

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Кемеровский государственный университет»
Физический факультет

Рабочая программа дисциплины

Методы теории твердого тела

Направление подготовки
Физика и астрономия

Направленность (профиль) подготовки
01.04.07 физика конденсированного состояния

Квалификация (степень) выпускника
Исследователь, преподаватель-исследователь

Форма обучения
очная

Кемерово 2014

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению <i>Физика и астрономия</i>	3
2. Место дисциплины в структуре ООП аспирантуры.....	3
3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам занятий) и на самостоятельную работу обучающихся	4
3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий	4
4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)	4
4.2 Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).....	5
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	7
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.....	9
6.1 Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине	9
6.2 Типовые контрольные задания или иные материалы.....	9
6.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций. 12	
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	13
а) основная учебная литература:	13
б) дополнительная учебная литература:	13
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины	13
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	13
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	15
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине	15
12. Иные сведения и (или) материалы	15
12.1. Перечень образовательных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине:	15

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению *Физика и астрономия*

В результате освоения ООП аспирантуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

<i>Код компетенции</i>	Результаты освоения ООП Содержание компетенций	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
<i>ПК-1</i>	способностью свободно владеть фундаментальными разделами физики, необходимыми для решения научно-исследовательских задач в физике конденсированного состояния	Знать: теоретические основы методов вычислений физических свойств кристаллических материалов, экспериментальные подходы к их исследованию.
<i>ПК-2</i>	способностью использовать знания современных проблем физики, новейших достижений физики в своей научно-исследовательской деятельности	Уметь: определять качественные и количественные параметры механических, колебательных и электронных свойств, химической связи, оптических функций объемных, поверхностных и дефектных состояний реальных и гипотетических кристаллов; проводить интерпретацию имеющихся экспериментальных и прогнозировать новые данные о материалах.
<i>ПК-4</i>	способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области информационных технологий, современных компьютерных сетей, программных продуктов и ресурсов Интернет для решения задач профессиональной деятельности	Владеть: современными компьютерными технологиями исследования физических свойств кристаллических систем на основе свободно распространяемого пакета ABINIT и коммерческого пакета CRYSTAL

2. Место дисциплины в структуре ООП аспирантуры

«Методы теории твердого тела» относится к дисциплинам по выбору цикла Б1.В.ДВ.2 подготовки и входит в обязательную программу обучения аспирантов. Дисциплина базируется на учебных курсах «Квантовой теории», «Теории конденсированного состояния», «Теоретической механике», «Электродинамики», «Термодинамики», «Симметрии в физике твердого тела». Входными являются знания основ квантовой теории твердого тела, электронного строения атома и атомных систем, теории симметрии, языков программирования, операционных систем и умениями осуществлять математические выкладки с использованием аппарата квантовой теории, работы с пакетами прикладных программ, поиска научной ин-

формации прикладного характера. Данная дисциплина подготовит аспиранта к самостоятельным исследованиям физических свойств кристаллов с помощью пакетов прикладных программ, будет способствовать написанию кандидатской диссертаций, участию в научных конференциях.

Дисциплина изучается на 2 курсе во 2 семестре.

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 3 зачетные единицы (3Е), 108 академических часов.

3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)

Вид учебной работы	Всего часов
Общая трудоемкость дисциплины	108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	36
Аудиторная работа (всего):	36
в т. числе:	
Лекции	
Практические занятия	18
Лабораторные	18
Внеаудиторная работа (всего):	0
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	72
Вид промежуточной аттестации обучающегося	зачет

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

№ п/п	Раздел дисциплины	Общая трудоемкость (час.)	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)		Формы текущего контроля успеваемости	
			аудиторные учебные занятия			Самостоятельная работа обучающихся
			лаборат	практические занятия		
1.	Задачи и методы теоретического исследования физических свойств кристаллов. Методы исследования структуры твердых	24	4	4	16	Реферат. Индивидуальная работа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Общая трудоёмкость (час.)	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			Формы текущего контроля успеваемости
			аудиторные учебные занятия		Самостоятельная работа обучающихся	
			лаборат	практические занятия		
ВСЕГО						
	тел. Механизмы образования наноструктур.					
2.	Методы исследования межатомных взаимодействий, химической связи и расчета колебательных спектров кристаллов.	24	4	4	16	Реферат. Индивидуальная работа.
3.	Методы исследования механических и термодинамических свойств твердых тел.	24	4	4	16	Реферат. Индивидуальная работа.
4.	Методы исследования реакционной способности кристаллов. Электрон-фононное взаимодействие в твердых телах.	18	2	4	12	Реферат. Индивидуальная работа.
5.	Компьютерное моделирование поверхности твердых тел и их оптических свойств.	18	4	2	12	Реферат. Индивидуальная работа.
	Всего за 2 семестр	108	18	18	72	зачет

4.2 Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)

№	Наименование раздела дисциплины	Содержание
1	Задачи и методы теоретического исследования физических свойств кристаллов. Методы исследования структуры твердых тел. Механизмы образования наноструктур.	Современные проблемы и задачи теории твердого тела. Вычислительное моделирование как инструмент обеспечения современного уровня научных исследований и проектных работ в области физики твердого тела, в том числе в нано-размерном диапазоне. Основные направления развития теории и методов моделирования. Пакеты прикладных программ. Коммерческие и некоммерческие продукты. Классификация кристаллических структур, основные типы кристаллических структур: алмаза, каменной соли, хлорида цезия, сфалерита, вюртцита, куприта. Обратная решетка и зона Бриллюэна, структурный фактор, экспериментальные методы исследования структуры твердых тел. Расчет оптимальной геометрии, полной энергии молекул, кластеров, кристаллов. Супрамолекулярные системы, модели нанокластеров, квантовохимическое моделирование нанокластеров и нанотрубок, молекулярная самосборка.
<i>Темы практических занятий</i>		

№	Наименование раздела дисциплины	Содержание
1.1.	Структура твердых тел.	
1.2	Квантовохимическое моделирование образования нанокластеров и нанотрубок	
<i>Темы лабораторных занятий</i>		
1.1.	Применение пакетов ABINIT и CRYSTAL к исследованию физических свойств молекул, твердых тел и наносистем.	
1.2	Расчет оптимальной геометрии, электронной структуры, полной энергии, энергии связи кристаллов на примере оксидов и нитридов.	
2	Методы исследования межатомных взаимодействий, химической связи и расчета колебательных спектров кристаллов.	Основные положения теории металлов Друде. Металлическая связь. Ионные кристаллы. Ковалентные кристаллы. Молекулярные кристаллы. Плотность валентного заряда. Природа химической связи. Расчет силовых констант межатомного взаимодействия, зарядов. Заселенностей перекрытия и распределения валентного заряда в кристаллах. Гармоническое приближение для потенциальной энергии кристалла. Силовая матрица, ее свойства. Акустические моды. Оптические моды. Свойства колебаний. Динамическая матрица. Вектора поляризации, их свойства. Квантовая теория колебаний решетки. Уравнение Шредингера в гармоническом приближении для потенциальной энергии. Фононы в кристаллах. Модели для вычисления дисперсионных кривых фононов в кристалле. Расчет собственных векторов и фононных частот, диэлектрических констант, эффективных зарядов, LO-TO расщепления в кристаллах.
<i>Темы практических занятий</i>		
2.1.	Моделирование строения многоэлектронных атомов, электронной структуры и химической связи в кристаллах	
2.2	Колебания атомов кристаллической решетки	
<i>Темы лабораторных занятий</i>		
2.1.	Расчет оптимальной геометрии, полной энергии и зонной структуры кристаллических нитридов серебра.	
2.2	Расчет собственных векторов и фононных частот в центре и в боковых точках зоны Бриллюэна, диэлектрических констант, эффективных зарядов, LO-TO расщепления в кристаллах $A^{III}B^V$.	
3	Методы исследования механических и термодинамических свойств твердых тел.	Элементы теории упругости. Связь теории колебаний с теорией упругости. Тензоры деформации и напряжений. Модули упругости. Простые напряженные состояния. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона. Звуковые волны в кристаллах. Механические свойства поликристаллов. Расчет упругих и пьезоэлектрических констант, тензора напряжений, упругих модулей кубических, ромбических и гексагональных кристаллов. Термодинамические свойства кристаллов. Средняя энергия классического и квантового гармонического осциллятора. Закон Дюлонга-Пти. Модели теплоемкости Дебая и Эйнштейна. Уравнение состояния твердого тела. Тепловое расширение. Параметр Грюнайзена. Дисгармоническое приближение. Метод термодинамических потенциалов. Свободная энергия и энергия Гиббса.
<i>Темы практических занятий</i>		
3.1.	Механические свойства твердых тел	
3.2	Термодинамические свойства твердых тел	

№	Наименование раздела дисциплины	Содержание
<i>Темы лабораторных занятий</i>		
3.1.		Расчет уравнения состояния, межатомных силовых констант и термодинамических свойств: внутренней, свободной энергии, энтропии и силовых констант на примере Li_2O
3.2		Расчет упругих и пьезоэлектрических констант, тензора напряжений, упругих модулей кубических, орторомбических и гексагональных кристаллов.
4	Методы исследования реакционной способности кристаллов. Электрон-фононное взаимодействие в твердых телах.	Химическая термодинамика. Химическая кинетика. Типы химических реакций в твердых телах. Взаимодействие электронов с акустическими фононами. Деформационный потенциал. Взаимодействие электронов с продольными оптическими фононами. Поляроны. Расчет матричных элементов электрон-фононного взаимодействия и электрон-фононных констант.
<i>Темы практических занятий</i>		
4.1.		Химическая термодинамика и химическая кинетика. Типы химических реакций в твердых телах
4.2.		Электрон-фононное взаимодействие
<i>Темы лабораторных занятий</i>		
4.1.		Моделирование реакционной способности углеводородов и взрывчатых веществ методами термохимии.
5	Компьютерное моделирование поверхности твердых тел и их оптических свойств.	Граница раздела твердое тело – вакуум. Релаксация и реконструкция поверхности. Поверхностная энергия. Равновесная форма пространственно-ограниченного твердого тела. Строеие реальной поверхности твердого тела. Граница раздела твердое тело – газ. Энергия связи атомов с поверхностью. Адсорбция и десорбция. Расчет геометрии и электронной структуры поверхности кристаллов. Оптические свойства. Макроскопическая электродинамика. Экспериментальное определение оптических параметров. Соотношения Крамерса-Кронига. Диэлектрическая функция. Комбинированная плотность состояний и сингулярности Ван Хова. Прямой и непрямой край поглощения. «Запрещенный» прямой край поглощения. Расчет оптических функций кристаллов.
<i>Темы практических занятий</i>		
5.1.		Компьютерное моделирование поверхности твердых тел
<i>Темы лабораторных занятий</i>		
5.1.		Определение поверхностной энергии в зависимости от выбранной поверхности и числа слоев. Релаксация поверхности. определение координат атомов и их зарядов.
5.2.		Расчет линейного и нелинейного оптического отклика кристаллов. Вычисление мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости и интерпретация оптических свойств этого кристалла.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

задания для самостоятельной работы:

- Изучите кристаллическую структуру (группа симметрии, постоянные решетки, координаты атомов, длины связей) объекта исследования.
- Используя справочные данные (Физические величины. Справочник под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991, другие издания, используя поиско-

вые системы ИНТЕРНЕТ) установите известные физические свойства объекта исследования.

- Используя предложенный перечень научных статей и поисковые системы (scopus.com) изучите ранее выполненные теоретические и экспериментальные исследования электронных свойств объекта исследования. Результаты оформите в виде литературного обзора («Введение»).
- Исходя из данных литературного обзора сформулируйте цель и задачи вашей работы, на основании которых выберите адекватный метод исследования.
- Различными подходами (базис, обменно-корреляционный потенциал, псевдопотенциал, энергия обрезки, количество точек в схеме Монхорста-Пака и т.п.) выполните расчеты равновесной геометрии объекта исследования и сравнением с экспериментальными данными выберите наилучшие параметры. Выполните пробные расчеты зонной структуры и сравнением с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными окончательно определите наилучшую расчетную схему. Результаты оформите в виде раздела «Метод расчета».
- Выполните расчет упругих постоянных, модулей упругости, скорости звуковых волн, температуры Дебая, параметра Грюнайзена, уравнения состояния, термодинамических функций объекта исследования. Сравните с ранее выполненными теоретическими и экспериментальными исследованиями и результаты оформите в виде раздела «Упругие и термодинамические свойства».
- Выполните расчет частот колебаний кристаллической решетки в центре и нескольких боковых точках зоны Бриллюэна. Сравните полученные частоты с данными КР- и ИК-спектров (если имеются). Результаты оформите в виде раздела «Колебательная структура»
- Выполните расчет зонной структуры и плотности состояний объекта исследования. Нарисуйте зонную структуру, а количественные параметры приведите в таблице, вместе с данными других авторов (если имеются). Выполните расчет распределения электронной плотности в актуальных кристаллографических плоскостях и приведите их на графиках. Установите характер химической связи в кристаллах. Результаты оформите в виде раздела «Электронная структура».
- Выполните расчет электронных свойств поверхности для 2-4 слоев с учетом и без учета релаксации) (поверхностная энергия, заряды на поверхности, смещения атомов, энергетический спектр). Сопоставьте с имеющимися данными и результаты представьте в виде рисунков и таблиц в разделе «Поверхностные свойства»
- Выполните расчет оптических функций (комбинированная плотность состояний, диэлектрическая функция и т.п.), сил осцилляторов и вместе с зонной структурой опишите наблюдаемые (прогнозируемые в их отсутствии) оптические свойства объекта исследования. Результаты оформите в виде раздела «Оптические свойства»
- По результатам проделанной работы сформулируйте основные результаты и выводы, которые оформите в разделе «Заключение».

Объекты исследования:

- А. Фториды щелочных металлов (LiF, NaF, KF)
- Б. Хлориды щелочных металлов (LiCl, NaCl, KCl)
- В. Галогениды серебра (AgF, AgCl, AgBr)
- Г. Оксиды щелочных металлов (Li₂O, Na₂O, K₂O)
- Д. Оксиды щелочноземельных металлов (BeO, MgO, CaO)
- Е. Нитриды (AlN, GaN, InN - сфалерит)
- Ж. Е. Нитриды (AlN, GaN, InN - вюртцит)
- З. Арсениды (GaAs, InAs)
- К. Сульфиды (ZnS – все модификации)
- Л. Фосфиды (GaP, InP)

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

6.1 Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины	Код контролируемой компетенции (или её части)	наименование оценочного средства
1.	Задачи и методы теоретического исследования физических свойств кристаллов. Методы исследования структуры твердых тел. Механизмы образования наноструктур.	<i>ПК – 1, ПК – 2,</i> <i>ПК – 4</i>	Реферат. Индивидуальное задание. Зачет.
2.	Методы исследования межатомных взаимодействий, химической связи и расчета колебательных спектров кристаллов.	<i>ПК – 1,</i> <i>ПК – 2,</i> <i>ПК – 4</i>	Реферат. Индивидуальное задание. Зачет.
3.	Методы исследования механических и термодинамических свойств твердых тел.	<i>ПК – 1, ПК – 2,</i> <i>ПК – 4</i>	Реферат. Индивидуальное задание. Зачет.
4.	Методы исследования реакционной способности кристаллов. Электрон-фононное взаимодействие в твердых телах.	<i>ПК – 1, ПК – 2,</i> <i>ПК – 4</i>	Реферат. Индивидуальное задание. Зачет.
5.	Компьютерное моделирование поверхности твердых тел и их оптических свойств.	<i>ПК – 1, ПК – 2,</i> <i>ПК – 4</i>	Реферат. Индивидуальное задание. Зачет.

6.2 Типовые контрольные задания или иные материалы

Темы рефератов:

1. Современные проблемы и задачи теории твердого тела
2. Основные направления развития теории и методов моделирования
3. Супрамолекулярные системы, молекулярная самосборка
4. Квантовая теория колебаний решетки.
5. Модели для вычисления дисперсионных кривых фононов в кристалле
6. Механические свойства поликристаллов.
7. Термодинамические свойства кристаллов.
8. Взаимодействие электронов с акустическими фононами.
9. Типы химических реакций в твердых телах
10. Строение реальной поверхности твердого тела.
11. Расчет геометрии и электронной структуры поверхности кристаллов.
12. Методы изучения поверхностных состояний.
13. Расчет оптических функций кристаллов.
14. Квантовая теория оптических свойств кристаллов.
15. Оптические свойства диэлектриков, металлов и полупроводников.
16. Взаимодействие света с кристаллической решеткой, поляритоны.

Примеры индивидуальных заданий:

1. Ознакомьтесь со статьей: Ю.Н. Журавлев, А.Б. Гордиенко . Расчеты из первых принципов структурных, упругих и электронных свойств нитридов серебра // Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, №3, с. 425-432. Выполните с помощью пакета ABINIT в LDA и GGA приближениях обменно-корреляционного потенциала оптимизацию геометрии кристаллов CuN, AgN в структурах каменной соли, хлорида цезия, сфалерита и вюртцита. Вычислениями зависимости полной энергии от объема определите параметры уравнения состояния Мурнагана. Рассчитайте упругие постоянные и сделайте заключение о возможности существования кристаллов в одной из фаз. Установите, какая структурная фаза будет наиболее стабильной. Для этой фазы выполните расчет зонной структуры и плотности состояний и опишите физические свойства этого гипотетического соединения. Проведите сравнение полученных вами параметров зонной структуры: ширины валентной, запрещенной зон с параметрами, полученными в указанной статье.
2. Ознакомьтесь со статьей: R. Yu and X. F. Zhang . Family of noble metal nitrides: First principles calculations of the elastic stabilitys // PHYSICAL REVIEW B **72**, 054103 (2005). Выполните с помощью пакета ABINIT в LDA и GGA приближениях обменно-корреляционного потенциала оптимизацию геометрии кристалла AgN₂ в структурах флюорита. Вычислениями зависимости полной энергии от объема определите параметры уравнения состояния Мурнагана. Рассчитайте упругие постоянные и сделайте заключение о возможности существования кристалла в этой фазе. Установите как структурная фаза будет наиболее стабильной. Для этой фазы выполните расчет зонной структуры, плотности состояний, фононных частот и опишите физические свойства этого гипотетического соединения. Проведите сравнение полученных вами параметров зонной структуры: ширины валентной, запрещенной зон с параметрами, полученными в указанной статье.
3. Ознакомьтесь со статьей R.D. Eithiraj , G. Jaiganesh, G. Kalpana and M. Rajagopalan. First-principle study of electronic structure and ground state properties of alkali metal sulphides – Li₂S, Na₂S, K₂S and Rb₂S // Phys. Stat. Sol (b) (2009). Используя программный пакет CRYSTAL, вычислите оптимальные параметры кристаллической структуры, объемный модуль упругости и его производную. Путем сопоставления с экспериментальными данными и результатами расчетов других авторов подберите наилучшую расчетную модель и в ней рассчитайте электронную и колебательную структуру кристаллов.
4. Ознакомьтесь со статьей Ž. Čančarević, J. C. Schön, and M. Jansen. Stability of alkali-metal oxides as a function of pressure: Theoretical calculations// PHYSICAL REVIEW B **73**, 224114 (2006). Используя программный пакет CRYSTAL проведите исследования влияния давления на структурные и механические свойства оксидов щелочных металлов. Путем сопоставления с экспериментальными данными и результатами расчетов других авторов сделайте вывод о стабильности тех или иных структурных фаз.
5. Ознакомьтесь со статьей Agostino Zoroddu, Fabio Bernardini, and Paolo Ruggerone, Vincenzo Fiorentini. First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory // PHYSICAL REVIEW B, VOLUME 64, 045208 с помощью программного пакета ABINIT определите оптимальную кристаллическую структуру GaN, AlN, InN (сфалерит или вюртцит). Вычислите термодинамические функции, упругие и пьезоэлектрические постоянные, энергетический спектр электронов, фононный спектр этих кристаллов. Проведите сравнение с результатами других авторов и дайте описание физических и физико-химических свойств.
6. Ознакомьтесь со статьей Журавлев Ю.Н., Корабельников Д.В., Алейникова М.В. Расчеты *ab initio* термодинамических параметров оксидов лития, натрия, калия под давлением // Физика твердого тела. – 2012. - Т 54, № 7. С. 1427-1434. С помощью программного пакета CRYSTAL определите оптимальную кристаллическую структуру оксидов металлов. Вычислите термодинамические функции, упругие постоянные, энергетический спектр электронов, фононный спектр этих кристаллов. Проведите

- сравнение с результатами других авторов и дайте описание физических и физико-химических свойств, в том числе возможности их использования в качестве оптоэлектронных материалов.
7. Ознакомьтесь со статьей Журавлев Ю.Н., Кравченко Н.Г., Оболонская О.С. Электронная структура окислов щелочных металлов // Химическая физика. – 2010. – Т. 29, № 1. – С. 11-19, Журавлев Ю.Н., Оболонская О.С. Структура, механическая стабильность и химическая связь в окислах щелочных металлов // Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, №6, с. 1043-1051 с помощью программного пакета ABINIT или CRYSTAL определите оптимальную кристаллическую структуру оксидов, пероксидов и надпероксидов металлов. Вычислите упругие постоянные, фононный спектр, термодинамических функций и проведите сравнение с результатами других авторов, дайте описание физических и физико-химических свойств, прежде всего реакционной способности.
 8. Ознакомьтесь со статьей D. Wolverson and D. M. Bird, C. Bradford, K. A. Prior, and B. C. Cavenett. Lattice dynamics and elastic properties of zinc-blende MgS// PHYSICAL REVIEW B, VOLUME 64, 113203 с помощью программного пакета ABINIT или CRYSTAL определите оптимальную кристаллическую структуру перспективного материала MgS (сфалерит или каменная соль). Вычислите упругие постоянные и фононный спектр и проведите сравнение с результатами других авторов, дайте описание физических и физико-химических свойств, прежде всего экспериментальных КР-спектров..
 9. Ознакомьтесь со статьей Журавлев Ю.Н., Корабельников Д.В. Природа электронных состояний и оптические функции оксианионных соединений натрия // Физика твердого тела, 2009, т.51, №1, с. 65-72 с помощью программного пакета ABINIT определите оптимальную кристаллическую структуру оксианионных кристаллов, Вычислите энергетический спектр электронов и оптические функции этих кристаллов. Проведите сравнение с результатами других авторов, экспериментальными данными и дайте описание оптических свойств, в том числе возможности их использования в качестве перспективных оптоэлектронных материалов для светодиодов, твердотельных лазеров и оптических детекторов.
 10. Ознакомьтесь со статьей Ravindra Pandey, Michel Re'rat and Clovis Darrigan, Mauro Causa. A theoretical study of stability, electronic, and optical properties of GeC and SnC // JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 88, N 11 (2000). помощью программного пакета CRYSTAL, ABINIT определите оптимальную кристаллическую структуру GeC, SiC, SnC (сфалерит). Вычислите упругие и диэлектрические постоянные, статическую поляризуемость, энергетический спектр электронов, оптические функции этих кристаллов. Проведите сравнение с результатами других авторов, имеющимися экспериментальными данными и дайте описание физических и физико-химических свойств.
 11. Ознакомьтесь со статьей Журавлев Ю.Н., Оболонская О.С. Исследование упругих свойств окислов щелочных металлов из первых принципов// Известия вузов. Физика. – 2010. - № 8. – С. 9-16.. помощью программного пакета CRYSTAL определите оптимальную кристаллическую структуру оксидов. Вычислите упругие постоянные и все модули упругости. Найдите параметры известных форм уравнений состояния и опишите зависимость механических свойств этих кристаллов от давления.
 12. Ознакомьтесь со статьей Корабельников Д.В., Журавлев Ю.Н., Алейникова М.В. Структура и электронные свойства поверхности пероксидов щелочных металлов // Журнал структурной химии. – 2012. – Т. 53, № 4. – С. 652-657. С помощью программного пакета CRYSTAL рассчитайте структуру поверхности оксидов и пероксидов металлов. Изучите электронную структуру поверхности и проведите сравнение с имеющимися экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Вопросы к зачету:

1. Вычислительное моделирование как инструмент обеспечения современного уровня научных исследований
2. Классификация кристаллических структур, основные типы кристаллических структур
3. Модели нанокластеров
4. Квантовохимическое моделирование нанокластеров и нанотрубок
5. Основные положения теории металлов Друде
6. Ионные кристаллы. Ковалентные кристаллы. Молекулярные кристаллы
7. Заселенностей перекрывания и распределения валентного заряда в кристаллах
8. Свойства колебаний. Динамическая матрица
9. Расчет эффективных зарядов, ЛО-ТО расщепления в кристаллах.
10. Тензоры деформации и напряжений. Модули упругости.
11. Закон Дюлонга-Пти. Модели теплоемкости Дебая и Эйнштейна.
12. Параметр Грюнайзена. Дисгармоническое приближение.
13. Свободная энергия и энергия Гиббса.
14. Химическая термодинамика. Химическая кинетика.
15. Деформационный потенциал.
16. Релаксация и реконструкция поверхности.
17. Поверхностная энергия. Энергия связи атомов с поверхностью.
18. Адсорбция и десорбция.
19. Макроскопическая электродинамика.
20. Соотношения Крамерса-Кронига.
21. Диэлектрическая функция. Комбинированная плотность состояний и сингулярности Ван Хофа.
22. Прямой и непрямой край поглощения.
23. Упругие свойства кристаллов и поликристаллов
24. Уравнение состояния твердого тела
25. Термодинамические свойства кристаллов
26. Уравнение Шредингера в гармоническом приближении
27. Взаимодействие электронов с акустическими и оптическими фононами
28. Химическая связь в металлах
29. Химическая связь в ионных и ковалентных кристаллах
30. Полная энергия кристалла и определяемые ею характеристики
31. Роль поверхности в физических явлениях
32. Электронные поверхностные состояния

6.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций

Компетенции, приобретенные в результате обучения, оцениваются на основе написанных рефератов, сделанных индивидуальных заданий и сданного зачета.

Оценка «удовлетворительно» (3 балла) выставляется, если реферат оформлен согласно требованиям, присутствуют основные разделы в его структуре. Оценка «хорошо» (4 балла) выставляется, если не только оформление, но и содержание реферата отвечает требованиям к выполнению рефератов. Оценка «отлично» (5 баллов) выставляется, если автор при написании реферата использовал источники максимально соответствующие современному состоянию исследований по рассматриваемой теме, нестандартно представил её. Кроме того, весьма важным здесь является личный вклад автора, который заключается в том, что изложение строится не как дублиаж отдельного источника, а посредством проработки целого ряда различных источников.

Индивидуальные задания оцениваются по следующей системе: оценка «удовлетворительно» (3 балла) выставляется, если аспирант умеет определять и понимает постановку проблемы, а также делает первые шаги на пути её решения. При этом проблема полностью не решается,

однако отдельные части решения должны быть выполнены. Оценка «хорошо» (4 балла) выставляется в случае, если проблема решена, аспирант владеет методами её решения. Оценка «отлично» (5 баллов) выставляется, если выбран оптимальный метод решения проблемы, задание выполнено с осмыслением логических взаимосвязей и полученных результатов. Аспирант должен уметь доказательно объяснять действия необходимые для выполнения задания.

На зачете оценка выставляется согласно ответам на вопросы. Оценка «удовлетворительно» (3 балла) выставляется, если аспирант владеет понятийным аппаратом, терминологией. Оценка «хорошо» (4 балла) выставляется, если ответ содержит не только терминологические аспекты, но и понимание физического смысла. Оценка «отлично» (5 баллов) выставляется, если аспирант может объяснить рассматриваемый вопрос, ответить на дополнительные вопросы в рамках данного. При этом определяющее значение имеет не фактическое воспроизведение «на память» той или иной формулировки, формулы или выражения, а умение находить логические взаимосвязи, понимание сути вопроса.

Результирующая оценка определяется как среднее значение всех полученных оценок. Для получения «зачета» необходимо и достаточно, чтобы результирующая оценка составляла не менее 3.5 баллов.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная учебная литература:

1. Теория физических и физико-химических свойств сложных кристаллических соединений с различным типом химической связи [Текст] / [под общ. ред. А. С. Поплавного [и др.]] ; Кемеровский гос. ун-т. - Кемерово : [б. и.], 2012. - 399 с. http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_cid=25&p11_id=44378
2. Журавлев Ю.Н. Химическая связь в полупроводниковых и диэлектрических кристаллах. Кемерово. 2009. – 208 с.
3. Басалаев Ю.М., Додонов В.Г., Поплавной А.С. Методы исследования структуры твердых тел. Кемеровский гос. ун-т. - Томск : Изд-во Томского гос. пед. ун-та, 2008. - 135 с.

б) дополнительная учебная литература:

1. А.И.Ансельм Введение в теорию полупроводников. СПб.: Лань, 2008. – 624 с.
2. Бассани Ф., Парравичини Дж. П. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. – М.: Мир, 1982. –392 с.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины

<http://www.abinit.org> (Дата обращения: 10.01.2014)

<http://www.crystal.unito.it> (Дата обращения: 10.01.2014)

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Следует внимательно изучить учебную программу дисциплины, характеризующую курс «Методы теории твердого тела» и определяющую целевую установку. Это позволит чётко представлять, во-первых, круг изучаемых проблем, во-вторых, – глубину их постижения. Необходимо иметь подборку литературы, достаточную для изучения предлагаемого курса. Список литературы предлагается в п. 7 рабочей программы. При этом следует иметь в виду, что нужна литература различных видов: учебники, монографии, учебные пособия.

Во время занятий по «Методы теории твердого тела» аспирант должен уметь сконцентрировать внимание на рассматриваемых проблемах и включить в работу все виды памяти: словесную, образную и моторно-двигательную. Для этого ему необходимо конспектировать материал, излагаемый преподавателем. Весь иллюстративный материал, представляемый на слайдах, на доске, в раздаточном материале также должен быть зафиксирован. Аспирант должен уметь (или учиться уметь) выделять главное и фиксировать основные моменты.

Каждому аспиранту необходимо основательно закреплять полученные знания и вырабатывать навыки самостоятельной работы. Для эффективного достижения целей обучения по дисциплине «Методы теории твердого тела», процесс изучения материала курса предполагает достаточно интенсивную работу не только в рамках аудиторных занятий, но и с различными информационными ресурсами в ходе самостоятельной работы на которую отводится более половины времени обучения. В рабочей программе приведены задания для самостоятельной работы.

В процессе освоения дисциплины необходимо регулярно обращаться к списку рекомендованной (основной и дополнительной) литературы. При самостоятельном изучении раздела №1 особое внимание следует обратить на такие понятия как "супрамолекулярные системы", "модели нанокластеров", "молекулярная самосборка", при изучении раздела №3 на понятия "уравнение состояния", "параметр Грюнайзена", "дисгармоническое приближение", "термодинамический потенциал", а при изучении раздела №5 на такие принципиально важные понятия как "релаксация и реконструкция", "поверхностная энергия", "адсорбция и десорбция", "соотношения Крамерса-Кронига", "сингулярности Ван Хова", "прямой и не прямой край поглощения", "оптические функции".

При подготовке к зачету особое внимание следует обратить на то, что целью курса является овладение теоретическими и информационными методами исследования и анализа физических свойств кристаллов, а также обучение описанию наблюдаемых и прогнозированию новых физических свойств кристаллических твердых тел, в том числе наноразмерных. В связи с этим, важным является не только заучивание набора фактов и формул, но также понимание сущности рассматриваемых явлений и свойств, понимание существующих взаимосвязей.

Требования к написанию рефератов:

1. Правила оформления реферата

- При оформлении текста реферата следует учитывать, что открывается работа титульным листом, где указывается полное название учебного заведения, название учебного предмета, тема реферата, фамилии автора и преподавателя, место и год написания. На следующей странице, которая нумеруется сверху номером 2, помещается оглавление с точным названием каждой главы и указанием начальных страниц.
- Общий объем реферата не должен превышать 15-20 страниц для печатного варианта. Поля страницы: левое - 3 см., правое - 1,5 см., нижнее 2 см., верхнее - 2 см. до номера страницы. Текст печатается через 1,5 интервала. Если текст реферата набирается в текстовом редакторе Microsoft Word, рекомендуется использовать шрифты: Times New Roman Cyr или Arial Cyr, размер шрифта - 14 пт. При работе с другими текстовыми редакторами шрифт выбирается самостоятельно, исходя из требований - 60 строк на лист (через 2 интервала).
- Каждая структурная часть реферата (введение, главная часть, заключение и т.д.) начинается с новой страницы.

2. Структура реферата:

Введение. Раздел должен содержать постановку проблемы в рамках выбранной темы и обоснование выбора проблемы и темы. Во введении дается краткая характеристика изучаемой темы, обосновывается ее актуальность, отмечается практическая значимость изучения данного вопроса, где это может быть использовано.

Основная часть. В данном разделе должна быть раскрыта тема. В основной части, как правило, разделенной на главы, необходимо раскрыть все пункты составленного плана, связно изложить накопленный и проанализированный материал. Излагается суть проблемы, различные точки зрения на нее, собственная позиция автора реферата. Важно добиться того, чтобы основ-

ная идея, выдвинутая во введении, пронизывала всю работу, а весь материал был нацелен на раскрытие главных задач. Каждый раздел основной части должен открываться определенной задачей и заканчиваться краткими выводами.

Заключение. В заключении подводятся итоги по всей работе, суммируются выводы, содержащие ясные ответы на поставленные в цели исследования вопросы, делаются собственные обобщения (иногда с учетом различных точек зрения на изложенную проблему), отмечается то новое, что получено в результате работы над данной темой. Заключение по объему не должно превышать введение. Следует избегать типичных ошибок: увлечение второстепенным материалом, уход от проблемы, категоричность и пестрота изложения, бедный или слишком наукообразный язык, неточность цитирования, отсутствие ссылок на источник.

Список литературы. Список использованной литературы завершает работу. В нем фиксируются только те источники, с которыми работал автор реферата.

Приложение. Приложение к реферату позволяет повысить уровень работы, более полно раскрыть тему. В состав приложений могут входить: копии документов, графики, таблицы, фотографии и т.д. Сообщается и источник, откуда взяты материалы, послужившие основой для составления приложения (литературный источник обязательно вносится в список использованной литературы).

Содержание (оглавление реферата). Содержание (оглавление) реферата – это перечисление глав реферата с указанием страниц их расположения. Формулировки оглавления должны точно повторять заголовки глав и подглав, параграфов в тексте, быть краткими и понятными.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

1. Microsoft Office Power Point
2. Программа CRYSTAL09 (<http://www.crystal.unito.it>)

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Дисплейный класс, подключенный к сети ИНТЕРНЕТ.
2. Мультимедийное оборудование: видеопроектор, электронная доска, ноутбук.

12. Иные сведения и (или) материалы

12.1. Перечень образовательных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине:

- Технология активного (контекстного) обучения (коллективная работа малыми группами - исследовательская игра: группа разбивается на подгруппы, в каждой из которых назначается руководитель (определяет цели и задачи, назначает ответственных за отдельные задачи, координирует работу и представляет общее решение задачи) и исполнители (решают отдельные задачи)
- Технология деловой игры (имитационная соревновательная игра: малые группы получают одинаковое задание, распределяются по ролям (руководитель, ответственные исполнители) и выполняют его на скорость и качество, которое оценивается преподавателем)
- Технология интерактивного обучения (мозговой штурм: группа получает задание, далее предлагается высказывать как можно большее количество вариантов решения, затем из общего числа высказанных идей отбирают наиболее удачные, которые могут быть использованы на практике)

- Технология модульного обучения (самостоятельная работа с обучающей программой и с информационными базами данных)
- Технология развивающего обучения (выполнение каждым обучающимся расчетов по образцу и предложенным инструкциям)
- Технология дифференцированного обучения (решение научно-исследовательской задачи с применением расчетно-вычислительных методик и информационно-поисковых систем. Индивидуальное выполнение под контролем преподавателя научно-исследовательской задачи).

Составители:

Журавлев Ю. Н., д.ф.-м.н., профессор кафедры общей физики
Корабельников Д. В., к.ф.-м.н., доцент кафедры теоретической физики