

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Сучасні проблеми одержання функціональних матеріалів

спеціальність: 132 – Матеріалознавство

2022 навчальний рік

I. Опис навчальної дисципліни

Навчальна дисципліна обов'язкового компонента

Складена відповідно до освітньо-наукової програми підготовки докторів філософії (третій рівень вищої освіти) за спеціальністю 132 – Матеріалознавство.

Рік, на якому реалізується вивчення дисципліни – 1 та 2 (перший та другий)

Семестр, на якому реалізується вивчення дисципліни – 3 (третій)

Кількість кредитів – 5 кредитів

Загальна кількість годин – 150 годин

З них:

аудиторні заняття (лекції та семінари) – 60 годин

самостійна робота – 90 годин

II. Інформація про викладачів

1) ППП: Беспалова Ірина Ігорівна

Науковий ступінь: доктор технічних наук

Вчене звання: – старший дослідник

Посада: провідний науковий співробітник відділу наноструктурних матеріалів ім. Ю.В. Малюкіна

Контактна інформація: +38 057 341-01-26, iiganinabespalova@gmail.com

2) ППП: Чергинець Віктор Леонідович

Науковий ступінь: доктор технічних наук

Вчене звання: – хімічних

Посада: завідувач лабораторії синтезу скінтіляційних матеріалів

Контактна інформація: +38 057 341-02-18, cherginets@isma.kharkov.ua

3) ППП: Беспалова Ірина Ігорівна

Науковий ступінь: доктор технічних наук

Вчене звання: – старший дослідник

Посада: завідувач лабораторії тугоплавких скінтіляційних матеріалів

Контактна інформація: +38 097 336-18-57, irina250124@gmail.com

III. Опис дисципліни

1. Мета і завдання навчальної дисципліни

Метою навчальної дисципліни «Сучасні проблеми одержання функціональних матеріалів» є: ознайомити аспірантів з основними ідеями та технологічними методами створення та дослідження функціональних матеріалів, зокрема об'ємних монокристалів та композиційних скінтіляційних матеріалів на основі нано- та мікропорошків, а також з основними підходами, що застосовуються для оцінки перебігу процесів термодинамічним методом, з методами аналізу фазових діаграм.

Основними завданнями вивчення дисципліни «Сучасні проблеми одержання функціональних матеріалів» є:

- Ознайомлення з технологічними методами створення функціональних матеріалів та їх дослідженням.
- Розуміння принципів формування структури та властивостей функціональних матеріалів.
- Ознайомлення з теоретичними аспектами термодинаміки та фазових діаграм.
- Розвиток навичок використання різноманітних аналітичних методів та технік для дослідження функціональних матеріалів.
- Розуміння взаємозв'язку між мікроструктурою та властивостями функціональних матеріалів.
- Вивчення технологій виготовлення об'ємних монокристалів та композиційних скінтіляційних матеріалів на основі нано- та мікропорошків.
- Вивчення новітніх технологій одержання функціональних матеріалів та їх застосування в промисловості.
- Розвиток навичок планування та виконання експериментальних досліджень, а також аналізу та інтерпретації результатів досліджень.

2. Результати навчання (Компетентності)

Згідно з вимогами освітньо-наукової програми аспіранти повинні досягти таких результатів навчання:

- здатність продемонструвати глибокі професійні знання, науковий і культурний кругозір рівня здобувача наукового ступеня доктора філософії, зокрема шляхом засвоєння, узагальнення та систематизації знань та основних концепцій, теоретичних та практичних проблем технологічних методів одержання та дослідження функціональних матеріалів, знати особливості процесів їх формування та основні фізико-хімічні властивості, вивчити основні принципи, що лежать в основі теоретичних розрахунків термодинамічних параметрів систем, їх тлумачення, оцінки напрямків і повноти перебігу процесів в різних системах термодинамічним методом;

– здатність на основі фізико-хімічних законів та розуміння структури та природи дефектів функціональних матеріалів прогнозувати їх оптичні властивості, перш за все люмінесцентні та сцинтиляційні, а також вміння створення функціональних матеріалів з керованими параметрами із застосуванням сучасних методів та технологій, освоїти методи аналізу фазових діаграм з метою одержання даних, необхідних для оцінки перебігу процесів спрямованої кристалізації розтопів.

IV. Обов'язкові завдання та методи контролю

- Відвідування лекційних занять; виконання завдань самостійної роботи.
- Підсумковий контроль – залік, іспит.
- Розподіл балів

Самостійна робота	Поточний контроль (залік)	Підсумковий контроль (іспит)	Сума
30	20	50	100

- Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

V. Опис навчальної дисципліни

1. Тематичний план лекційних занять

Тема 1. Вступ. Класифікації функціональних матеріалів. Основні принципи отримання.

Тема 2. Методи дослідження параметрів структури матеріалів різної функціональної будови.

Тема 3. Взаємозв'язок: тип структури – параметри структури – функціональні властивості матеріалу.

Тема 4. Пріоритетні напрямки застосування люмінесцентних та сцинтиляційних матеріалів.

Тема 5. Сцинтиляційні матеріали. Вступ.

Тема 6. Люмінесценція твердих тіл. Характеристики люмінесценції. Модель потенційних кривих. Внутрішнє гасіння.

Тема 7. Тунельна люмінесценція. Вільні та автолокалізовані екситони.

Остовновалентна або крослюмінесценція. Гаряча люмінесценція.

Тема 8. Рекомбінаційна люмінесценція. Термостимульована люмінесценція. Міжзонна люмінесценція та Оже-процеси. Множення електронних збуджень

Тема 9. Спектроскопія рідкісноземельних іонів.

Тема 10. Джерела іонізуючого випромінювання.

Тема 11. Основні процеси у сцинтиляторах. Взаємодія іонізуючого випромінювання з речовиною.

Тема 12. Основні процеси у сцинтиляторах. Генерація електрон-діркових пар. Процеси перенесення енергії та люмінесценція

Тема 13. Механізми створення радіаційних дефектів у кристалах

Тема 14. Характеристики сцинтиляторів

Тема 15. Апаратура для гамма-спектрометрії. Типи фотоприймачів.

Тема 16. Апаратура для гамма-спектрометрії. Передпідсилювачі. Підсилювачі. Багатоканальний аналізатор. Аналого-цифровий перетворювач.

Тема 17. Практичні питання та застосування сцинтиляційного метода гамма-спектрометрії.

Тема 18. Термодинаміка. Основні поняття: система, фаза, параметр, функція стану, процес. Основні типи процесів (ізохорний, ізобарний, ізотермічний, адіабатичний, політропний). Робота розширення ідеальних газів у різноманітних процесах. Перше начало термодинаміки. Внутрішня енергія. Теплота. Робота. Наслідки з I начала термодинаміки.

Тема 19. Закон Гесса. Властивості теплових ефектів при постійному тиску (Q_p) і постійній температурі (Q_v). Взаємозв'язок між ними. Закон Гесса. Наслідки з закону Гесса. Теплота утворення. Теплота згоряння. Теплоємність. Залежність теплоємності від температури.

Тема 20. Основні положення другого начала термодинаміки. Оборотні і необоротні процеси. Цикл Карно. Імовірність і ентропія. Статистичний зміст. Нерівність Клаузіуса. Застосування ентропії для визначення напрямку самодовільного перебігу процесу.

Тема 21. Об'єднане рівняння першого і другого начал термодинаміки. Чотири основні рівняння термодинаміки. Функції стану. Енергія Гібса і енергія Гельмгольца як критерії спрямованості процесу і стану рівноваги. Загальні умови встановлення рівноваги. Рівняння Гібса-Гельмгольца. Третє начало термодинаміки. Постулат Планка. Абсолютна ентропія.

Тема 22. Основні поняття фазових рівноваг. Гетерогенна система. Компонент. Число незалежних компонентів. Фаза. Число ступенів свободи. Правило фаз Гібса. Однокомпонентні системи. Діаграма стану води. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса. Фазові переходи I і II роду. Діаграми стану з моно- і енантіотропними переходами. Діаграма стану сірки.

Тема 23. Двокомпонентні системи. Фізико-хімічний аналіз. Діаграми стану. Принципи побудови та інтерпретації діаграм стану. Принципи Курнакова. Крива охолодження. Правило важеля. Основні типи діаграм двокомпонентних систем.
 Тема 24. Трикомпонентні системи. Визначення складу. Трикутник Гіббса. Метод Розебума.
 Тема 25. Консультація перед іспитом. Іспит.

2. Завдання для самостійної роботи

- Сцинтилятори на основі кисневих кристалів
- Сцинтилятори на основі сполук АІВVI
- Сцинтилятори на основі лужногалоїдних сполук
- Сцинтилятори на основі неорганічних сполук легованих РЗЕ
- Сцинтилятори на основі твердих розчинів
- Сцинтилятори на основі органічних сполук
- Макро-, мікро- та нано- композиційні матеріали: будова, основні шляхи створення, галузі використання
- Вплив параметрів матриці композиційного матеріалу на люмінесцентні та сцинтиляційні параметри
- Розрахунки термодинамічних параметрів процесів, що перебігають при постійних p і T , V і t . Оцінка констант рівноваги.
- Оцінка термодинамічних параметрів процесів при різних температурах. Розрахунок абсолютних ентропій речовин.
- Побудова кривих охолодження для різних типів фазових діаграм. Побудова фазових діаграм за експериментальними даними.
- Оцінки коефіцієнту входження домішки в основну речовину за даними фазових діаграм.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви модулів і тем	Кількість годин				
	Усього	у тому числі			самостійна робота
		Аудиторні заняття			
		лекції	семінари	Практичні заняття	
1	2	3	4	5	6
Тема 1	5	2			3
Тема 2	5	2			3
Тема 3	5	2			3
Тема 4	6	2			4
Тема 5	6	2			4
Тема 6	6	2			4
Тема 7	5	2			3
Тема 8	5	2			3

Тема 9	5	2			3
Тема 10	6	2			4
Тема 11	6	2			4
Тема 12	6	2			4
Тема 13	6	2			4
Тема 14	10	4			6
Тема 15	5	2			3
Тема 16	5	2			3
Тема 17	9	2		4	3
Тема 18	5	2			3
Тема 19	5	2			3
Тема 20	5	2			3
Тема 21	6	2			4
Тема 22	6	2			4
Тема 23	12	4			8
Тема 24	6	2			4
Тема 25	4	4			
Усього годин	150	56		4	90

V. Рекомендована література

Базова

1. Ch. Kittel. Introduction to Solid State Physics. Eighth Ed. – John Wiley & Sons, 2005. – 680 p.
2. G. Blasse, B. C. Grabmaier. Luminescent Materials. – Berlin: Springer-Verlag, 1994. – 232 p.
3. Henderson B., Imbush G. Optical Spectroscopy of Inorganic Solids, Oxford, 2006, 672 pp.
4. Inorganic Scintillators for Detector Systems: Physical Principles and Crystal Engineering / P. Lecoq, A. Annenkov, A. Gektin, M. A. Korzhik, C. Pedrini. — B. : Springer, 2006. — 251 p.
5. J.B. Birks. The Theory and Practice of Scintillation Counting, A volume in International Series of Monographs in Electronics and Instrumentation Book. – Pergamon, 1964. – 664 p.
6. Knoll G.G. Radiation detection and measurements and 3rd ed. — N.Y. :Wiley, 2000. – 860 p.
7. Nanocomposite Science and Technology : book / Ed. by P.M. Ajayan, L.S. Schadler, P.V. Braun. – Weinheim.:WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2003. – 230 p.

8. Yen W. M. Practical Applications of Phosphors / W. M. Yen, Sh. Shionoya, H. Yamamoto. – London: CRC Press, 2006. – 528 p.
9. R.G. Mortimer. Physical Chemistry. Third Ed. – Amsterdam: Elsevier Academic Press, 2008. – 1385 p.

Допоміжна

1. О.Ц. Сідлецький, Б.В. Гриньов Сцинтиляційні кристали на основі твердих розчинів заміщення – Харків: “ІСМА”, 2019. – 248 стр.
2. PHOSPHOR HANDBOOK Laser and Optical Science and Technology Series, Edited by William M., Yen Shigeo Shionoya , Hajime Yamamoto, CRC Press, 2007, 1056 p.
3. Song K.S., Williams R.T. Self-trapped excitons. — B. and N.Y. : Springer, 1997. — 410 p.
4. Dorenbos P. The $4f\ n \rightarrow 4f\ n-15d$ -transitions of the trivalent lanthanides in halogenides and chalcogenides / P. Dorenbos // Journal of Luminescence. 2000. Vol. 91. P. 91–106.
5. Henderson B., Imbusch G.F. Optical Spectroscopy of Inorganic Solids. — Oxford : Clarendon Press, 1989. — 662 p.
6. Lempicki A., A.J. Wojtowicz, E. Berman. Fundamental limits of scintillator performance // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers and Detectors and Associated Equipment. — 1993. — Vol. 333. — P. 304–311.
7. Berenyi D., Osvay M. Transmission of 100–472 keV monoenergetic electrons through al absorbers // Acta Physica Academiae Scientiarum Hungaricae. — 1963. — Vol. 15, no. 4. — P. 357–359.
8. La Rocca P., Riggi F. Absorption of beta particles in different materials: an undergraduate experiment // European Journal of Physics. — 2009. — Vol. 30, no. 6. — P. 1417.
9. Bushberg J. The AAPM/RSNA physics tutorial for residents. X-ray interactions // Radiographics. — 1998. — Vol. 18. — P. 457–468.
10. Klein C.A. Band gap Dependence and Related Features of Radiation Ionization Energies in Semiconductors // J.Appl.Phys. — 1968. — Vol. 39. — P. 2029–2038.
11. Rothwarf A. Plasmon theory of electronhole pair production - efficiency of cathode ray phosphors // J.Appl.Phys. — 1973. — Vol. 44. — P. 752–757.
12. Cavenett B.C., Hayes W. Hunter I.C., Stoneham A.M. Magneto Optical Properties of F Centres in Alkaline Earth Fluorides // Proceedings of the royal society A. — 1969. — Vol. 309. — P. 53–68.

13. Hayes W., Lambourn R.F., Stott J.P. H centres in alkaline-earth fluorides // *J.phys.C.* — 1974. — Vol. 7. — P. 2429–2433.
14. Hayes W., Stoneham A.M. *Crystals with the Fluorite Structure.* — Oxford : Claredon press, 1974. — 448 p.
15. Coexistence of Triplet and Singlet Exciton Emission in Alkaline Earth Fluoride Crystals / J. Becker, M. Kirm, V.N. Kolobanov, V.N. Makhov, et al. // *The Electrochemical Society Proceedings Ser and Pennington and NJ.* — 1998. — P. 415–419.
16. Williams R.T., Kabler M.N. Time-resolved spectroscopy of self-trapped excitons in fluorite crystals // *Physical review B.* — 1976. — Vol. 14. — P. 725–740.
17. Dorenbos P. Scintillation mechanisms in Ce³⁺ doped halide scintillators // *physica status solidi (a).* — 2005. — Vol. 202. — P. 195–200.
18. Properties and mechanism of scintillation in LuCl₃ : Ce³⁺ and LuBr₃ : Ce³⁺ crystals / E.V.D. van Loef, Dorenbos P., van Eijk C.W.E., Kramerb K.W., H.U. Gudel // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.* — 2003. — Vol. 496. — P. 138–145.
19. Weber M.J., Derenzo S.E., Moses W.W. Measurements of ultrafast scintillation rise times: Evidence of energy transfer mechanisms // *J. Lumin.* — 2003. — Vol. 1. — P. 830–832.
20. Vale G. Energy transfer from colour centres to the dopant in alkali halides // *J.of Lum.* — 2003. — Vol. 72-74. — P. 726–728.
21. Nouailhat A., Mercier E., Guillot G. Exciton defect interaction in alkali halides // *J. de Physique.* — 1976. — Vol. 37. — P. 492–494.
22. Sole J.G., Bausa L.E., Jaque D. *An introduction to the optical spectroscopy of inorganic solids.* — Wiley, 2005. — 304 p.
23. Foster T. Intermolecular Energy Migration and Fluorescence // *Annalen der Physik.* — 1948. — Vol. 2. — P. 55–75.
24. Dexter D.L. A theory of sensitized luminescence in solids // *J.Chem.Phys.* — 1953. — Vol. 21. — P. 836. 80
25. Dorenbos P. Fundamental limitations in the performance of Ce³⁺ and Pr³⁺ and Eu²⁺ activated scintillators // *Nuclear Science, IEEE Transactions on.* — 2010. — Vol. 57. — P. 1162–1167.
26. Processing Nano- and Microcapsules for Industrial Applications in *Handbook of Nanomaterials for Industrial Applications* /Editor: Chaudhery Mustansar Hussain. — Elsevier, 2018, P. 989-1011