

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Запорізький національний технічний університет

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання курсового проекту

з дисципліни

**ОСНОВИ ФІЗИКИ ПОВЕРХНІ ТА УЛЬТРАДИСПЕРСНИХ
СЕРЕДОВИЩ**

для студентів спеціальності 7.05080101 і 8.05080101

„Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої“

денної і заочної форм навчання

Методичні вказівки до виконання курсового проекту з дисципліни "Основи фізики поверхні та ультрадисперсних середовищ" для студентів спеціальності 7.05080101 і 8.05080101 „Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої“ денної і заочної форм навчання / Укл.: В.В. Погосов, А.В. Коротун, А.В. Бабіч.- Запоріжжя: ЗНТУ, 2014. – 21 с.

Укладачі: В.В. Погосов, проф., д-р фіз.-матем. наук,
А.В. Коротун, доц., канд. фіз.-мат. наук,
А.В. Бабіч, доц., канд. фіз.-мат. наук

Рецензент: В.М. Матюшин, проф., д-р фіз.-матем. наук

Відповідальний за випуск: Є.Л. Жавжаров, доц., канд. фіз.-мат. наук

Затверджено
на засіданні кафедри
мікро- та наноелектроніки
Протокол №1
від „05“ серпня 20 14 р.

З М І С Т

1 Мета і завдання курсового проекту	4
2 Завдання на курсовий проект	4
3 Організаційні вказівки	5
4 Методичні вказівки до виконання розділів курсового проекту	5
4.1 Вступ	5
4.2 Енергетичні характеристики поверхні	7
4.2.1 Поверхнева енергія	7
4.2.2 Потенціал іонізації, робота виходу	8
4.3 Розрахунок поверхневої енергії металів і роботи виходу електронів методом функціоналу густини	11
4.3.1 Розрахунок поверхневої енергії	12
4.3.2 Розрахунок роботи виходу	16
4.4 Варіанти завдань до тем	17
4.5 Теми рефератів по варіантам	18
4.6 Питання, які виносяться на самостійну роботу	19
Додаток Таблиця коефіцієнтів переведу одиниць	21
Перелік основної та додаткової літератури	21

1 МЕТА І ЗАВДАННЯ КУРСОВОГО ПРОЕКТУ

Мета курсового проекту – поглибити і розширити теоретичні знання в галузі фізики низькорозмірних структур, сформувати у студентів навички орієнтування в потоці науково-технічної інформації та забезпечити їм можливість використання фізичних законів в своїй галузі техніки по застосуванню сучасних, найбільш ефективних методів розрахунків і засобів обчислювальної техніки, по користуванню спеціальною науковою і довідковою літературою, діючими стандартами.

Розвиток наноелектроніки та нанотехнологій пов'язані з успіхами багатьох наукових напрямків теоретичної та експериментальної фізики.

При роботі над курсовим проектом студент набуває досвід для подальшої роботи над дипломним проектом і у майбутній інженерній діяльності.

В результаті виконання даного курсового проекту студент повинен знати:

- основні фізичні явища в системі малорозмірних об'єктів;
- фундаментальні закони природи;
- методи сучасної теоретичної фізики;
- методи фізичних досліджень;
- внутрішні зв'язки між окремими розділами науки;
- основні числові значення фізичних величин у природі та у техніці.

Після виконання курсового проекту студент повинен уміти:

- проводити розрахунки характеристик поверхні;
- використовувати фізичні моделі для рішення практичних задач.

2 ЗАВДАННЯ НА КУРСОВИЙ ПРОЕКТ

Тема курсового проекту задається студенту керівником курсового проекту. Студент може запропонувати свою тему з обґрунтуванням доцільності її розробки.

Підписане викладачем завдання на курсовий проект видається студенту на початку семестру за типовою формою.

3 ОРГАНІЗАЦІЙНІ ВКАЗІВКИ

Робота над курсовим проектом повинна проводитись згідно з календарним планом. Приблизний календарний план виконання курсового проекту розробляється керівником проекту сумісно із студентом після видачі завдання на проект.

У процесі виконання проекту студент повинен доповідати керівнику про поетапне виконання ним робіт.

4 МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ РОЗДІЛІВ КУРСОВОГО ПРОЕКТУ

4.1 Вступ

Успіхи сучасної мікро- і наноелектроніки, а також функціональної електроніки базуються на фундаментальних дослідженнях фізики поверхні твердого тіла. Різноманітні електронні, атомні і молекулярні процеси, що відбуваються на поверхні твердих тіл, гостро цікавлять спеціалістів в області конструкційних матеріалів, технологів, оптиків, магнітологів, радіофізиків, що мають справу з плівками і шаровими структурами, що мають розвинуті межі поділу фаз.

Настільки ж значимі проблеми поверхні і для хімії, біології, медицини. Поверхневі процеси грають основну роль у явищах адсорбції, електродних процесах, складних міжфазових процесах клітин, пористих органічних і неорганічних речовинах. Такі найважливіші сучасні технологічні процеси, як молекулярна епітаксія, іонне легування, стимульована дифузія, тісно пов'язані з явищами на поверхні твердого тіла.

У зв'язку з цим вивчення електронної структури плоскої поверхні і поверхні малих часток є невід'ємною складовою у підготовці спеціалістів електронної техніки.

Ультрадисперсні середовища. Молекули, що знаходяться у внутрішніх шарах речовини, відчують у середньому однаковий в усіх напрямках вплив з боку навколишніх молекул, молекули ж приповерхневого шару піддаються неоднаковому впливу з боку

внутрішніх шарів речовини і з боку, що граничить із поверхневим шаром середовища. Так, на поверхні поділу рідина-повітря молекули рідини, що знаходяться в поверхневому шарі, відчувають більший вплив з боку сусідніх молекул внутрішніх шарів рідини, ніж із боку молекул газу. Тому властивості поверхневих шарів речовини завжди дещо відрізняються від властивостей об'єму. Поверхневі властивості впливають і на інші характеристики речовини. Для речовин, поверхня яких порівняно невелика, ці впливи виявляються слабо. Але в міру збільшення поверхні, що відбувається внаслідок підвищення ступеня дисперсності (ступеня роздробленості) речовини, або збільшення його пористості, вплив поверхневих властивостей починає виявлятися усе сильніше і стає значним для речовин, що мають сильно розвинуту поверхню.

Дослідження ультрадисперсного стану речовини, його властивостей, пов'язано з найважливішими практичними застосуваннями у різноманітних областях науки, таких, як хімія каталізу, матеріалознавство, фізична електроніка, мікроелектроніка, оптика, магнетизм тощо. Не дивно, що окремі аспекти фізики малих часток (багатоатомних комплексів або агрегатів) розглядалися і продовжують обговорюватися на різноманітних конференціях.

У літературі виклад теоретичного й експериментального матеріалу, як правило, ставиться до розгляду властивостей окремої частки. Адже зрозуміло, що ансамбль малих часток у кінцевому рахунку характеризується тими властивостями, що одержує тверде тіло при зменшенні його розмірів. При цьому зміни фізичних властивостей спостерігаються лише при досягненні своїх характерно малих розмірів. І навіть якщо якась властивість ансамблю малих часток має кооперативний (колективний) характер, то і тоді в якості початкового наближення важливо знати, що відбувається з окремо взятою малою часткою твердого тіла. На перший погляд несподіваним є така електронна властивість, як надпровідність. Пояснюється це необхідністю показати, якими змінами супроводжується перехід у стан, що надпровідить, за рахунок деформації фононного спектра металевих часток при зменшенні їхнього розміру. Характерні розміри малості стосовно різноманітних фізичних властивостей розташовуються в основному в інтервалі від декількох ангстрем, коли виявляється квантування електронного енергетичного спектра, до декількох сотень ангстрем для ефектів, обумовлених сумірністю

внесків поверхневого й об'ємного компонентів у вільну енергію частки. Використовувані в порошковій металургії частки мають набагато більші розміри, оскільки відомі на сьогоднішній день технологічні прийоми дозволяють одержувати в достатніх для практичних застосувань кількостях частки розмірами, які тільки наближаються до вказаного інтервалу.

Маленькі металеві частинки (кластери), які знаходяться в точковому (квантовому) контакті з підшарком можуть бути використані в одноелектроніці, тобто при конструюванні квантових транзисторів та діодів. Струм у цих приладах переноситися окремими електронами по черзі.

4.2 Енергетичні характеристики поверхні

4.2.1 Поверхнева енергія

Поверхнева енергія σ (Surface Energy), кристалічної грані дорівнює роботі (віднесеної до одиниці площі знову сформованої поверхні), що необхідно затратити, щоб розколоти кристал на дві частини уздовж цієї кристалічної площини. Розглянемо макроскопічний кристал і будемо вважати обидві частини, на які розколотий кристал, однаковими (рис.4.1).

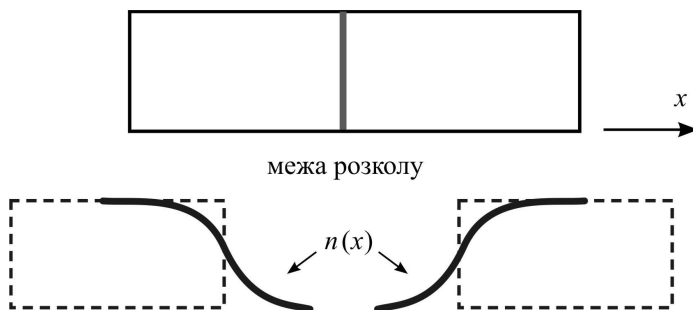


Рисунок 4.1 - Схематичне уявлення енергетичної картини

Після утворення 2-х **нових** поверхонь електронна хмара уздовж межі розколу впливає назовні, а іонний розподіл залишається у вигляді сходинок (див.також рис. 4.3).

Нехай S – площа знову сформованої грані кожного з осколків, $E[n(x)]$ – повна енергія кожного осколка, а \bar{E} – повна енергія нерозколотого кристалу. Тоді

$$\sigma = \frac{1}{2S} (2E[n(x)] - \bar{E}) > 0 \quad (4.1)$$

4.2.2 Потенціал іонізації, робота виходу

У атомній фізиці вводиться таке поняття як потенціал іонізації IP (Ionization Potential). За аналогією, для малих часток також використовується це поняття. Для напівнескінченних зразків із плоскою поверхнею замість IP використовується робота виходу W_0 (Work Function). Для металеві кульки радіуса R

$$IP(R) = W_0 + \frac{e^2}{2\epsilon_0 R} \quad (4.2)$$

Знання розмірної залежності $IP(R)$, де R – радіус частки, є важливими для розуміння контактних явищ у системі малих часток, їхніх емісійних властивостей. Для металевих часток розміром до 10 \AA при кімнатній температурі така залежність з'являється через квантові розмірні ефекти, оскільки при цьому збільшується енергія Фермі (енергія найвищого заповненого рівня щодо дна потенційної ями). Дно потенційної ями, якою "апроксимується" частка, також залежить від її розміру. Звідси випливає, що IP повинний би знижуватися зі зменшенням розміру часток, якби глибина потенційної ями залишалася фіксованою (яка насамперед залежить від розміру), що, узагалі говорячи, не вірно. Квантування електронних станів зручно простежити з розрахунків електронної структури, що для дуже малих часток можуть бути проведені методами квантової хімії. Такий підхід виявляє тенденцію до збільшення відстані між рівнем вакууму (нуль для відліку енергії) і найвищим заповненим рівнем (рівнем Фермі) при зменшенні числа атомів у частці. Так, IP 55-атомної частки

срібла складає 6,1 еВ проти 4,5 еВ у масивному стані. Аналогічно і для часток натрію.

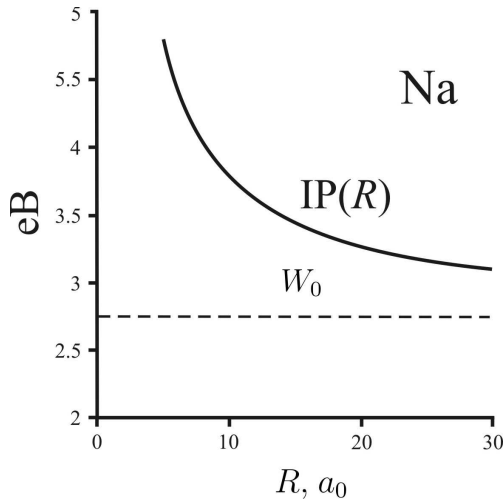


Рисунок 4.2 – Розмірна залежність робіт виходу

Більш того, обчислення, виконані, наприклад, для берилію, показують, що ріст IP із зменшенням розміру часток не є монотонним, IP робить загасаючі осциляції з амплітудою для часток берилію до 20 % і періодом порядку міжатомної відстані. У таких розрахунках відстані між атомами перших декількох координаційних сфер не можна вже ототожнювати з відомими для масивного кристала. Крім того, в основному виміри роботи виходу носять інтегральний характер, тому що проводяться для великої кількості часток, що мають розкид по розмірах, тому може мати сенс усереднити осциляції по міжатомній відстані.

Внаслідок того, що електронна густина $n(x)$ не обривається на геометричній межі металу (див. рис. 4.1), а виступає назовні, кінетична енергія електронів зменшується (тому що ефективний об'єм, у якому знаходяться електрони збільшується). Розмиття електронної густини обмежено відповідним збільшенням потенційної енергії. У результаті утворюється подвійний заряджений прошарок атомних розмірів. Створений ним електростатичний бар'єр можна записати

$$D = \varphi(+\infty) - \varphi(-\infty) = \frac{4\pi e}{\epsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} [n(x) - n_+(x)] x dx > 0, \quad (4.3)$$

де $\varphi(x)$ – електростатичний потенціал.

Цей кулонівський бар'єр, який локалізований у мікроскопічній окрузі межі металу, по суті є поверхневою компонентою роботи виходу і не є єдиною перешкодою на шляху електрона з металу (див. рис.4.3). Усередині металу, енергія кожного електрона є зниженою на

величину $\frac{\delta E_{xc}(n)}{\delta n} < 0$ за рахунок утворення обмінно-кореляційної

дірки – “порожнини” (*exchange-correlation hole*) навколо нього (утворення порожнини зумовлено не класичним кулонівським відштовхуванням електронів друг від друга, а ефективним квантовим відштовхуванням за рахунок принципу Паулі). Таким чином, якщо визначити роботу виходу W_0 як мінімальну, необхідну для видалення електрона з об'єму металу на нескінченність, то з урахуванням поверхневого й об'ємного компонентів її можна записати

$$W_0 = D - E_F - \frac{\delta E_{xc}(n)}{\delta n}. \quad (4.4)$$

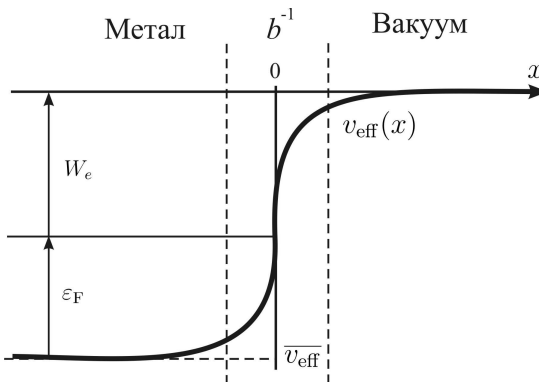


Рисунок 4.3 – Зліва знаходиться метал, справа - вакуум

Усі електрони при $T = 0$ знаходяться на рівнях лежачих в інтервалі $(U_{eff} + E_F) < E < U_{ff}$. У глибині металу (де градієнт від $U_{eff}(x)$ дорівнює 0), електричне поле відсутнє

$$U_{eff}(x) = \varphi(x) + \frac{\delta E_{xc}[n(x)]}{\delta n(x)}. \quad (4.5)$$

Саме таку кінетичну енергію (рівну по величині W_0) варто передати фермієвському електрону, щоб він переборював сумарний бар'єр \bar{U}_{eff} , що утримує його в металі. До недоліків цієї моделі варто віднести неможливість пояснення анізотропії роботи виходу монокристалів [1].

4.3 Розрахунок поверхневої енергії металів і роботи виходу електронів

4.3.1 Розрахунок поверхневої енергії

Використовується атомна система одиниць ($e^2 = \hbar = m = 1$) (див. Додаток).

Звернемося до розгляду моделі однорідного фону для поверхні металу (модель нестабільного желе, Jellium model). Це поверхневий аналог моделі, що широко використовується для вивчення об'ємних властивостей простих металів, зона провідності яких формується з s- і p- атомних рівнів.

Розглянемо випадок нескінченного кристала у припущенні, що заряд ґратки іонів рівномірно розмазаний по усьому об'єму і утворює однорідний позитивний фон із густиною \bar{n} , що різко обривається на координатній площині ZY . Інакше кажучи, візьмемо густина зарядів у виді:

$$\rho(x) = \bar{n}\Theta(-x) = \bar{n} \begin{cases} 1, x \leq 0 \\ 0, x > 0 \end{cases}, \quad (4.6)$$

де $\Theta(-x)$ - одинична сходянка функція Хевісайда.

Густина \bar{n} – це середня густина позитивного заряду іонної ґратки; зручною одиницею її виміру є радіус r_s , обумовлений формулою:

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3 \equiv \bar{n}^{-1} \quad (4.7)$$

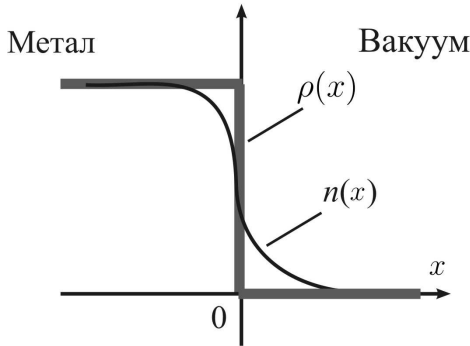


Рисунок 4.4 – Розподіл концентрації зарядів на поверхні металу

(в простих металах r_s змінюється від 2 до 6 а. о.) (1 а. о. довжини дорівнює борівському радіусу a_0).

Для однорідного металу, повна неелектростатична енергія:

$$G = \bar{g}V, \quad (4.8)$$

де V – об'єм металу,

\bar{g} – об'ємна густина неелектростатичної енергії однорідного електронного газу, що виглядає як:

$$\bar{g} \equiv g(\bar{n}). \quad (4.9)$$

У наближенні локальної густини повна енергія металу із урахуванням поверхні є

$$E = G + E_q = S \int_{-\infty}^{\infty} dx g(n(x)) + E_q, \quad (4.10)$$

де E_q – електростатична енергія взаємодії електронів і іонів.

Об'ємна густина енергії складається з наступних складових

$$g(n) = g_t(n) + g_{ex}(n) + g_{cor}(n) + g_g(n), \quad (4.11)$$

де $g_t(n)$ – об'ємна густина кінетичної енергії електронів;

$g_{ex}(n)$ – об'ємна густина обмінної енергії електронів;

$g_{cor}(n)$ – об'ємна густина кореляційної енергії електронів;

$g_g(n)$ – градієнтна поправка Вейцзеккера для кінетичної енергії електронів.

$$E_q = S \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) (n(x) - \rho(x)) = S \sigma_q, \quad (4.12)$$

де $\varphi(x)$ – електростатичний потенціал. Електростатичний потенціал визначається рівнянням Пуассона.

У такий спосіб:

$$\sigma_j = \sigma_q + \sigma_t + \sigma_g + \sigma_{ex} + \sigma_{cor}. \quad (4.13)$$

Для кінетичної енергії можна записати

$$g_t(n) = \frac{3}{10} k_F^2 n, \quad (4.14)$$

де $k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$ – імпульс Фермі, $E_F = \frac{k_F^2}{2}$ (в атомних одиницях Хартрі).

$$\sigma_t = \int_{-\infty}^0 dx [g_t(n(x) - g_t(\bar{n}))] + \int_0^{\infty} dx g_t(n(x)), \quad (4.15)$$

для градієнтної поправки

$$g_g = \frac{1}{72} \frac{|\nabla n|^2}{n}, \quad (4.16)$$

$$\sigma_g = \frac{1}{72} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{|\nabla n|^2}{n}, \quad (4.17)$$

для обмінної енергії

$$g_{ex} = -\frac{3}{4\pi} k_F n, \quad (4.18)$$

$$\sigma_{ex} = \int_{-\infty}^0 dx [g_{ex}(n(x) - g_{ex}(\bar{n}))] + \int_0^{\infty} dx g_{ex}(n(x)), \quad (4.19)$$

для кореляційної енергії

$$g_{cor} = -[0.0474 + 0.0155 \ln(k_F)]n,$$

$$\sigma_{cor} = \int_{-\infty}^0 dx [g_{cor}(n(x) - g_{cor}(\bar{n}))] + \int_0^{\infty} dx g_{cor}(n(x)). \quad (4.20)$$

Для знаходження оптимального виду функції $n(x)$ застосуємо варіаційний метод. Він полягає в завданні $n(x)$ параметричним рівнянням із варіаційним параметром (b), а потім із наступною мінімізацією повної енергії по цьому параметру.

Нехай

$$n(x) = \bar{n} \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{2} e^{bx}\right), & x \leq 0 \\ \frac{1}{2} e^{-bx}, & x > 0 \end{cases}, \quad (4.21)$$

де величина b^{-1} приблизно дорівнює ширині поверхневого шару (див. рис. 4.3).

Тоді, для електростатичного потенціалу маємо

$$\varphi(x) = -\frac{4\pi\bar{n}}{b^2} \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{2} e^{bx}\right), & x \leq 0 \\ \frac{1}{2} e^{-bx}, & x > 0 \end{cases}, \quad (4.22)$$

$$\sigma_q = C_q \frac{\bar{n}^2}{b^3} \quad (4.23)$$

Для кінетичної енергії

$$\sigma_t = C_t \frac{\bar{n}^{5/3}}{b} \quad (4.24)$$

Для градієнтної поправки

$$\sigma_g = C_g \bar{n} b \quad (4.25)$$

Для обміну

$$\sigma_{ex} = C_{ex} \frac{\bar{n}^{4/3}}{b} \quad (4.26)$$

Для кореляції

$$\sigma_{cor} = C_{cor} \frac{\bar{n}}{b} \quad (4.27)$$

Варіаційний параметр b знаходиться з принципу мінімізації поверхневої енергії. При оптимальному розподілі густини $n(x)$ значення σ менше, ніж при будь-якому іншому розподілі густини електронів.

У моделі стабілізованого желе (Stabilized Jellium model) поверхнева енергія є

$$\sigma_{sj} = \sigma_j + \langle \delta V \rangle_{WS} \int_{-\infty}^0 dx [n(x) - \bar{n}], \quad (4.28)$$

де

$$\langle \delta V \rangle_{WS} = -\bar{n} \frac{d\varepsilon_j(\bar{n})}{d\bar{n}}, \quad (4.29)$$

де $\varepsilon_j = g_j / \bar{n}$ – енергія на 1 електрон. Потенціал $\langle \delta V \rangle_{WS}$ враховує дискретність іонів та електрон-іонну взаємодію в псевдопотенціальному наближенні.

$$g(\bar{n}) = g_t(\bar{n}) + g_{ex}(\bar{n}) + g_{cor}(\bar{n}) + g_g(\bar{n})$$

4.3.2 Розрахунок роботи виходу

Якщо визначити роботу виходу W як мінімальну, необхідну для видалення електрона з об'єму металу на нескінченність, то з урахуванням поверхневого й об'ємного компонентів її можна записати в моделі нестабільного желе:

$$W_j = D - E_F - \frac{\delta E_{xc}(n)}{\delta n} = -\bar{\varphi} - \frac{d\bar{g}}{d\bar{n}}. \quad (4.31)$$

У моделі стабільного желе:

$$W_{sj} = W_j - \langle \delta V \rangle_{WS} \quad (4.32)$$

4.4 Варіанти завдань до тем

Розрахунок поверхневої енергії і роботи виходу металів в моделях нестабільного желе і стабільного желе (по формулах розділу 4.3). Вибір моделі, металів відповідає таблиці 4.1. Використовуючи дані варіанту, а також рівняння

$$\sigma_j = C_q \frac{\bar{n}^2}{b^3} - C_t \frac{\bar{n}^{5/3}}{b} + C_{ex} \frac{\bar{n}^{4/3}}{b} + C_{cor} \frac{\bar{n}}{b} + C_g \bar{n} b, \quad (4.50)$$

знайти мінімум залежності $\sigma_j(b)$ при заданому \bar{n} для кожного варіанта. Коефіцієнти в (4.50) розрахувати по формулах розділу 4.3. Значення $\sigma_j(b)$ у мінімумі порівняти з експериментальними значеннями поверхневого натягу. Побудувати графік $\sigma_j(b)$ при заданому \bar{n} . Значення параметру b , який відповідає мінімуму $\sigma_j(b)$ необхідно для розрахунку роботи виходу, яку теж необхідно порівняти з експериментом.

Аналогічні обчислення виконати в моделі стабільного желе, використовуючи формули (4.28) – (4.32).

Таблиця 4.1 – Завдання до розрахункової частини

Варіанти завдань		Метал	r_s, a_0
Модель нестаб. желе	Модель стаб. желе		
1	11	Cs	5,63
2	12	Na	3,99
3	13	Al	2,07
4	14	Cu	2,11
5	15	Ni	1,81
6	16	Au	2,09
7	17	Ti	1,92
8	18	Ca	3,27
9	19	Mg	2,65
10	20	Ni	1,81

4.5 Теми рефератів по варіантам

1. Елементи квантової інформатики.
2. Одноелектронні прилади на нанотрубках: технології виробництва та особливості їх вольт-амперних характеристик.
3. Дифракційні методи та методи електронної мікроскопії для дослідження наноматеріалів і композитів.
4. Фотонні кристали: технології виробництва, фізичні властивості та перспективи використання.
5. Одноелектронні прилади на кластерах: технології виробництва та особливості їх вольт-амперних характеристик.
6. Розмірний ефект температури плавлення плівок та кластерів.
7. Квантовий ефект Холла.
8. Квантові точки: технології вирощування, структура, фізичні властивості, практичне застосування.
9. Вуглецеві нанотрубки: технології виробництва, структура, фізико-хімічні властивості, практичне застосування.
10. Фулерени: технології виробництва, структура, фізико-хімічні властивості, практичне застосування.

11. Кластери атомів: технології виробництва, структура, фізичні властивості, практичне застосування.
12. Нанокристали: технології виробництва, структура, фізичні властивості, практичне застосування.
13. Застосування наноматеріалів у польових транзисторах.
14. Алмазоподібні нанокристали: технології виробництва, структура, фізичні властивості, практичне застосування.
15. Нанокмпозитні матеріали: технології виробництва, фізичні властивості, практичне застосування.
16. Принципи роботи скануючої тунельної та силової мікроскопії. Приклади практичного застосування.

4.6 Питання, які виносяться на самостійну роботу

МОДУЛЬ I

Огляд енергетичних властивостей у напрямку атом-кластер-конденсоване середовище. Рамки дії методів фізики твердого тіла та рідини, квантової хімії. Метод Хартрі – Фока (для справки див. курс ФТТ).

Використання методу функціоналу густини для опису неоднорідного електронного газу поблизу металевої поверхні. Теорема Хоенберга – Кона – Мерміна.

Електронний газ майже постійної густини. Електронний газ з густиною, яка повільно змінюється. Метод Кона – Шема. Визначення питомої поверхневої енергії та роботи виходу електронів.

Експерименти де Хіра. Розмірна залежність потенціалу іонізації заряджених металевих кластерів. Функціональний розклад енергії кластера по варіаціям електронної густини. Розмірні залежності хімічного потенціалу електронів, енергії когезії. Явище кулонівського вибуху заряджених кластерів. Критичний заряд кластерів.

МОДУЛЬ 2

Енергія зв'язку електронів і позитронів у діелектричних кластерах. Експеримент Хаберланда. Вплив самотискання (під дією поверхневої напруги) на критичні розміри кластерів. Енергія зв'язку позитронів в вакансіях металу.

Розмірна залежність поверхневого натягу кластерів. Протиріччя експериментальних і теоретичних досліджень. Визначення енергії утворення вакансії та теплоти випаровування атомів, як енергії поверхонь негативної і позитивної кривизни. Правило Френкеля – Ленгмюра. Спосіб Фогельсбергера для перевизначення еквімолекулярної поверхні.

Самоорганізація в низькорозмірних системах. Розрахунок іонізаційної рівноваги в кластерній плазмі насиченої пари металу. Електропровідність кластерної суміші – аналога композиту.

Проблема кульової блискавки. Колекції спостережень. Визначення. Характер руху. Поява і розпад. Функція розподілу по енергіям. Властивості кульової блискавки. Аналіз спостережень: взаємодія з навколишнім повітрям, характер збереження енергії. Моделювання кульової блискавки. Експерименти Тесли, Капіці, Корум. Фрактальні явища та першопричина кульової блискавки. Теорія Смірнова: фрактальний клубок – новий стан речовини.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. **Погосов, В. В.** Нанофізика і нанотехнології [Текст] / В. В. Погосов, Ю. А. Куницький, А. В. Бабіч, А. В. Коротун, А. П. Шпак. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2011. – 384 с.
2. **Петров, Ю. И.** Кластеры и малые частицы [Текст] / Ю. И. Петров. – М.: Наука, 1986. – 368 с.
3. **Непийко, С. А.** Физические свойства малых металлических частиц [Текст] / С. А. Непийко. – К.: Наукова думка, 1985. – 248 с.
4. Теория неоднородного электронного газа / ред. Лунквист С., Марч Н.М., М.: Мир. 1987.
5. **Зенгуил, Э.** Физика поверхности [Текст] / Э. Зенгуил. – М.: Мир, 1990. – 536 с.
6. **Нагаев, Э. Л.** Малые металлические частицы [Текст] / Э. Л. Нагаев // Успехи физических наук. – 1992. – Т. 162, №9. – С. 49 – 124.
7. **Батыгин, В. В.** Сборник задач по электродинамике [Текст] / В. В. Батыгин, И. Н. Топтыгин. – М.: НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“, 2002. – 640 с.
8. **Модинос, А.** Авто-, термо- и вторично-электронная эмиссионная спектроскопия [Текст] / А. Модинос. – М.: Наука, 1990. – 320 с.
9. **Леонтович, М. А.** Введение в термодинамику. Статистическая физика [Текст] / М. А. Леонтович. – М.: Наука, 1983. – 416 с.
10. **Абрикосов, А. А.** Основы теории металлов [Текст] / А. А. Абрикосов. – М.: Наука, 1987. – 520 с.
11. Задачи по физике твердого тела [Текст] / под ред. Г. Дж. Голдсмида. Пер. с англ. под ред. А. А. Гусева и М. П. Шаскольской. – М.: Наука, 1976. – 432 с.
12. **Галицкий, В. М.** Задачи по квантовой механике [Текст] / В. М. Галицкий. – М.: Едиториал УРСС, 2001. – 304 с. – (Задачи по квантовой механике: в 2 ч. / В. М. Галицкий; ч. 1).
13. **Галицкий, В. М.** Задачи по квантовой механике [Текст] / В. М. Галицкий. – М.: Едиториал УРСС, 2001. – 304 с. – (Задачи по квантовой механике: в 2 ч. / В. М. Галицкий; ч. 2).
14. Поверхностные свойства твердых тел [Текст] / Под ред. М. Грина. – М.: Мир, 1972. – 432 с.

Додаток А

Таблиця коефіцієнтів переведення одиниць

Атомні одиниці	
Довжини, $1a_0$	$0,529 \cdot 10^{-8}$ см
Енергії	27,21 еВ
Поверхневого натягу	$1,558 \cdot 10^3 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$
Концентрації, $1a_0^3$	$6,76 \cdot 10^{24}$ см ⁻³