронні прилади, їх теоретичні основи, реалізація, застосування, фотонні транзистори.

Тема 5. Медична нанохімія і нанобіотехнологія «Сухі» та «мокрі» нанотехнології, штучні біоструктури на основі біомолекул. Наномотори. Генна інженерія. Рекомбінантна ДНК. Дендримери, олігомери, вектори, плазмід.

Тема 6. Застосування квантово-розмірних структур в наноелектронних приладах

Методи, які використовують скануючі зонди. Прилади на інтерференційних ефектах. Прилади на резонансному тунелюванні. Фотоприймачі на квантових ямах. Спінтронні прилади. Лазери з квантовими ямами і точками. Квантово-точкові клітинні автомати і бездротова електронна логіка. Квантові нанокomp'ютери. Квантовий комп'ютер на надпровідникових острівцях з переходами Джозефсона. Дісіпація й декогерентизація у надпровідникових пристроях на звичайних надпровідниках. Експериментальна реалізація надпровідникового кубіт. Ансамблевий квантовий комп'ютер.

Організація та форми проведення роботи здобувачів вищої освіти

Аудиторна робота здобувачів вищої освіти з дисципліни «Функціональні наноматеріали» потребує наявності чіткої та стійкої мотивації, яка визначається необхідністю ефективної професійної діяльності.

Активізація аудиторної роботи може бути забезпечена такими факторами:

- участю у колективному (командному) виконанні аудиторної роботи;
- використання в освітньому процесі активних методів навчання;
- мотивуючими чинниками контролю знань (рейтингова та накопичувальна системи оцінювання знань);
- розширенням об'єму знань з дисципліни за рахунок самостійної роботи з додатковою літературою;
- пошук (підбір) і огляд літератури і електронних джерел інформації з індивідуально заданої проблеми навчального курсу;
- підготовка до практичних (семінарських) занять;
- необхідністю обов'язкового виконання індивідуальних навчально-дослідних завдань;
- залученням до науково-дослідної роботи кафедри;
- участю в наукових конференціях, семінарах і олімпіадах.

Основне завдання організації аудиторної роботи здобувачів вищої освіти з «Функціональні наноматеріали» – навчити їх працювати свідомо не лише з навчальним матеріалом, а й з науковою інформацією, закласти основи самоорганізації та самовиховання, лідерства, сформувати вміння та навички постійно підвищувати свою кваліфікацію.

При вивченні дисципліни «Функціональні наноматеріали» для організації аудиторної роботи необхідною є єдність таких її взаємопов'язаних форм:

- самостійна робота;
- поза аудиторна пошуково-аналітична робота;
- творча наукова робота.

Аудиторна самостійна робота реалізується у процесі лекційних і практичних занять. Під час практичного заняття студенти детально аналізують фізико-хімічні механізми і основні закономірності використання наноматеріалів; навчаються застосувати методи квантово-хімічного моделювання поверхні напівпровідникових, металевих та діелектричних структур; використовувати знання та навички, одержані під час вивчення навчальної дисципліни в подальшій професійній діяльності.

При проведенні практичних занять відбувається перевірка засвоєння отриманих знань шляхом застосування попередньо підготовленого методичного матеріалу – тестів для виявлення ступеня опанування здобувачами необхідних теоретичних і практичних положень. Також застосовуються такі форми аудиторної діяльності, як опитування, аналіз типових помилок, дискусії, рефлексійний аналіз розуміння матеріалу тощо. Підготовка до таких занять потребує ґрунтовної теоретичної і практичної самостійної роботи студентів. На заняттях обговорюються попередньо визначені питання, до яких студенти готують тези відповідей. При оцінюванні роботи здобувачів враховуються: уміння аналізувати навчальний матеріал; здатність формулювати та відстоювати свою позицію; активність; можливість науково мислити; навички самостійної роботи з літературою, першоджерелами з дисципліни та методика їх опрацювання; якість підготовки презентацій доповіді тощо. Дискусії дають змогу виявити індивідуальні особливості розуміння обговорюваного питання, навчитись у творчій суперечці визначати істину, встановлювати особисту і спільну позиції щодо обговорюваної проблеми. У процесі дискусії здобувачі збагачують зміст уже відомого матеріалу, впорядковують і закріплюють його.

Форми проведення практичних робіт і дискусій можуть бути різними. Під час вивчення дисципліни «Функціональні наноматеріали» застосовують такі форми:

- у вигляді питань і відповідей з коментарями;
- розгорнуті бесіди;
- дискусії за принципом «круглий стіл»;

- обговорення презентацій доповідей здобувачів та їх оцінювання;
- вирішення проблемних питань і розбір конкретних ситуацій;
- у режимі «мозкова атака» або у формі «потоків ідей»;
- «майстер-класи».

Поза аудиторна робота з дисципліни «Функціональні наноматеріали» має характер пошуково-аналітичної і наукової роботи. Завдання, які постають перед здобувачами у процесі самостійної роботи, сприяють мисленню, формуванню умінь і навичок. Завдання для самостійної роботи поглиблюють і закріплюють знання та уміння, які здобувачі отримують на лекціях і лабораторних заняттях. Доцільними при вивченні дисципліни «Функціональні наноматеріали» є такі форми проведення самостійної роботи:

- пошук та огляд наукових джерел за заданою проблематикою;
- підготовка презентацій доповідей;
- формулювання основних понять;
- відповідальне виконання самостійних завдань;
- ретельна підготовка до дискусій.

Методичне забезпечення самостійної роботи здобувачів вищої освіти

Самостійна робота здобувачів забезпечується системою навчально-методичних засобів, передбачених для вивчення дисципліни «Функціональні наноматеріали» підручники, монографії, навчальні посібники, конспекти лекцій, відео-матеріали і презентації, робоча програма та силабус навчальної дисципліни «Функціональні наноматеріали». Самостійна робота здобувачів вищої освіти різноманітна – підготовка і написання презентацій доповідей, та інших письмових робіт на задані теми. Здобувачеві надається право вибору теми; виконання індивідуальних домашніх завдань різноманітного характеру:

- рішення задач з підбору літературних джерел;
- розробка та складання різних схем і таблиць;
- практичний план рішення проблем у науковій діяльності.

Основні теоретичні поняття МОЛЕКУЛЯРНІ ОРБІТАЛІ

Молекулярні орбіталі несуть велику інформацію пов'язану із формуванням зв'язку в молекулі. Однак МО не обов'язково однозначно відповідають зв'язкам у молекулі. Наприклад, молекула етилену утворена компонентами зв'язків CС і СН. Це стає очевидним, якщо згадати, що молекулярна орбіталь $\psi(r)$ є лінійною комбінацією атомних орбіталей (базисних функцій) $\phi(r)$ і тому делокалізована в молекулі.

$$\psi_i(r) = \sum_{\mu}^{\text{базисні функції}} c_{\mu i} \phi_{\mu}(r)$$

1) аналіз топології (симетрії) орбіталей може дати розуміння чому одні реакції відбуваються легко, інші - ні. Раніше аргументи симетрії орбіталей обмежувалися в основному планарними σ і π взаємодіями через те, що виникали труднощі у зображенні та візуалізації молекулярних орбіталей тривимірних систем. Сучасні комп'ютери дозволяють впоратися із цим завданням.

2) Для молекулярних орбіталей немає необхідності бути залученими до зв'язку, щоб нести важливу інформацію. Так найвища занята молекулярна орбіталь (НОМО) тетрафлюорида сірки демонструє, що молекула містить неподілену електронну пару відповідно до її структури.

Можна спроектувати молекулярну орбіталь на електронну густину молекули. Так найнижча вільна молекулярна орбіталь (LUMO) відображає область молекули з дефіцитом електронів і тому є схильною до нуклеофільної атаки.

ЕЛЕКТРОННА ЩІЛЬНІСТЬ

Електронна щільність $\rho(r)$ є функція координати r , що визначається так, що $\rho(r)dr$ є число електронів усередині малого об'єму dr . Для молекули із заповненими оболонками $\rho(r)$ записується у вигляді суми аналогічних густин базисних функцій

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mu}^{\text{базисні функції}} P_{\mu\nu} \phi_{\mu}(\mathbf{r}) \phi_{\nu}(\mathbf{r})$$

де ϕ базисні функції, а P – матриця щільності. Електронна щільність може бути представлена у вигляді ізоповерхні, розмір і форма якої залежать від обраної величини щільності. Залежно від обраної величини щільності ізоповерхня може відображати просторове становище хімічних зв'язків або загальний розмір і форму молекули. Так обрана густина порядку 0.1 електрон/ау відображає конфігурацію зв'язку в молекулі, а густина 0.002 електрон/ау - розмір молекули.

ЩІЛЬНІСТЬ СПІНА

Спінова щільність $\rho^{\text{spin}}(\mathbf{r})$ визначається як різниця електронної щільності електронів із α спином, $\rho^{\alpha}(\mathbf{r})$ та електронної щільності електронів із β спином $\rho^{\beta}(\mathbf{r})$.

$$\rho^{\text{spin}}(\mathbf{r}) = \rho^{\alpha}(\mathbf{r}) - \rho^{\beta}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu}^{\text{базисні функції}} (P_{\mu\nu}^{\alpha} - P_{\mu\nu}^{\beta}) \phi_{\mu}(\mathbf{r}) \phi_{\nu}(\mathbf{r})$$

де ϕ - базисні функції, а P^{α} і P^{β} - α та β щільнісні матриці, відповідно. Для молекул із заповненими оболонками (всі електрони спарені) щільність спина дорівнює 0 у будь-якій точці. Для молекул з відкритими оболонками наявність спінової щільності свідчить про розподіл неспарених електронів. Спінова щільність - очевидні показник активності цих елементів молекули, радикалів у хімічних реакціях. Наявність спінової щільності може свідчить про спостереження у системі Електронного парамагнітного резонансу (ЕПР).

ЕЛЕКТРОСТАТИЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ

Електростатичний потенціал ϵ_{p} визначається як енергія взаємодії позитивного точкового заряду в точці \mathbf{r} з ядрами та електронами молекули

$$\epsilon_{\text{p}} = \sum_A^{\text{ядра}} Z_A / R_{Ap} - \sum_{\mu\nu}^{\text{базисні функції}} P_{\mu\nu} \int \frac{\phi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \phi_{\nu}(\mathbf{r})}{r_{rp}} d\mathbf{r}$$

Першій доданок - сума по ядрам A, Z - атомний номер, а R - відстань між ядрами та точковим зарядом. Другий доданок - це сума за базовими функціями ϕ , P матриця щільності, а інтеграл відображає Кулонівську взаємодію між електронами та точковим зарядом, де r - відстань між електроном та точковим зарядом.

Таким чином, еквіпотенційні поверхні для яких електростатичний потенціал негативний позначають регіони, які є місцями електрофільних атак. Таким чином, такі поверхні можуть відображати області знаходження електронів із найвищими енергіями, зокрема незв'язані електронні пари.

Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми та форма проведення	Кількість годин	
		Д. В.	З.В.
1	Колективна співбесіда Властивості індивідуальних наночастинок	2	2
2	Дискусія Наноструктуровані матеріали	2	
3	Колективна співбесіда Технології створення твердотільних наноструктур	2	
4	Колективна співбесіда Молекулярна наноелектроніка	2	
5	Дискусія Медична нанохімія і нанобіотехнологія	2	
6	Колективна співбесіда Застосування квантово-розмірних структур в наноелектронних приладах	2	2
Разом		12	4

Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин		Форми контролю
		Д. В.	З.В.	
1	Властивості індивідуальних наночастинок	10	16	Колективна співбесіда
2	Наноструктуровані матеріали	12	16	Усна доповідь
3	Технології створення твердотільних наноструктур	12	18	Тестування
4	Молекулярна наноелектроніка	10	16	Колективна співбесіда
5	Медична нанохімія і нанобіотехнологія	12	18	Усна доповідь

6	Застосування квантово-розмірних структур в наноелектронних приладах	12	16	Колективна співбесіда
Разом		68	100	

Індивідуальні науково-дослідні завдання

№ з/п	Тематика	Кількість годин
1	Тези (у відповідності до теми дисертаційного дослідження)	12
Разом		12

Практичне заняття №1 (2 години)

Колективна співбесіда. Властивості індивідуальних наночастинок.

Теми для самостійної роботи

1. Металеві та вуглецеві наноструктури.
2. Магічні числа. Геометрична і електронна структура.
3. Реакційна здатність.
4. Магнітні кластери.
5. Напівпровідникові наночастинки.
6. Оптичні властивості.
7. Фулерени і вуглецеві нанотрубки

Методичні вказівки

Розрахунки методами молекулярної механіки

Вибір методу та типу хвильових функцій. У разі RHF – використовується наближення $1/2$ електрона. Критерій збіжності (RMS). Для визначення спінової складової необхідно:

1. Визначити чи має молекула парне чи непарне число електронів.
2. Чи розглядаємо ми основний стан, чи збуджений.
3. Чи використовуємо ми метод UHF або RHF.

Порівняння зигзагоподібної та поєднаної конформації етану

По-перше, необхідно оптимізувати конформацію етану. По-друге, необхідно переглянути домінуючий внесок у стеричну енергію 0.818 kcal/mol . (Ван-дер-

Ваальс (VDW) – 0.6768 kcal/mol.). Вибрати атоми 1-4-7-2 та встановити двогранний кут -59.985° . Це мінімальна за енергією конформація для етану. Розгорнути молекулу, щоб побачити ромашку. В оптимальне значення вписати 0 і повторно провести мінімізацію. Фактично це означає запровадження фіксованого становища (посилення силових констант у торсіональному термі). Переконатися, що внесок у повну енергію становить VDW і торсійна енергія. Прибрати величину з оптимальної колонки та провести мінімізацію. Ми застрягли, тому що сідлова точка досить широка. Мінімізатор використовує першу похідну та вважає, що він досяг мінімуму. Ми застрягли. Вихід – зрушити на кілька градусів дігедральний кут.

Порівняння двох стабільних конформацій циклогексану (човник та крісло - глобальний мінімум).

Створити $\text{CH}_2(\text{CH}_2)_5$. Мінімізувати модель. Переконатися, що ми знаходимося у глобальному мінімумі, тому що цей локальний мінімум є найближчим до початкової конформації. Основні вклади йдуть від VDW та торсійних термів. Знаходження глобального мінімуму потребує попадання у долину глобального мінімуму. У разі циклогексану – це просто. Убрати атоми водню. Потягнути C1 униз, а C4 вгору. Мінімізувати структуру. Переконатись, що отримана структура на 5.5 kcal/mole стабільніша.

Оптимізація геометрії транзитної (сумісної) конформації етилену.

Встановити майже суміщену конформацію метану. Зафіксувати двогранний кут -3.149° . Копіювати параметри і оптимізувати систему до транзитного стану. Тепло утворення молекули (при 298 K, 1 mole речовини) включає zero point energy (ZPE). Для її виділення необхідно використати ключове слово FORCE. Тепло освіти утворюється з наступних термів:

$$\Delta H_f = E_{\text{elec}} + E_{\text{nucl}} + E_{\text{isol}} + E_{\text{atom}}$$

де E_{elec} – розраховується із самоузгодженого поля, E_{nucl} – ядерно-ядерне відштовхування, а E_{isol} та E_{atom} параметри потенційної функції для елементів у молекулі.

Практичне заняття №2 (2 години)

Дискусія Наноструктуровані матеріали

Теми для самостійної роботи

1. Квантово-розмірні ефекти наночасток.
2. Отримання наночастинок. Двовимірні, квазіодномірні, нульмірні наноб'єкти.
3. Квантові точки, кластери та композиційні матеріали. Фрактальні кластери.
4. Принцип квантування і квантове обмеження.
5. Транспорт носіїв заряду вздовж потенційних бар'єрів. Тунелювання носіїв заряду.
6. Структури з вертикальним перенесенням и квантові надгратки.

Методичні вказівки

Розрахунок дипольного моменту для формальдегіду

Дипольний момент - перша похідна енергії щодо прикладеного електричного поля. Це є характеристика асиметрії розподілу заряду в молекулі.

1. Створити молекулу H_2CO .
2. Розрахувати систему із силовим полем AM1, RMS 0.100.
3. Мінімізувати, вибрати диполь та порахувати.

X	Y	Z	Total
-2.317	0.00	0.00	2.317 Debye

Спінова щільність

Спінова щільність у молекулах з неспареним електроном. (Важливо знати ці дані при розрахунку реактивності молекули та спектрів ЕПР. Неспарений електрон містять вільні радикали, молекули з парною кількістю електронів, комплекси, що включають транзитні елементи, молекули в триплетному стані. Можна розраховувати спінову густина з використанням методів UHF та RHF.

UHF розрахунок спінової щільності для етил-радикалу

Створити етил-радикал (надрукувати EtH). Убрати один атом водню. Мінімізувати структуру із силовим полем RM3. Розрахувати константи надтонкого розщеплення.

Як видно, електрон в етил-радикалі є делокалізованим, інакше не було б констант надтонкого розщеплення. C1 - 0.02376, C2 - -0.00504, H3 - -0.02632, H4 - -0.02605, H5 - 0.00350, H6 - 0.05672, H7 - 0.05479.

Розрахувати молекулу із силовим полем RM3 та відкритими оболонками (UHF). Розрахувати спінову густину.

Як видно неспарений електрон, значною мірою зосереджений на p_z орбіталі атома C1. RHF метод хороший, коли молекула занадто велика. Він використовує 1/2 наближення.

Розрахувати систему із силовим полем RM3. Переконалися, що електрон розташований на атомі C1.

C1 – -0.90744, C2 – 0.00644, H3 – 0.000, H4 – 0.000, H5 – 0.00001, H6 – 0.04395, H7 – 0.04216.

Висновок - C1 - це місце підвищеної реактивності молекули. Додаткову інформацію можна знайти у *.out файлі. Це електронна енергія – E_{elec} , енергія ядерно-ядерного відштовхування – E_{nucl} , потенціал іонізації, HOMO/LUMO енергії.

Практичне заняття №3 (2 години)

Колективна співбесіда Технології створення твердотільних наноструктур

Теми для самостійної роботи

1. Методи синтезу. Основні властивості. Хімічний зв'язок.
2. Квантово-розмірні ефекти наночасток.
3. Методи осадження плівок.
4. Фотохімічний синтез. Золь-гель метод.
5. Нанолітографія. Нанодрук.
6. Саморегулюючі процеси. Самоорганізація і самозбірка.

Методичні вказівки

Розрахунки методами квантової механіки

1. Показати як виглядає файл молекули води у картезіанових координатах.
2. Показати, як працює конвертація файлу з графічного формату `pdb` у `Z`-матрицю.
3. Розрахувати формальдегід $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$.
Використовувати наступні параметри - `RHF /6-31G(d)`, `Pop=Full`, (бо `Pop=Reg` викликає дані про 5 молекулярних орбіталей (`Pop=Full` - про всіх), `Test` – перешкоджає створенню архіву, `#T` середній висновок інформації (тільки основні результати), або `#P` - максимальне виведення інформації.
4. Переконайтеся, що для орбіталі з енергією -20.58275 найбільший внесок виходить від $1s$ орбіталі кисню.
5. Переконайтеся, що орбіталь -0.44079 – це НОМО, а наступна орбіталь 0.13572 – це LUMO.
6. Візуалізувати орбіталі.

Зверніть увагу, що на відміну від енергії, електронної щільності та оптимізованої геометрії побудовані орбіталі не мають реального фізичного сенсу (це переважно математична величина ніж фізична, тому що вона пов'язана з ймовірністю).

7. Розібрати Маллікенівський аналіз популяції заряду.

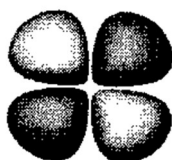
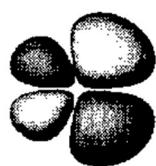
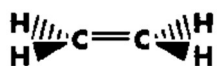
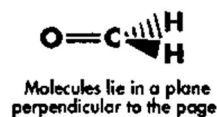
Наголошую, що Маллікенівська схема досить відносна. Атомні заряди на відміну від електронної щільності не є величиною, що розраховується за квантово механічними принципами і не можуть бути недвозначно розраховані з перших принципів.

8. Перевірити диполь – $-2.8427D$ (від атома кисню).

Порівняний аналіз молекул етилену та формальдегіду H_2CO та C_2H_4

Порівняти дипольні моменти формальдегіду та етилену. Оскільки молекули мають однакову кількість електронів (ізоелектронні компоненти), то в обох випадках орбіталь 8 - це НОМО. а 9 – LUMO. Однак, в етилені НОМО і LUMO сформовані переважно p_x -орбіталями двох атомів вуглецю, що лежать поза площиною `YZ`. Якщо НОМО сформовано орбіталями одного знаку і відповідно

формують π -зв'язуючу молекулярну орбіталь, то LUMO сформовано орбіталями з різними знаками і, отже, у цьому випадку p_x -орбіталі комбінують з формуванням антизв'язуючої π^* -орбіталі. У формальдегіді орбіталі 7 і 9 (остання це LUMO), сформовані також з p_x -орбіталей (π -зв'язуюча і антизв'язувальна орбіталі відповідно). Однак π -орбіталь сформована з p_x -



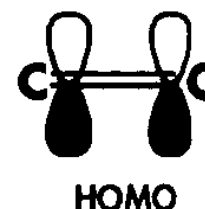
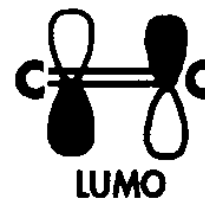
lowest unoccupied molecular orbital for formaldehyde (top) and ethylene



Highest occupied molecular orbital for formaldehyde (top) and ethylene

орбіталей карбону та кисню не є НОМО. Замість неї орбіталь сформована p_y -орбіталями кисню та вуглецю, а також 1s орбіталями водню є НОМО (внесок у напрямку подвійного зв'язку).

Різниця, що спостерігається, пов'язана з існуванням 2-х неподілених електронних пар у кисню (з 6 валентних електронів два утворюють подвійний зв'язок з вуглецем, а 4 утворюють дві пари).



Оптимізація етилену

Провести оптимізацію молекули з наступними параметрами - #T RHF/6-31G(d)

Opt Test

Вхідна структура молекули:

0 1

C

C 1 CC

H 1 CH 2 HCC

H 1 CH 2 HCC 3 180.

H 2 CH 1 HCC 3 180.

H 2 CH 1 HCC 4 180.

Variables:

CC=1.31

CH=1.07

HCC=121.5

Оптимізація конформації вінілового спирту (0° та 180°) CH_2CONH

Яка із конформацій представляє мінімум потенціальної енергії?

0 - -152.88889

180 - -152.88539

Практичне заняття №4 (2 години)

Колективна співбесіда Молекулярна наноелектроніка

Теми для самостійної роботи

1. Зонна теорія твердого тіла
2. Кристалічна структура і способи моделювання наноструктур
3. Квантова хімія нанорозмірних систем
4. Одноелектронні прилади їх теоретичні основи, реалізація, застосування.
5. Фотонні транзистори

Методичні вказівки

Частотні розрахунки (ІЧ спектр)

Застосовується з розрахунками методом Хартрі-Фока (HF), DFT (B3LYP) та моделлю Мюллера-Плесета (MP2). Розрахунки ІЧ спектрів залежать від другої похідної енергії щодо координат ядер. Ключове слово – Freq. Щоб зрозуміти сенс енергії нульової температури, пригадаємо, що енергія гармонійного осцилятора записується у вигляді:

$$h\nu(n+1/2)$$

де основний стан відповідає $n = 0$. Тобто, в основному стані ми маємо zero point energy. Частотні розрахунки вірні лише у випадку стабілізованої структури! Тому, оптимізація молекули потрібна до проведення частотних розрахунків. Необхідно використовувати однаковий базисний набір для оптимізації та частотних розрахунків.

Розрахувати частотний спектр для формальдегіду

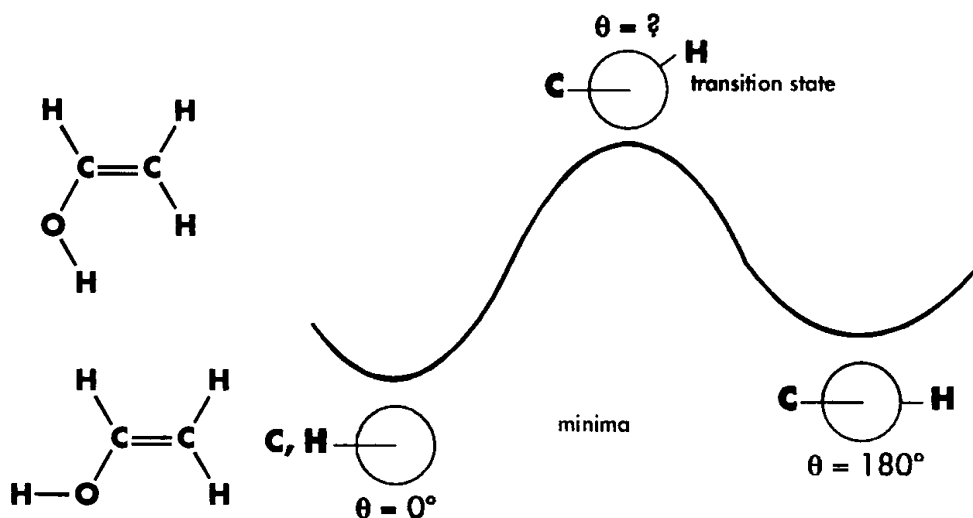
Оптимізацію провести з наступними параметрами - # RHF/6-31G(d) Freq Test
Найбільш сильна лінія в спектрі – 4 – 2028.1 cm^{-1} . Хатрі-Фок дає помилку (на 10-12%) внаслідок неврахування електронно-кореляційних ефектів. Тому частоти слід помножити на експериментальний фактор 0.8929 для отримання правильних значень. Zero Point energy для HF/6-31G(d) необхідно помножити на 0.9135. У *.out файлі також відображаються усунення атомів. Слід порівняти стандартну орієнтацію і усунення. У першій нормальній моді це відповідає смузі 1189 cm^{-1} (що з'являється при множенні на 0.8929 відповідної смуги з output file).

Термохімія

Розрахунки енергії завжди повинні враховувати скориговану ZPE та корекцію теплової енергії. ZPE це корекція до електронної енергії молекули, яка враховує ефекти молекулярної вібрації, які існують навіть при 0 K. Для розрахунку енергії системи за підвищеної температури корекція термоенергії повинна бути додана до повної енергії системи (враховує ефекти вібрації молекули при вибраній температурі). Термоенергія включає ZPE (не додавати її ще раз!).

Який ефект має зміна кута частотного спектра ізомерів? Так як немає жодної віртуальної частоти, то очевидно у двох випадках ми маємо мінімум енергії. Припустимо, що двогранний кут C-C-O-H 90° відповідає транзитному стану.

Розрахунки частот ізомерів вінілового спирту



Peak	0° Isomer		180° Isomer	
	Freq.	Intensity	Freq.	Intensity
1	459	151	186	140
2	533	16	518	4
3	785	1	785	6
4	965	93	988	84
5	1048	14	1048	60
6	1128	17	1104	13
7	1234	230	1236	13
8	1447	5	1419	266
9	1468	5	1476	16
10	1595	24	1582	0.3
11	1879	198	1907	112
12	3334	8	3345	18
13	3404	6	3364	9
14	3433	20	3443	14
15	4096	54	4146	111

Як видно у всіх випадках частоти та інтенсивності приблизно однакові для двох ізомерів. Різниця тільки в першій нормальній моді (зсув складає 272 cm^{-1}). Щоб зрозуміти різницю, подивимося на зміщення. Видно, що основний внесок йде від атома водню, який розташований по-різному. Тому не дивно, що частотні результати у цьому випадку відрізняються.

Практичне заняття №5 (2 години)

Дискусія Медична нанохімія і нанобіотехнологія

Теми для самостійної роботи

1. Сухі» та «мокрі» нанотехнології
2. Штучні біоструктури на основі біомолекул
3. Наномотори
4. Генна інженерія. Рекомбінантна ДНК
5. Дендримери, олігомери, вектори, плазмідни

Методичні вказівки

Розрахувати структуру CO_2 та його енергію атомізації

Використовуємо різні теорії (HF), (B3LYP) та (MP2). У кожному випадку оптимізуємо структуру CO_2 і зробимо частотний розрахунок оптимізованої структури. Потім розрахуємо енергії для вуглецю та кисню використовуючи параметри SCF=Tight. Енергія атомізації розраховується за формулою:

$$D_0 = (E^{\text{C}} + 2E^{\text{O}}) - (E^{\text{CO}_2} + \text{ZPE}).$$

Method	Carbon Dioxide			Carbon E	Oxygen E	D_0 (kcal-mol ⁻¹)	$\Delta(\text{Exp})$
	R(C-O)	E	ZPE				
HF	1.143	-187.63418	0.0114	-37.68086	-74.78393	234.7	147.2
SVWN	1.171	-187.61677	0.0116	-37.56616	-74.64334	472.1	-90.2
SVWN5	1.172	-187.18193	0.0116	-37.45370	-74.48842	464.2	-82.3
BLYP	1.183	-188.56306	0.0112	-37.83202	-75.04696	392.8	-10.9
B3LYP	1.169	-188.58094	0.0114	-37.84628	-75.06062	377.8	4.1
B3PW91	1.168	-188.50695	0.0115	-37.82569	-75.03133	381.0	0.9
MP2	1.180	-188.10775	0.0111	-37.73297	-74.88004	378.8	3.1
Exp.	1.162					381.9	

Ми бачимо, що метод Мюллер-Плесет дає найближчий до експерименту результат.

Розрахувати енергію атомізації PH₂.

Використовуємо наступні параметри - B3LYP/6-31G(d) та ZPE з фактором 0.9804 для оптимізації геометрії молекули PH₂, та B3LYP/6-31+G(d,p) для розрахунку енергій за формулою

$$(E(P)+2E(H))-E(PH_2)$$

Проведемо оптимізацію для молекули PH₂ і потім три точкові розрахунки для P, H і сполуки.

Molecule	E	ZPE	AE
H	-0.50027		
P	-341.25930		
PH ₂	-342.50942	0.01322	148.3
Experiment			144.7

Спорідненість PH₂ до електрона

Molecule	E	ZPE	EA	
			eV	kcal·mol ⁻¹
PH ₂ ⁻	-342.55419	0.01245		
PH ₂	-342.50942	0.01322	1.24	28.58
Experiment			1.26	29.06

$E(PH_2)-E(PH_2^-)$ розраховується як енергія, що виділяється при приєднанні електрона до нейтральної молекули.

Практичне заняття №6 (2 години)

Колективна співбесіда Застосування квантово-розмірних структур в наноелектронних приладах

Теми для самостійної роботи

1. Методи, які використовують скануючі зонди.
2. Прилади на інтерференційних ефектах. Прилади на резонансному тунелюванні

3. Фотоприймачі на квантових ямах. Спінтронні прилади.
4. Лазери з квантовими ямами і точками
5. Квантові нанокomp'ютери.
6. Експериментальна реалізація надпровідникового кубіт.

Методичні вказівки

Потенціал іонізації PH_2

Molecule	E	ZPE	IP	
			eV	kcal-mol ⁻¹
PH_2^+	-342.14416	0.01347		
PH_2	-342.50942	0.01322	9.95	229.36
Experiment			9.82	226.45

Розраховується як енергія необхідна видалення одного електрона з молекули. $E(\text{PH}_2^+) - E(\text{PH}_2)$

Спорідненість до протону PH_3

Molecule	E	ZPE	PA
PH_4^+	-343.45408	0.03470	
PH_3	-343.14691	0.02376	185.9
Experiment			187.1

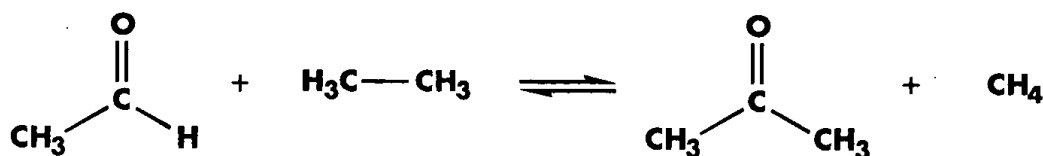
Енергія, що виділяється при додаванні протона до молекули.

$$E(\text{PH}_3) - E(\text{PH}_4^+)$$

Необхідно провести дві оптимізації плюс частотні розрахунки з наступним розрахунком точкової енергії оптимізованої геометрії.

Ізодезмічні реакції

Ізодезмічними реакціями називаються такі, у яких загальна кількість і тип кожного з видів зв'язку однакові в реагентах та продуктах реакції.

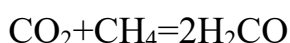


У аналізованій реакції 12 одинарних зв'язків і один подвійний зв'язок. Порівняння однакових систем ліворуч та праворуч рівняння дозволяє нам порівнювати і загальні енергії систем. Це дає можливість розраховувати ентальпію реакції та аналізувати теплоти утворення речовин, що беруть участь у реакції, шляхом розрахунку ΔH та обчислення шуканої теплоти освіти, за умови, що відомі експериментальні значення для інших речовин, що беруть участь у реакції.

System	E	ZPE	E ⁰
Ethane	-79.86142	0.07286	-79.78856
Acetaldehyde	-153.89170	0.05474	-153.83695
Methane	-40.53678	0.04364	-40.49314
Acetone	-193.23038	0.08214	-193.14824

Оптимізуємо структури з наступними параметрами - HF/6-31G(d). Розрахуємо частоти та ZPE на оптимізованих структурах. Розрахуємо енергію із параметрами - B3LYP/6-311+G(3df,2p). Отримаємо величину $\Delta H = -9.95$ kcal/mol. Це свідчить про екзотермічність реакції. Експериментальне значення - 9.9 ± 0.3 kcal/mol.

Розрахувати теплоту утворення CO₂ у ізодезмічній реакції



$$\Delta H^{\text{calc}} = 2E^0(\text{H}_2\text{CO}) - (E^0(\text{CO}_2) + E^0(\text{CH}_4))$$

$$\Delta H_f(\text{CO}_2) = -(\Delta H^{\text{calc}} - \Delta H_f^{\text{exp}}(\text{CH}_4) + 2\Delta H_f^{\text{exp}}(\text{H}_2\text{CO}))$$

Експериментальні теплоти утворення для метану та формальдегіду -16.0 та -25.0 kcal/mol при 0 К. Використовуємо самі параметри розрахунку, що у попередньої моделі.

System	E	ZPE	E ⁰	ΔH_f^{exp}
CO ₂	-188.65935	0.01164	-188.64771	?
Formaldehyde	-114.54878	0.02668	-114.52210	-25.0
Methane	-40.53678	0.04364	-40.49314	-16.0

Розрахунки для $\Delta H = 60.64 \text{ kcal/mol}$. Тоді для діоксиду вуглецю получим $\Delta H_f = -94.64 \text{ kcal/mol}$. Експериментальне значення - -93.96 kcal/mol .

Критерії оцінювання за різними видами роботи

Вид роботи	Бали	Критерії
Практичні заняття	0 балів	Здобувач не бере участі в занятті, є лише спостерігачем.
	1-4 балів	Здобувач бере участь у занятті, водночас не висловлює власних міркувань. Не може запропонувати приклади застосування здобутих знань. Виконує письмові опитування з помилками.
	5-6 балів	Здобувач бере активну участь у занятті. Висловлює власні міркування, наводить доцільні приклади. Виконує письмові опитування без помилок.
Самостійна робота	0 балів	Завдання не виконано.
	1-2 балів	Здобувач знає окремі факти, що стосуються навчального матеріалу; виявляє здатність елементарно висловлювати думку; самостійно та за допомогою викладача може виконувати частину практичних завдань; знає послідовність виконання завдання; практичні завдання містять багато суттєвих відхилень від установлених від установлених вимог, при їх виконанні потребує систематичної допомоги викладача.
	3-4 бали	Здобувач володіє глибокими знаннями, демонструє відповідні компетентності, використовує їх у нестандартних ситуаціях, самостійно працює з інформацією у відповідності до поставлених завдань; систематизує та узагальнює навчальний матеріал; самостійно користується додатковими джерелами інформації; без похибок виконує та аналізує практичні завдання.
Індивідуальне науково-дослідне завдання (Тези)	0 балів	Завдання не виконано.
	1-10 балів	Зміст тез відповідає предмету дисципліни, містить аналітику і узагальнення, але має неінформативні посилання, при оперуванні поняттями припускається неточностей, визначено ключову практичну

		проблему.
	11-20 балів	Завдання виконано з творчим підходом до вирішення проблемного питання, містить власну аналітику і узагальнення, проявлено креативність та нешаблонність, визначено ключову практичну проблему. Здобувач виступає експертом завдань, що виконали однокурсники.

Критерії оцінювання за всіма видами контролю

Сума балів	Критерії оцінки
Відмінно (90-100 А)	<p>Здобувач демонструє міцні знання навчального матеріалу в обсязі, що відповідає програмі навчальної дисципліни, правильно й обґрунтовано приймає необхідні рішення в різних нестандартних ситуаціях; реалізує теоретичні положення навчальної дисципліни виконуючи завдання. При виконанні самостійних завдань проявляє вміння самостійно вирішувати поставлені завдання, активно включається в обговорення, відстоює власну точку зору в питаннях та рішеннях, що розглядаються, а також:</p> <p><i>Знає на високому рівні:</i> основи систематики фізики наноматеріалів; сутність явищ в наноструктурах; ідей, що складають основу сучасного вчення про наносистеми, закони і закономірності, яким ці явища підкорюються; фундаментальні й прикладні аспекти розділу «Фізика функціональних наноматеріалів»; історію розвитку нанотехнологій, вирішальні експерименти, винаходи і сучасні проблеми в фізиці наноприладів.</p> <p><i>Вміє:</i> аналізувати явища і процеси в наноструктурах з погляду фундаментальних фізичних теорій, принципів і знань, а також на основі відповідних математичних методів; застосовувати методи комп'ютерного моделювання молекулярних систем та використати прикладні програми що реалізують ab initio квантово-хімічні розрахунки; приймати рішення та діяти в процесі вирішення науково-дослідницьких задач сучасної квантової теорії твердого тіла; розв'язувати задачі з фізики наноприладів доцільним чином інтегруючи знання з різних галузей відповідних наук, застосовувати при розв'язанні задач відповідні математичні методи; знаходити, обробляти та аналізувати інформацію з різних джерел, насамперед за допомогою інформаційних технологій; застосовувати сучасні інформаційні технології при виконанні завдань.</p> <p>Оцінка нижче 100 балів обґрунтовується недостатнім розкриттям теоретичних питань навчальної дисципліни, або</p>

	<p>тим, що аспірант проявляє невпевненість в тлумаченні теоретичних положень чи складних завдань.</p>
<p>Добре (82-89 В)</p>	<p>Здобувач демонструє знання, володіння матеріалом в обсязі, що відповідає програмі навчальної дисципліни, робить на їхній основі аналіз можливих ситуацій та вміє застосовувати теоретичні положення при вирішенні задач, але припускається несуттєвих помилок. При виконанні самостійних завдань, здобувач самостійно виправляє допущені помилки, кількість яких є незначною, а також:</p> <p><i>Знає:</i> основи систематики фізики наноматеріалів; але не дуже добре розуміє сутність явищ в наноструктурах; ідеї, що складають основу сучасного вчення про наносистеми, закони і закономірності, яким ці явища підкорюються; фундаментальні й прикладні аспекти розділу «Фізика функціональних наноматеріалів»; історію розвитку нанотехнологій, вирішальні експерименти, винаходи і сучасні проблеми в фізиці наноприладів.</p> <p><i>Вміє:</i> аналізувати явища і процеси в наноструктурах з погляду фундаментальних фізичних теорій, принципів і знань, а також на основі відповідних математичних методів; на досить невисокому рівні застосовувати методи комп'ютерного моделювання молекулярних систем та використати прикладні програми що реалізують ab initio квантово-хімічні розрахунки; приймати рішення та діяти в процесі вирішення науково-дослідницьких задач сучасної квантової теорії твердого тіла; розв'язувати задачі з фізики наноприладів доцільним чином інтегруючи знання з різних галузей відповідних наук, застосовувати при розв'язанні задач відповідні математичні методи; знаходити, обробляти та аналізувати інформацію з різних джерел, насамперед за допомогою інформаційних технологій; застосовувати сучасні інформаційні технології при виконанні завдань.</p>
<p>Добре (74-81 С)</p>	<p>Здобувач на достатньому рівні володіє навчальним матеріалом, знає основні теоретичні положення, що відповідають програмі навчальної дисципліни, аналізує можливі практичні ситуації та вирішує їх, але припускається помилок які усуває за підтримки з боку викладача або однокурсників. Пояснює основні положення, дає правильні відповіді щодо використання різноманітних методів роботи. Помилки у відповідях не є системними, впевнено працює за алгоритмом, а також:</p> <p><i>Знає на середньому рівні:</i> основи систематики фізики наноматеріалів; не дуже добре сутність явищ в наноструктурах; погано аналізує і розкриває ідеї, що</p>

	<p>складають основу сучасного вчення про наносистеми, закони і закономірності, яким ці явища підкорюються; фундаментальні й прикладні аспекти розділу «Фізика функціональних наноматеріалів»; історію розвитку нанотехнологій, вирішальні експерименти, винаходи і сучасні проблеми в фізиці наноприладів.</p> <p><i>Вміє:</i> погано розпізнавати явища і процеси в наноструктурах з погляду фундаментальних фізичних теорій, принципів і знань, а також на основі відповідних математичних методів; застосовувати, з помилками, методи комп'ютерного моделювання молекулярних систем та використати прикладні програми, що реалізують ab initio квантово-хімічні розрахунки; приймати рішення та діяти в процесі вирішення науково-дослідницьких задач сучасної квантової теорії твердого тіла; розв'язувати задачі з фізики наноприладів доцільним чином інтегруючи знання з різних галузей відповідних наук, застосовувати при розв'язанні задач відповідні математичні методи; знаходити, обробляти та аналізувати інформацію з різних джерел, насамперед за допомогою інформаційних технологій; застосовувати сучасні інформаційні технології при виконанні завдань з допомогою викладача.</p>
<p>Задовільно (64-73 D)</p>	<p>Здобувач розуміє основні положення навчальної дисципліни, котрі є визначальними і орієнтується у напрямі вирішення практичних завдань. Здобувач розуміє самостійні завдання, має пропозиції щодо напрямку їх вирішення. Самостійно вирішує завдання за зразком, допускає значну кількість недоліків, помилок, котрі усуває під керівництвом викладача, підтримки з боку однокурсників, а також:</p> <p><i>Знає на задовільному рівні:</i> основи систематики фізики наноматеріалів; сутність явищ в наноструктурах; ідей, що складають основу сучасного вчення про наносистеми, закони і закономірності, яким ці явища підкорюються; фундаментальні й прикладні аспекти розділу «Фізика функціональних наноматеріалів»; історію розвитку нанотехнологій, вирішальні експерименти, винаходи і сучасні проблеми в фізиці наноприладів.</p> <p><i>Вміє:</i> розпізнавати явища і процеси в сенсорних структурах з погляду фундаментальних фізичних теорій, принципів і знань, але з систематичними помилками; розв'язувати прості задачі з фізики сенсорів лише з допомогою викладача; знаходити інформацію з різних джерел, насамперед за допомогою інформаційних</p>

	технологій; виконувати теоретично-експериментальні дослідження тільки з допомогою викладачів.
Задовільно (60-63 E)	<p>Здобувач поверхнево опанував навчальний зміст, передбачений програмою навчальної дисципліни, володіє основними положеннями на мінімально допустимому рівні. Виконання самостійних завдань, формалізоване: є відповідність алгоритму, виконує практичні завдання за підтримки з боку викладача зі значними труднощами; демонструє нестійкі навички міжособистісної взаємодії, але відсутнє глибоке розуміння логіки процесів, а також:</p> <p><i>Знає:</i> не знає основи систематики фізики наноматеріалів; сутність явищ в наноструктурах; закони і закономірності, яким ці явища підкорюються; фундаментальні аспекти розділу «Фізика функціональних наноматеріалів» не розрізняє; історію розвитку нанотехнологій, вирішальні експерименти, винаходи і сучасні проблеми в фізиці сенсорних приладів знає на низькому рівні.</p> <p><i>Вміє:</i> розпізнавати явища і процеси в сенсорних структурах з погляду фундаментальних фізичних теорій, принципів і знань, але з систематичними помилками; розв'язувати прості задачі з фізики сенсорів з допомогою викладача; знаходити інформацію з різних джерел, насамперед за допомогою інформаційних технологій; не виконує теоретично-експериментальні дослідження.</p>
Незадовільно (35-59 FX)	Здобувач має фрагментарні знання, опанувавши менше половини обсягу навчального змісту, передбаченого програмою навчальної дисципліни. Відсутнє цілісне усвідомлення навчального матеріалу. Здобувач працює пасивно, самостійні завдання виконує переважно з помилками, виправляє помилки лише при виконанні нескладних завдань. Здобувач допускається до повторного складання.

Засоби оцінювання та методи діагностування результатів навчання

Оцінювання: колективна співбесіда, тестування, перевірка виконання практичних завдань, презентація результатів самостійної роботи, залік.

Демонстрування результатів навчання: дискусія, усна доповідь, презентація результатів самостійної роботи.

Рекомендовані джерела інформації Основна література

1. Пінчук С. І., Чигринець О.Е. Хімія твердого тіла (короткий курс): підручник – Київ, ТОВ «Видавничий дім АртЕк», 2018. 124 с.
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка. 4-е видання, доповнене. Л. : ЛНУ ім. Івана Франка, 2012. 872 с.
3. Blinder S. M., House J. E.. *Mathematical Physics in Theoretical Chemistry*. Elsevier, 2019. 412 p.
4. V. Golovanov, M. Spadaro, J. Arbiol, V. Golovanova, T. Rantala, T. Andreu, J. Morante, Effects of solar irradiation on thermally driven CO₂ methanation using Ni/CeO₂-based catalyst, *Applied Catalysis B: Environmental* 291 (2021) 120038 (12).
5. V. Golovanov, C. Baratto, V. Golovanova, G. Faglia, N. Tkachenko, B. Nazarchuk, On the alignment of ZnO nanowires by Langmuir – Blodgett technique for sensing application, *Applied Surface Science*, 528 (2020) 146959(7).

Додаткова література

1. Coosky A. *Physical Chemistry: Quantum Chemistry and Molecular Interactions*. Pearson, 2014. 603 p.
2. Levine I. N. *Quantum Chemistry*. 7th ed. Pearson, 2014. 714 p.
3. V. Golovanov, B. Nazarchuk, O. Postnyi, T. Rantala, N. Tkachenko, V. Golovanova, Photoreactions of macrocyclic dyes on (10 $\bar{1}$ 0) wurtzite surface – interplay between conformation and electronic effects, *Ukrainian Journal of Physics*, 64 (1) (2019) 63-71.
4. M. Ivanovskaya, E. Ovodok, D. Kotsikau, I. Azarko, M. Micusik, M. Omastova and V. Golovanov, Structure of titanium carbide and nature of its defects, *RSC Advances*, 43 (2020) 25602-25608.

Інформаційні ресурси в інтернеті

1. Сайт репозиторію ПНПУ ім. К. Д. Ушинського URL: <https://dspace.pdpu.edu.ua>
2. Сайт Міністерства освіти і науки України URL: www.mon.gov.ua
3. Національна бібліотека України імені В. І. Вернадського. URL: <http://www.nbuv.gov.ua/>
4. Освітньо - інформаційні ресурси: URL: http://nh.at.ua/dir/osvitnyo_informaciyni_resursy/19
5. Історія і наука. URL: <http://science-kharkov.ucoz.com/>
6. Бібліотека Університету Кембрідж. URL: www.cambridge.org
7. Gaussian & GaussView Tutorial Videos. URL: <https://gaussian.com/videos/>
8. Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase. URL: <https://cccbdb.nist.gov>