


Робоча програма навчальної дисципліни «Емісійна спектроскопія та моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур» для здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії галузі знань 10 Природничі науки спеціальності 105 Прикладна фізика і наноматеріали освітньої програми Прикладна фізика і наноматеріали.

Розробники: Міца В.М. професор, доктор-фізико математичних наук,

Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри
прикладної фізики

протокол № 7 від «23» вересня 2020 р.

Завідувач кафедри  Небола І.І.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

протокол № 1 від «23» вересня 2020 р.

Голова науково-методичної комісії  Карбованець М. І.

© Міца В.М., 2020 р.

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 2020 р.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Розподіл годин за навчальним планом	
	Денна форма навчання	Заочна форма Навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 7	Рік підготовки:	
Загальна кількість годин – 210	1	1
Кількість модулів – 2	Семестр:	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 3 самостійної роботи аспіранта – 4	1,2	1,2
	Лекції:	
	40	16
	Практичні (семінарські):	
	44	8
Вид підсумкового контролю: залік, екзамен	Лабораторні:	
	-	-
Форма підсумкового контролю: усна	Самостійна робота:	
	126	186

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою даного курсу є: навчити аспірантів рішенням питань, що постають перед ними при інтерпретації та аналізу даних, отриманих емісійними методами в поєднанні з даними розрахунків коливного спектру та моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур і які володіють сучасними методами їх дослідження з використанням синхротронного випромінювання, фотонних поляризованих і неполяризованих пучків, мають уявленнь про фізичні явища, що лежать в основі використовуваних методів.

Завдання курсу «Емісійна спектроскопія та моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур»:

Вивчення емісійних спектрів при взаємодії випромінювання з твердим тілом, наноструктурованими матеріалами та нанорозмірними структурами, дозволяють визначити будову валентної зони та визначити елементний склад, наявність окислених фаз і механічних напруг в нанопарах, безконтактно оцінювати концентрацію носіїв заряду в наноструктурах, визначити неоднорідності і тип нановключень в плівках і стеклах.

Фокус навчальної дисципліни: зміст та матеріал навчальної дисципліни стосується рішенням завдань по інтерпретації та аналізу даних, отриманих емісійними методами в поєднанні з даними розрахунків коливного спектру та моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур.

Відповідно до освітньо-наукової програми, вивчення дисципліни «**Емісійна спектроскопія та моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур**» сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

– **інтегральна компетентність:** здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та професійної практики.

– **загальні компетентності:** здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК-1); навички використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК-2); здатність проведення самостійних досліджень на сучасному рівні (ЗК-3); здатність до пошуку, обробки на аналізу інформації з різних джерел (ЗК-4); здатність генерувати нові ідеї (креативність) (ЗК-5); здатність комунікації на фахову тематику з нефахівцями (ЗК-10).

– **фахові компетентності:** здатність застосовувати фізичні знання для систематизації різноманітних пов'язаних фактів і явищ (ФК-1); здатність визначити завдання фізичного дослідження (ФК-2); здатність вирізняти із накопичених спостережень відтворювані експериментальні факти (ФК-3); здатність створювати та порівнювати між собою фізичні та математичні моделі фізичних об'єктів, процесів та явищ (ФК-4); здатність оцінювати моделі з точки зору їх відповідності фізичним об'єктам процесам та явищам, для пояснення яких застосовуються дані моделі (ФК-5); вміння здійснювати комп'ютерне моделювання фізичних процесів, у тому числі із застосуванням існуючого програмного забезпечення (ФК-6); володіння експериментальними методиками дослідження наноструктурованих матеріалів (ФК-7); знайомство з інформаційними технологіями та електронікою (ФК-8); володіння теоретичними методами, що застосовуються для дослідження низьковимірних систем і наноматеріалів (ФК-10).

3. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньо-наукової програми, вивчення навчальної дисципліни «**Емісійна спектроскопія та моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих**

матеріалів та нанорозмірних структур» повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Знати сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі фізики, прикладної фізики та суміжних галузей знань.	ПРН 1.1.
Знати фундаментальні праці провідних зарубіжних вчених та наукових шкіл у галузі дослідження.	ПРН 1.2.
Вміти формулювати загальну методологічну базу власного наукового дослідження.	ПРН 2.2.
Вміти проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, які приводять до отримання нових знань.	ПРН 2.3.
Вміти формулювати наукову проблему з огляду на стан її наукової розробки та сучасні наукові тенденції.	ПРН 2.5.
Вміти формулювати робочі гіпотези та моделі досліджуваної проблеми.	ПРН 2.6.
Вміти аналізувати наукові праці в галузі прикладної фізики, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання.	ПРН 2.7.

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни **«Емісійна спектроскопія та моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур»**:

Очікувані результати навчання з дисципліни	Шифр ПРН
Знати фізичну природу і закономірності синхротронного випромінювання, історію відкриття цього унікального фізичного явища; фізичні основи застосування синхротронного випромінювання для вивчення складу, будови твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур; пристрої і характеристики типового обладнання каналів синхротронного випромінювання.	ПРН 1.1.
Знати про можливості застосування методів емісійної спектроскопії для дослідження складу, структури; про особливості підготовки об'єктів дослідження для проведення досліджень методами синхротронної та рентгенівської фотоелектронної спектроскопії; про методи інтерпретації синхротронних та рентгенівських фотоелектронних спектрів із залученням результатів квантово-хімічних розрахунків.	ПРН 1.2.
Вміти оцінювати чисельні порядки величин, характерних для різних практичних застосувань синхротронного випромінювання; формулювати загальну методологічну базу власного наукового дослідження; володіти практичними навичками роботи на каналах джерел синхротронного вивчення за такими напрямками як спектральні дослідження, структурні дослідження та методами обробки і аналізу експериментальних результатів.	ПРН 2.2.
Вміти оцінювати кількісні показники випромінювання різних синхротронів; користуватися основними теоретичними поняттями, фізичними моделями процесів взаємодії синхротронного випромінювання і з речовиною.	ПРН 2.3.
Володіти методами побудови моделей, що описують фізичні явища у твердих тілах, наноструктурованих матеріалах та нанорозмірних структурах.	ПРН 2.5.
Вміти генерувати нові ідеї при вирішенні дослідницьких і практичних задач в області емісійної спектроскопії.	ПРН 2.6.
Вміти аналізувати наукову літературу по фізичним явищам у твердих тілах,	ПРН 2.7.

4. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є:

- поточний контроль успішності,
- модульний контроль,
- підсумковий контроль.

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю:

- вибіркоче усне опитування;
- фронтальне стандартизоване усне та/або письмове опитування за основними питаннями теми заняття;
 - експрес-опитування;
 - тестування;
 - реферативні повідомлення та їх обговорення;
 - перевірка якості виконання завдань для самостійної роботи, зокрема за конспектами матеріалів;
 - оцінювання якості та повноти виконання завдань модульної контрольної роботи.

Форма модульного контролю: виконання модульної контрольної роботи, результати якої оцінюються за 100-бальною шкалою за кожний модуль.

Форма підсумкового семестрового контролю: залік, екзамен. До заліку або екзамену допускаються аспіранти, які відпрацювали пропущені заняття і виконали модульні контрольні роботи.

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 1)

Поточне оцінювання та самостійна робота									Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	70	100
5	10	10	5							

T1, T2, T3, T4 – теми

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 2)

Поточне оцінювання та самостійна робота									Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	70	100
10	10	5	5							

T1, T2, T3, T4 – теми

Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни

Вид діяльності здобувача вищої освіти	Модуль 1		Модуль 2	
	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)
Практичні (семінарські) заняття	11	30	11	30
Лабораторні заняття (допуск, виконання та захист)		-		
Комп'ютерне тестування при тематичному оцінюванні		-		
Письмове тестування при тематичному оцінюванні				
Презентація		-		
Реферат		-		
Есе		-		
...		-		
Модульна контрольна робота		70		70
Разом	11	100	11	100

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Модульна контрольна робота здійснюється у письмовій формі шляхом відповідей на питання тестових завдань та екзамену. Кожна правильна відповідь оцінюється певною кількістю балів. Максимальна кількість балів за кожний модуль становить 100 балів. Мінімальна кількість балів, за якої робота вважається виконаною становить 60 балів.

Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Підсумковий семестровий контроль з дисципліни здійснюється у формі заліку та екзамену.

Залік проводиться в усній формі шляхом співбесіди. Результати заліку оцінюються за двобальною шкалою: „зараховано, „незараховано”.

Підсумкова оцінка " зараховано"/"не зараховано" визначається наступними критеріями:

- " зараховано" - якщо аспірант достатньо чітко і грамотно відповідає на питання в межах матеріалу викладеного у рамках лекційних занять, може показати та обґрунтувати взаємозв'язок різних частин матеріалу, пройденого у межах матеріалу навчальної дисципліни; демонструє здатність до мислення, при відповіді на питання розмірковує, спираючись на отримані у рамках курсу знання, не допускає істотних неточностей у відповіді, правильно вибудовує логіку вирішення типових завдань;

- "не зараховано" - якщо аспірант викладає основні питання недостатньо чітко або допускає істотні помилки при їх викладі, не може пояснити зв'язків у рамках викладеного матеріалу, аспірант не знає значної частини програмного матеріалу, не може дати точних визначень понять, пройдених у рамках курсу, дає розпливчаті формулювання і не володіє в належній мірі термінологією, плутається при відповіді на додаткові питання, не володіє прийомами вирішення типових завдань.

Екзамен проводиться в усній формі шляхом співбесіди. Результати екзамену оцінюються за чотирибальною шкалою: „відмінно”, „добре”, „задовільно”, „незадовільно”.

Оцінка „відмінно” (А; 90-100) виставляється в тому разі, коли аспірант бездоганно оволодів всіма розділами програми, дав глибокі, чіткі і вичерпні відповіді на всі основні і додаткові запитання, виявив розуміння фізичної суті програмового матеріалу, вільне володіння фактичним матеріалом та відповідним математичним апаратом, вміння грамотно обробляти результати експериментальних вимірювань з метою отримання заданої точності отриманих даних, кваліфіковано використовувати набуті знання для розв'язання конкретних практичних задач.

Оцінка „добре” (В, С; 74-89) виставляється тоді, коли аспірант виявив повне знання і розуміння програмового матеріалу, добре оволодів математичним апаратом курсу, може використовувати набуті знання в практичній діяльності, дав вичерпні відповіді на всі запитання, але під час відповіді допускав окремі нечіткі формулювання і незначні неточності.

Оцінка „задовільно” (D, E; 60-73) виставляється в тому разі, коли аспірант в основному знає і розуміє фактичний матеріал курсу, дав в основному правильні відповіді на запитання, виявив уміння розібратися в усьому матеріалі курсу, вміння використовувати відповідний математичний апарат, але не може ґрунтовно пояснити окремі положення пройденого курсу, допускає неточності при використанні математичного апарату, недостатньо вміє застосовувати набуті знання для розв'язання конкретних практичних задач.

Оцінка „незадовільно” (FХ, F; 1-59) виставляється тоді, коли аспірант не оволодів матеріалом даного курсу, виявив суттєві прогалини в знаннях основного програмового матеріалу, коли він під час відповіді на запитання виявив нерозуміння фізичної сутності основних понять та термінів навчальної дисципліни, допускає плутанину, слабо володіє математичним апаратом, не може застосовувати набуті знання для розв'язування конкретних практичних задач, тобто виявив відсутність мінімально необхідної кількості знань з даного курсу.

За бажанням аспіранта результуюча підсумкова оцінка може бути визначена як інтегрована оцінка засвоєння всіх тем дисципліни і кількісно дорівнює середньому арифметичному балів, отриманих за кожний модуль.

Переведення результатів, отриманих за 100-бальною шкалою оцінювання в національну 4-х бальну та шкалу за системою ECTS здійснюється за наступною схемою:

Оцінка за шкалою балів	Залік	ECTS	
		Оцінка	Характеристика
90 та вище	зараховано	A	відмінно
82-89	зараховано	B	добре
74-81	зараховано	C	добре
64-73	зараховано	D	задовільно
60-64	зараховано	E	задовільно
35-59	незараховано	FX	незадовільно з можливістю перескладання
1-34	незараховано	F	незадовільно з обов'язковим повторним навчанням

Аспірант, який отримав за результатами підсумкового контролю оцінку «незараховано» або «незадовільно з обов'язковим повторним навчанням» (1-34 балів, F), зобов'язаний пройти повторний курс вивчення дисципліни (під час додаткового семестру) і скласти залік або екзамен.

Результати підсумкового контролю знань заносяться до залікової відомості.

6. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

6.1. Зміст навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1

Емісійна спектроскопія

Тема 1. Використання синхротронного випромінювання для аналізу твердих тіл та наноб'єктів. Схема і основні параметри синхротронного центру.

ТЕМА 2. Рентгеноелектронна спектроскопія та її застосування для дослідження твердих тіл та наноб'єктів.

Фізичні основи та етапи розвитку методу. Основне рівняння фотоефекту. Фотоелектронні спектри. Основні закономірності у рентгеноелектронних спектрах. Фотоемісія при впливі УФ та рентгенівського випромінювання. Ймовірність виходу фотоелектронів. Основні методи фотоелектронної спектроскопії. Структура валентної зони. фотоелектронної та ультрафіолетової електронної спектроскопії. Експериментальна техніка

ТЕМА 3. Оже-електронна спектроскопія – метод дослідження електронної структури.

Фізичні основи методу. Енергія оже-електронів. Фактори, що впливають на вихід оже-електронів. Перетин іонізації внутрішнього рівня. Ймовірність оже-процесу. Середня довжина вільного пробігу електронів. Швидкі обернено-розсіяні електрони. Хімічні зсуви. Кількісна оже-спектроскопія. Основне рівняння оже спектроскопії. Метод зовнішніх еталонів. Метод, що використовує коефіцієнти елементної чутливості. Спеціальні методи для вивчення тонкошарових структур. Абсолютна чутливість методики оже-спектроскопії. Застосування спектрів $N(E)$ та dN/dE . Виключення фону.

ТЕМА 4. Фізичні основи комбінаційного розсіяння світла (КРС). Фотолюмінесцентна спектроскопія квантоворазмірних об'єктів.

Макроскопічна (класична) та мікроскопічна теорія КРС. Спектроскопія КРС – ефективний засіб вивчення взаємодії випромінювання з речовиною. Фізичні основи вимушеного і когерентного антистоксового комбінаційного розсіяння світла (ВКР і КАРС). ВКР – лазери. Сучасні досягнення КАРС-спектроскопії в дослідженні розподілу молекул по коливально-обертальним рівням. Застосування ВКР і КАРС в біології і медичній діагностиці. Розсіяння на акустичних фонах (Мандельштама-Бріллюена). Фр'юлівська електрон-фононна взаємодія в полярних кристалах. Правила відбору. Приклади. Алмаз, кремій і германій. Сучасні КРС-спектрометри. Макро і конфокальна КРС-спектроскопія. Основні компоненти і технічні характеристики КРС-спектрометрів. Роздільна здатність; дисперсія; світлосила. Джерела світла. Детектори. Техніка експерименту. Конфігурація експерименту КРС. Поляризаційні вимірювання. Позначення Порто. Приклади спектрів КРС.

Спектри люмінесценції (спектри збудження і випромінювання люмінесценції, одиниці виміру). Основні закони люмінесценції. Схеми флуориметра. Вимірювання квантового виходу люмінесценції. Коригування спектральної чутливості флуориметра. Флуоресцентна діагностика твердих тіл та наноб'єктів.

Змістовий модуль 2. Емісійна спектроскопія наноструктур. Коливні властивості наноструктур. Мікроспектроскопія. Моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур

ТЕМА 1. Коливні властивості наноструктур (4 год.)

Розвиток методів аналізу речовин на різних масштабних рівнях. Класифікація наночастинок і наноматеріалів. Розмірно-обмежені 3D, 2D, 1D, 0D кристалічні середовища. Дискретність хвильового вектора. Квантово-розмірні ефекти - квантування енергії електронів, фононів. Двомірна квантова яма, одномірна квантова нитка і нульмірна квантова точка. Надгратки. Фонони в надгратках. Наближення пружного континуума. Раманівське розсіяння на складених (folding phonons) акустичних фононах. Конфаймент фононів. Раманівське розсіяння на квантованих конфайментних оптичних фононах (Confinement modes). Раманівське розсіяння на інтерфейсних модах (Interface modes). Фонони в нанокристалах. Модель пружного континуума. Низькочастотна “дихаюча” мода - Лембовська мода. Модель механічного континуума (модель Ріхтера). Конфайментні оптичні моди. Модель діелектричного континуума. Інтерфейсні (поверхневі) оптичні моди. Розрахунки коливних спектрів нанокристалів. Коливні властивості вуглецевих наноструктур. Структурні форми елементарного вуглецю з різним координаційним числом і дальністю впорядкування. Фононні спектри алмазу, графіту, графену, фуллеренів, вуглецевих нанотрубок, аморфного вуглецю, склоподібний графіту, сажі.

ТЕМА 2. Раманівська мікроспектроскопія (6 год.)

Субмікронна спектроскопія мікро-КРС. Конфокальна спектроскопія і спектроскопія ближнього поля. Мікрокартографування деформацій в полікристалічних алмазних плівках. Підсилена поверхнею спектроскопія КРС (SERS). TERS-спектроскопія. Застосування. Досягнення і перспективи сучасних КРС-спектрометрів.

ТЕМА 3. Тема 4.

Методика першопринципних розрахунків та моделювання густини станів твердих тіл, наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур (2 год.)

Елементи квантової теорії коливних спектрів молекулярних систем. Наближення незалежних частинок. Метод самоузгодженого поля. Детермінант Слейтера і метод Хартрі-Фока для багатоелектронного атома. Метод Хартрі-Фока для молекулярних фрагментів. Наближення МО ЛКАО. Рівняння Рутана. Обмежений та необмежений методи ХФ. Недоліки методу ХФ та електронна кореляція. Ієрархія методів квантової хімії. Базисні функції для неемпіричних розрахунків. Метод теорії функціоналу густини (DFT). Особливості електронної структури фрагментів сульфідів миш'яку та сірки. Розрахунок оптимальних геометричних конфігурацій, енергій та стабільностей кластерів Ge_nS_m – фрагментів локальної структури стекол GeS_2 . Розрахунок електронних властивостей та оцінка значень енергетичної щільності кластерів. Визначення густини станів із низькочастотних Раман спектрів. Межі і обмеження методу.

6.2. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ

(денне форма навчання)

Денна форма навчання

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Форма навчання: денна					
	Усього	у тому числі				
		Лекції	практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота
1-й семестр						
Модуль 1						
Тема 1 Використання синхротронного випромінювання для аналізу твердих тіл та наноб'єктів. Схема і основні параметри синхротронного центру.	24	4	4			16
Тема 2. Рентгеноелектронна спектроскопія та її застосування для дослідження твердих тіл та наноб'єктів.	24	4	6			14
Тема 3. Оже-електронна спектроскопія – метод дослідження електронної структури.	26	6	6			14
Тема 4. Комбінаційне розсіяння світла (КРС) в твердих тілах та наноб'єктах . Фотолюмінесцентна спектроскопія квантоворозмірних об'єктів	26	6	6			14
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	100	20	22			58
2-й семестр						
Модуль 2						
Тема 1. Коливні властивості наноструктур	26	4	4			18
Тема 2. Раманівська мікроспектроскопія	28	4	6			18
Тема 3. Моделювання густини станів твердих тіл нанорозмірних структур	28	6	6			16
Тема 4. Моделювання наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур	28	6	6			16
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	110	20	22			68
Разом за семестр	210	40	44			126

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ

(Заочна форма навчання)

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин				
	Форма навчання: заочна				
	Усього	у тому числі			
Лекції		практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота
1-й семестр					
Модуль 1					
Тема 1 Використання синхротронного випромінювання для аналізу твердих тіл та наноб'єктів. Схема і основні параметри синхротронного центру.	24	2			22
Тема 2. Рентгеноелектронна спектроскопія та її застосування для дослідження твердих тіл та наноб'єктів.	26	2	2		22
Тема 3. Оже-електронна спектроскопія – метод дослідження електронної структури.	26	2	2		22
Тема 4. Комбінаційне розсіяння світла (КРС) в твердих тілах та наноб'єктах . Фотолюмінесцентна спектроскопія квантоворозмірних об'єктів	24	2			22
Модульна контрольна робота	2				
Разом за модуль	100	8	4		88
2-й семестр					
Модуль 2					
Тема 1 Коливні властивості наноструктур	28	2	2		24
Тема 2. Раманівська мікроспектроскопія	28	2	2		24
Тема 3. Моделювання густини станів твердих тіл	28	2			26
Тема 4. Моделювання густини станів наноструктурованих матеріалів та нанорозмірних структур	26	2			24
Модульна контрольна робота	2				
Разом за модуль	110	8	4		98
Разом за семестр	210	16	8		186

6.3. Теми практичних (семінарських, лабораторних) занять

1.	Класифікація методів діагностики поверхні твердих тіл.	2	
2.	Сучасні КРС-спектрометри. Макро і конфокальна КРС-спектроскопія. Основні компоненти і технічні характеристики КРС-спектрометрів. Роздільна здатність; дисперсія; світлосила. Джерела світла. Детектори. Техніка експерименту. Конфігурація експерименту КРС. Поляризаційні вимірювання. Позначення Порто. Приклади спектрів КРС.	2	
3.	Методики EXAFS-спектроскопії з використанням синхротронного випромінювання: методика флуоресцентної EXAFS-спектроскопії; методика поверхневої EXAFS-спектроскопії;	2	
4.	Основні поняття, терміни і визначення в аналізі та діагностиці наночастинок і наноматеріалів. Класифікація методів дослідження розмірів, структури, властивостей наночастинок і наноматеріалів.	4	2
5.	Розрахунки коливних спектрів нанокристалів.	4	2
6.	Фононні спектри алмазу, графіту, графену, фуллеренів, вуглецевих нанотрубок, аморфного вуглецю, склоподібний графіту, сажі.	2	
7.	Фононний спектр вюртцитної структури (w-GaN). Фононні спектри КРС твердих розчинів напівпровідників. Одно-, двох і трьохмодовий тип перебудови фононного спектру. Політипи карбиду кремнію і їх фононні спектри.	2	
8.	Підсилена поверхнею спектроскопія КРС (SERS).	2	
9.	Обладнання і методика досліджень двофотонного поглинання в твердих тілах.	4	2
10.	Низькочастотне Раман розсіювання в некристалічних матеріалах. Визначення густини станів із низькочастотних Раман спектрів.	2	
11.	Терагерцова спектроскопія.	4	2

12.	Мікрокартографування деформацій в полікристалічних алмазних плівках.	4	
13.	Власне та індуковане структурне розупорядкування в напівпровідниках.	4	
14.	Визначення типу окисних фаз із спектрів фотолюмінесценції.	4	
15.	Застосування ВКР і КАРС в біології і медичній діагностиці.	2	
		44	8

Контрольні запитання до змістового модуля 1

1. Намалювати принципову схему приладів для рентгенівської фотоелектронній спектроскопії (РФЕС) і оже-електронної спектроскопії (ОЕС) для аналізу поверхні і описати їх можливості для аналізу.
2. Охарактеризувати розподіл електронів по енергіях в методах електронної спектроскопії. Склад електронного спектру.
3. Чому залежить глибина відбору аналітичної інформації в методах електронної спектроскопії .
4. Чому методи електронної спектроскопії чутливі до стану поверхні
5. аналізованого зразка?
6. Запропонуйте способи варіювання глибини відбору аналітичної інформації.
7. Чим відрізняється РФЕС і УФЕС?
8. Яка глибина інформативного аналізованого шару твердих тіл в методах РФЕС і УФЕС?
9. Як будується комірка Вігнера-Зейтца і зона Бріллюена ?
10. Фонони.
11. Наближення гармонічного осцилятора.
12. Нормальні коливання.
13. Дисперсія коливань в трьохмірній решітці. Кількість віток.
14. Акустичні і оптичні коливання.
15. Повздовжні і поперечні оптичні (акустичні) хвилі.
16. Співвідношення Ліддана-Сакса-Теллера.
17. В чому принципові відмінності між акустичними і оптичними коливаннями решітки ?
18. Які властивості твердих тіл неможливо пояснити в рамках гармонічного опису коливань решітки ?
19. Спектральні параметри фононної смуги
20. Закон збереження енергії і імпульсу в процесі КРС
21. Чому в спектрі КРС кристалів реєструються дуже вузькі смуги випромінювання (фононні лінії) ?
22. Чому в процесі комбінаційного розсіяння світла в кристалах приймають участь лише довгохвильові фонони, хвильовий вектор яких є менше 10^{-4} \AA^{-1} ?
23. Розсіяння на акустичних фононах (Манделштама-Бріллюена)
24. Затухання фононів (ангармонізм).
25. Параметр Грюнайзена. Яким основним фактором обумовлена температурна залежність параметра Грюнайзена ?
26. Взаємодія електронів з акустичними фононами. Деформаційний потенціал.
27. Взаємодія електронів з оптичними фононами. Фрьоліхівський механізм.
28. Полярон
29. Переваги лазерних джерел збудження спектрів КРС
30. Геометрії експерименту КРС
31. Поляризація. Позначення Порто.
32. КРС першого та другого порядку порядку в моноатомних кристалах з алмазною кристалічною ґраткою. Алмаз, кремній, германій. Селен.
33. Фононні спектри кристалів з одномодовим типом перебудови спектрів ($\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{F}_2$, $\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{F}_2$)
34. Фононні спектри кристалів з двохмодовим типом перебудови спектрів ($\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$, $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$)
35. Фононні спектри різних політипів карбїду кремнію.

ЗАВДАННЯ МОДУЛЬНОЇ КОНТРОЛЬНОЇ РОБОТИ

Модульна контрольна робота № 1

1. Класичний і квантовомеханічний підхід для опису коливних спектрів.
2. Коливання і хвилі в лінійному одномірному періодичному ланцюжку з атомами одного типу.
3. Закон дисперсії для коливань одномірного періодичного ланцюжка з атомами двох типів. Акустичні і оптичні коливання. Повздовжні і поперечні оптичні (акустичні) хвилі.
4. Коливання атомів тривимірної решітки. Нормальні координати. Кінетична і потенціальна енергія коливань атомів. Фонони.
5. Кубічна структура. Фонони в кубічних кристалах. Іонний зв'язок в полярних кристалах. Коливання в полярних кубічних кристалах. Співвідношення Ліддана-Сакса-Теллера.
6. Елементи симетрії кристалічних структур. Решітки Браве. Параметри Вейса. Індеси Мюллера. Як побудува комірку Вігнера-Зейтца і зони Бріллюена ?
7. Фонони в кристалах з вюрцитною кристалічною ґраткою. Модель Лоудона для одноосних кристалів і її застосування до нітридів АЗВ5 групи.
8. Фізичні основи комбінаційного розсіяння світла (КРС). Макроскопічна (класична) і мікроскопічна теорія КРС.
9. Фізичні основи вимушеного і когерентного антистоксового комбінаційного розсіяння світла (ВКР і КАРС). Застосування.
10. Фр'юлівська електрон-фононна взаємодія в полярних кристалах. Правила відбору. Приклади. Алмаз, кремній і германій.
11. Сучасні КРС-спектрометри. Макро і конфокальна КРС-спектроскопія. Основні компоненти і технічні характеристики КРС-спектрометрів.
12. Техніка експерименту КРС. Поляризаційні вимірювання. Позначення Порто. Приклади спектрів КРС.
13. Розсіяння на акустичних фононах (Мандельштама-Бріллюена).
14. Інфрачервона спектроскопія: спектри поглинання (Фононні процеси).
15. Механізми поглинання світла в напівпровідниках. Край поглинання у прямозонних і непрямоzonних напівпровідниках. Край Урбаха. Ефект Бурштейна-Мосса
16. Фононні спектри змішаних напівпровідників. Локальні коливання домішок.
17. ІЧ спектроскопія молекулярних коливань. Типи молекулярних коливань.
18. Тензор комбінаційне розсіяння світла і правила відбору. Алмаз. Графіт.
19. Затухання фононів (ангармонізм).
20. Деформаційний потенціал. Фр'юлівська взаємодія в полярних кристалах.
21. Фонони структури типу цинкової обманки (GaAs). Фононний спектр вюрцитної структури (w-GaN).
22. Фононні спектри КРС твердих розчинів напівпровідників. Одно-, двох і трьохмодовий тип перебудови фононного спектру. Політипи карбиду кремнію та їх фононні спектри.

Модульна контрольна робота № 2

1. Резонансне комбінаційне розсіяння світла в кристалах. Вхідний, вихідний резонанс.
2. Багатофононне резонансне КРС і електрон-фононна взаємодія.
3. Комбінаційне розсіяння на змішаних LO фонон-плазмових збудженнях.
4. Механізми розсіяння: деформаційний потенціал і електронно-оптичний механізм, механізм флуктуації зарядової густини та незбереження хвильового вектора.
5. Електронне КРС. КРС на магнонах.
6. Розмірно-обмежені 3D, 2D, 1D, 0D кристалічні середовища. Дискретність хвильового вектора. Квантово-розмірні ефекти - квантування енергії електронів, фононів.
7. Двомірна квантова яма, одномірна квантова нитка і нульмірна квантова точка.
8. Надгратки. Фонони в надгратках. Наближення пружного континуума. Раманівське розсіяння на складених (folding phonons) акустичних фононах.
9. Конфаймент фононів. Раманівське розсіяння на квантованих конфайментних оптичних фононах (Confinement modes).
10. Раманівське розсіяння на інтерфейсних модах (Interface modes).
11. Фонони в нанокристалах. Модель пружного континуума. Низькочастотна “дихаюча” мода - Лембовська мода.
12. Фонони в нанокристалах. Модель механічного континуума (модель Ріхтера). Конфайментні оптичні моди.
13. Модель діелектричного континуума. Інтерфейсні (поверхневі) оптичні моди.
14. Структурні форми елементарного вуглецю з різним координаційним числом і дальністю впорядкування.
15. Фононні спектри алмазу, графіту, графену, вуглецевих нанотрубок.
16. Субмікронна спектроскопія мікро-КРС. Конфокальна спектроскопія і спектроскопія ближнього поля.
17. Підсилена поверхнею спектроскопія КРС(SERS). Застосування.
18. Досягнення і перспективи сучасних КРС-спектрометрів.
Мікроспектроскопія КРС біологічних об'єктів
19. TERS-спектроскопія.

ПРОБЛЕМНІ ТЕМИ ДЛЯ САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ:

1. Класифікація методів діагностики поверхні твердих тіл.
2. Застосування синхротронного випромінювання.
3. Сателіти рентгенівських спектрів.
4. Застосування оже-спектроскопії.
5. Методика EXAFS-спектроскопії з використанням синхротронного випромінювання: методика флуоресцентної EXAFS –спектроскопії; методика поверхневої EXAFS – спектроскопії;
6. Методика EXAFS - спектроскопії оптичного поглинання; EXAFS -спектроскопії повного зовнішнього відбиття.
7. Роль багатоелектронних ефектів в формуванні форми електронних спектрів.
8. Вплив стану поверхні зразка на особливості фізичних процесів у тунельному контакті та роботу тунельного сенсора.

9. Методи візуалізації СЗМ зображень.
10. Проблема глітчей в EXAFS – спектрах.

Варіант домашнього завдання по темі "РФЕС"

1. Фізичні основи методу РФЕС
2. Методика обліку зарядки поверхні зразків.
3. Калібрування спектрів РФЕС по енергії зв'язку. Методи стандартів.
4. Кількісний аналіз даних РФЕС
5. Аналіз РФЕ-спектрів. Хімічні зсуви.
6. Закономірності в інтерпретації рентгеноелектронних спектрів.

Варіант контрольної роботи

Рентгенофотоелектронна, оже і УФЕ-спектроскопії

1. Намалювати принципову схему приладів для рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (РФЕС) і оже-електронної спектроскопії (ОЕС) для аналізу поверхні і описати їх можливості для аналізу.
2. Охарактеризувати розподіл електронів по енергіях в методах електронної спектроскопії. Склад електронного спектра.
3. Чому залежить глибина відбору аналітичної інформації в методах електронної спектроскопії .
4. Чому методи електронної спектроскопії чутливі до стану поверхні
5. аналізованого зразка?
6. Запропонуйте способи варіювання глибини відбору аналітичної інформації.
7. Чим відрізняється РФЕС і УФЕС?
8. Яка глибина інформативного аналізованого шару твердих тіл в методах РФЕС і УФЕС?

7. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА

Технічні засоби: Мультимедійний проєктор.

Обладнання: персональні ком'ютери, ноутбуки.

Програмне забезпечення Windows 10, Microsoft Power Point.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

Основна:

1. В.Мица, О.Фегер, Р.Голомб, В. Ткач, О.Мица, М.Іванда, С.Петрецький .Взаємозв'язок низькотемпературних аномалій теплопровідності та низькочастотних раман спектрів широкозонних халькогенідних стекел для оптичних покриттів силової оптики. Видавництво ТОВ «Рік-У», 2018 – 140 с.
2. Міца В.М., Голомб Р., Ловас Г., Кондрат О., Вереш М., Цитровський А., Хіміч Л., Чік А. Атмосферна корозія телекомунікаційних оптичних середовищ для халькогенідної фотоники: склоподібний і кристалічний дисульфід германію. Вид. «ФОП Сабов Ф.М.», Ужгород, 2017.-126 с.
3. Мица В.М. Колебательные спектры и структурные корреляции в бескислородных стеклообразных сплавах: К., Учебно-методический кабинет по высшему образованию, 1992, -55 с.
4. I.Beszeda, T.Hadházy, S.Kokenyesi, V.Mitsa, Nemkristályos szilárd anyagok szerkezete és spektroszkópiai vizsgálata ,MTA Szabolcs-Szatmár Bereg Megyei Tudományos Testületének Közleményei, Sorozatszám: 23. Nyíregyháza – Ungvár. (1994.).102 p. ISBN:963-8048-174.
5. Mitsa V., Holomb R., Veres M., Koós M. “Raman szórás nanoszerkezetű kalkogenid üvegekben”. Hungarian Academy of Sciences. Budapest: Intermix Kiadó, - 2009 . ISBN 978-963-9814-18-9.
6. Рентгеновские спектры молекул / Л.Н. Мазалов – Новосибирск: Наука, 2003. – 328 с.
7. Немошкаленко В.В., Алешин В.Г. Электронная спектроскопия кристаллов. – Киев: Наук.думка, 1983. – 283 с.
8. Электронная спектроскопия / К.Зигбан, Н. Нордлинг, А.Фальман и др. – М.: Мир, 1971. – 493 с.
9. Рентгеноспектральный метод изучения структуры аморфных тел: EXAFS – спектроскопия /Д.И. Кочубей, Ю.А. Бабанов, К.И. Замаараев и др. – Новосибирск.: Наука, Сиб.отд., 1988. –306 с.
10. Немошкаленко В.В. Рентгеновская эмиссионная спектроскопия металлов и сплавов. – К.:Наукова думка, 1972. – 318 с.
11. Баринский Р.Л., Нефедов В.И. Рентгеноспектральное определение заряда атомов в молекулах. – М.: Ниука, 1966. – 247 с.
12. Немошкаленко В.В., Алешин В.Г. Теоретические основы рентгеновской эмиссионной спектроскопии. – К.: Наукова думка, 1974. – 382 с.
13. В.Л.Карбовский, А.П.Шпак. Рентгеновская и электронная спектроскопия. –К. Наукова думка,2010, 264 с.
14. Рассеяние света в твердых телах /Под ред. М.Кардоны), М.,Мир, 1979, 390 с.
15. Фабелинский И.Л. Комбинационному рассеянию света – 70 лет (Из истории физики) Успехи физических наук, 1998, т.168, №12, с.1342-1360.
16. П.Н.Шорыгин. Комбинационное рассеяние света вдали и вблизи от резонанса. Успехи физических наук, 1973, т.19, с.293.
17. Рассеяние света в твердых телах IV Электронное рассеяние, спиновые эффекты, морфические эффекты. /Под ред. М.Кардоны), М.,Мир, 1986, 408 с.
18. Light Scatterinf in Solids V. Superlattice and ather microstructures. Ed. By V.Cardona and G.Guntherrodt.- Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1989, 211 p.
19. Light Scatterinf in Solids VIII. Fullerenes, Semiconductor Surface, Coherent Phonons. Ed. By V.Cardona and G.Guntherrodt.- Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2000, 220 p.
20. Light Scattering in Solids IX. Novel Materials and Techniques. Ed. by V.Cardona and G.Guntherrodt.- Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2007, 422p.

21. W.H. Weber, R. Merlin. Raman Scattering in Materials Science. - Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2000, 492 p.
22. Спектроскопия комбинационного рассеяния света в газах и жидкостях (Под ред. А.Вебера) М.: Мир , 1982, 373 с.
23. A.Fadini, F.-M.Shnepel. Vibrational Spectroscopy: Methods and Applications. Ellis Horwood Ltd, Chichester, 1989
24. Even Smith, Geoffrey Dent. Modern Raman Spectroscopy – A practical approach.- John Willey Sons, Ltd, 2005, 225 с.
25. R.L.McCreery. Raman Spectroscopy for Chemical Analysis. John Willey Sons, Inc., New York, 2000.
26. Питер Ю, Кардона М. Основы физики полупроводников / Под ред. И.И.Решинной / Физматлит, Москва, 2002,560 с.
27. Применение спектров комбинационного рассеяния / под ред. А.Андерсона, пер. с англ./ М.: Мир , 1977, 586 с.
28. Сущинский М.М. Комбинационное рассеяние света и строение вещества. - М: Наука, 1981, 183 с.
29. Сущинский М.М. Спектры комбинационного рассеяния света молекул и кристаллов, - М: Наука, 1969, 576 с.
30. Строшило М., Дуга М. Фононы в наноструктурах /под ред.Г.Н.Жижина, пер. с англ./ М.: Физматлит, 2006, 319 с.
31. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела.- М.: Физматлит, 1963, 384 с.
32. Corle T.R., Kino G.S. Confocal Scanning Optical Microscope and Related Imaging Systems.- Academ. pres., San Diego, London, Boston,..., 2000, 331 p.
33. Гиганское комбинационное рассеяние /под ред.Р.Ченга, Т.Фуртака/.- М.: Мир, 1984, 407 с.

Додаткова:

34. Сучасні методи дослідження структури матеріалів. Ч. I. Фізика рентгенівських променів / Шпак А.П., Карбівський В.Л., Куницький Ю.А., Пошелюжний О.М. – К.:Академперіодика, 2001. – 103 с.
35. В.Л. Миронов. Основы сканирующей зондовой микроскопии // РАН ИФМ, г. Нижний Новгород, 2004. – 110с.
36. В.К.Неволин. Физические основы туннельно-зондовой нанотехнологии / М.: Мир. 2004. 100 с.
37. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. — М.:Наука, 1977.
38. Херман, М. Полупроводниковые сверхрешетки / М. Херман. – М.: Мир, 1989,238 с.
39. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки. // УФН, Т. 167, №9 (1997) С. 945– 972.
40. Вуль А.Я. Фуллерены как материал электронной техники. //Материалы электронной техники. - №7 (1999) С. 4–7.
41. M.Burghard. Electronic and vibrational properties of chemically modified single-well carbon nanotubes. Surface Science Reports 58 (2005) p. 1-109.
42. Гусев, А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев. – М.: Физматлит, 2005.
43. Оптика наноструктур / Под ред. А.В. Федорова. – СПб: Недра, 2005.
44. Физика низкоразмерных систем / А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков. – СПб: Наука, 2001.
45. Оптические явления в полупроводниковых квантово-размерных структурах / Л.Е. Воробьев, Л.Г. Голуб, С.Н. Данилов, Е.Л. Ивченко, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин. – СПб: СПб ГТУ, 2000.
46. Bimberg, D. Quantum dot heterostructures / D. Bimberg, M. Grundman, N.N. Ledentsov. NY: J. Wiley, 1999.
47. Брандт, Н.Б. Квазичастицы в физике конденсированного состояния / Н.Б. Брандт, В.А. Кульбачинский. – М.: Физматлит, 2005.
48. Китель, Ч. Квантовая теория твердых тел / Ч. Китель. – М.: Наука, 1967.
49. Бонч-Бруевич, В.Л. Физика полупроводников / В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. – М.: Наука, 1977.
50. Давыдов, А.С. Теория твердого тела / А.С. Давыдов. – М.: Наука, 1976.

Рекомендації по використанню Інтернет-ресурсів і інших електронних інформаційних джерел:

1. <http://www.ru.wikipedia.org/wiki/Спектроскопия>
2. www.elsevier.com
3. <http://www.elibrary.ru>
4. <http://www.nanonewsnet.ru>