

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Кемеровский государственный университет  
Институт фундаментальных наук

«УТВЕРЖДАЮ» Директор института



Гудов А.М.

2017 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**Электронное строение полупроводников и диэлектриков**

Направление подготовки  
*03.04.02 Физика*

Направленность (профиль) подготовки  
*Физика конденсированного состояния*

Квалификация  
*магистр*

Форма обучения  
*очная*

Кемерово 2017

Рабочая программа утверждена с обновлениями Ученым советом Физического факультета  
(протокол Ученого совета факультета № 7 от 15 февраля 2016 г.)

Рабочая программа утверждена с обновлениями Учёным советом Института фундаментальных  
наук (протокол Учёного совета № 7 от 20.02.2017)

Рабочая программа дисциплины одобрена на заседании кафедры теоретической физики (протокол №  
5 от 16.02.2017 г.)

Зав. кафедрой А. С. Поплавной

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению <i>Физика</i> ...	4
1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению <i>Физика</i> ...	4
1. Место дисциплины в структуре ООП магистратуры .....	6
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.....	6
3.1. Объём дисциплины по видам учебных занятий (в часах).....	6
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий .....	7
4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах).....	7
4.2 Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).....	8
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине .....	14
6.1 Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине.....	14
6.2 Типовые контрольные задания или иные материалы.....	15
6.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций.	18
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	21
а) основная учебная литература:.....	21
б) дополнительная учебная литература:.....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины.....	21
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины .....	21
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине .....	22
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине .....	22
12. Иные сведения и (или) материалы .....	22
12.1. Перечень образовательных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине: .....	22
12.2. Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья.....	23
12.2. Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья.....	23

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

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

<b>Код компетенции</b>	<b>Результаты освоения ООП Содержание компетенций</b>	<b>Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине</b>
<b>ОПК-6</b>	способностью использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе	Знать: 1. основополагающие уравнения физики конденсированного состояния и основные приближения для их получения, 2. теорию основ зонной структуры кристаллов, 3. об электронном строении реальных кристаллов, 4. теоретические основы методов вычислений электронных свойств кристаллических материалов. Уметь: 1. работать с многочастичными волновыми функциями, 2. устанавливать физический смысл зонного спектра, 3. определять качественные и количественные параметры зонной структуры поверхностных и дефектных состояний реальных и гипотетических полупроводниковых и диэлектрических кристаллов, 4. применение пакета CRYSTAL к исследованию электронных свойств полупроводников и диэлектриков. Владеть: 1. методами одноэлектронного приближения, 2. приближенными методами расчета и анализа энергетических зон в идеальных кристаллах, 3. методами исследования зонной структуры реальных кристаллов, 4. современными компьютерными технологиями исследования физических свойств кристаллических систем на основе пакета CRYSTAL.
<b>ПК-1</b>	способностью самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта	Знать: 1. особенности зонной структуры полупроводниковых и диэлектрических кристаллов, 2. методы изучения химической связи, механизмы образования химической связи в полупроводниках, оксидах металлов, ионно-молекулярных кристаллах, 3. методы исследования оптических свойств, строение оптических спектров типичных полупроводников и диэлектриков, 4. фотоэлектронная эмиссия, фотоэлектронные спектры кристаллов простого и сложного составов, 5. методы тестирования программных комплексов, используемых при выполнении модельных расчетов. Уметь: 1. определять качественные и количе-

	<p>ственные параметры зонной структуры, плотности электронных состояний идеальных полупроводниковых и диэлектрических кристаллов, 2. определять качественные и количественные параметры химической связи кристаллов различной структуры, 3. определять количественные параметры оптических спектров; проводить сопоставление с экспериментальными спектрами и строить модели оптических свойств кристаллов различной структуры, 4. определять количественные параметры фотоэлектронных спектров; проводить сопоставление с экспериментальными данными и строить модели фотоэмиссионных свойств кристаллов различной структуры, 5. Выделять особенности и устанавливать приоритеты выполнения расчетов в рамках поставленной задачи.</p> <p>Владеть: 1. методами расчёта зонной структуры полупроводниковых и диэлектрических кристаллов, 2. методами исследования межатомных взаимодействий и химической связи в полупроводниках и диэлектриках, 3. методами расчета оптических свойств полупроводниковых и диэлектрических систем, 4. методами вычисления энергетического распределения интенсивности, 5. Специальной терминологией, общепринятой различными профессиональными группами.</p>
--	---

## **2. Место дисциплины в структуре ООП магистратуры**

Дисциплина «Электронное строение полупроводников и диэлектриков» относится к профессиональному циклу подготовки и относится к вариативной части, определяемой по выбору студента. Дисциплина базируется на учебных курсах «Квантовой теории», «Теории конденсированного состояния», «Электродинамики», «Термодинамики», «Симметрии в физике твердого тела», «Методы электронной теории 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 информации прикладного характера.

Данная дисциплина подготовит студента к самостоятельным исследованиям электронных свойств кристаллов с помощью пакетов прикладных программ, будет способствовать выполнению курсовых и дипломных работ, написанию магистерских диссертаций, участию в научных конференциях.

Дисциплина изучается на 1 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 5 зачетных единиц (ЗЕ), 180 академических часов.

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

<b>Вид учебной работы</b>	<b>Всего часов</b>
Общая трудоемкость дисциплины	180
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	54
Аудиторная работа (всего):	54
в т. числе:	
Лекции	18
Практические занятия	18
Лабораторные работы	18
Внеаудиторная работа (всего):	
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	126
Вид промежуточной аттестации обучающегося (зачет/экзамен)	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 трудоёмкость (час.)	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудо- емкость (в часах)			Формы теку- щего контро- ля успеваемо- сти	
			аудиторные учебные занятия				
		все- го	лекции	практические занятия	лабораторные работы	Самостоятель- ная работа обучающихся	
1.	<b>Основы зонной теории полупроводников и диэлектриков. Образование энергетических зон в идеальных кристаллах.</b>	45	5	5	5	30	Реферат. Контрольная работа.
2.	<b>Особенности зонной структуры реальных кристаллов. Развитие методов расчета зонного спектра электронов в кристаллах. Методы теории функционала электронной плотности.</b>	45	5	5	5	30	Реферат. Кон- трольная рабо- та.
3.	<b>Зонная структура некоторых полупроводниковых и диэлектрических кристаллов. Физика химической связи в твердых телах.</b>	45	5	5	5	30	Реферат. Кон- трольная рабо- та.
4.	<b>Оптические свойства полупроводников и диэлектриков. Фотоэлектронные свойства полупроводников и диэлектриков.</b>	45	3	3	3	36	Реферат. Кон- трольная рабо- та.
<b>Всего за 2 семестр</b>		<b>180</b>	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>126</b>	<b>зачет</b>

#### 4.2 Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)

<b>№</b>	<b>Наименование раздела дисциплины</b>	<b>Содержание</b>
1	<b>Основы зонной теории полупроводников и диэлектриков. Образование энергетических зон в идеальных кристаллах.</b>	Уравнение Шредингера для кристалла. Адиабатическое приближение. Одноэлектронное приближение. Самосогласованный потенциал. Уравнения Хартри и Хартри-Фока. Периодическое поле решетки кристалла. Оператор трансляции. Волновой вектор. Теорема Блоха. Приближение квазиволнистого электрона. Вырождение в спектре энергии. Зоны Бриллюэна. Образование зон энергии в приближении квазиволнистого электрона. Приближение квазивзаимного электрона. Обменная энергия. Образование зон энергии в модели квазивзаимного электрона. Заполнение энергетических зон; понятие металла, диэлектрика и полупроводника.
<i>Темы лекций</i>		
1.1. Зонная теория твердого тела.		
1.2 Энергетические зоны в идеальных кристаллах.		
<i>Темы практических занятий</i>		
1.1. Применение пакета CRYSTAL к исследованию электронных свойств полупроводниковых и диэлектрических кристаллов.		
1.2 Расчет зонной структуры и плотности электронных состояний полупроводников и диэлектриков.		
<i>Темы лабораторных занятий</i>		
1.1. Расчет электронной структуры и построение карт распределений заряда в кристаллах Si и Ge.		
1.2 Электронная плотность в полупроводниковых кристаллах. Анализ основных параметров химической связи.		
2	<b>Особенности зонной структуры реальных кристаллов. Развитие методов расчета зонного спектра электронов в кристаллах. Методы теории функционала электронной плотности.</b>	Влияние внешних полей на спектр энергии кристалла; локализованные состояния электрона в неидеальной решетке; функции Ванье, примесные состояния; понятие о квазичастицах – экситоны и поляроны. Глубокие уровни в полупроводниках; элементарная теория глубоких уровней; типы глубоких примесей. Таммовские поверхностные состояния; поверхностные состояния в бинарных соединениях; зависимость поверхностных состояний от ориентации границы. Метод плоских волн; методы ортогонализованных плоских волн и присоединенных плоских волн; метод эмпирического и неэмпирического псевдопотенциала; метод сильной связи. Энергия системы как функционал плотности; самосогласованные уравнения; приближения для функционала; приближения для обменно-корреляционной энергии; методы решений уравнений Кона-Шэма. Пакеты прикладных программ для вычислений электронных свойств кристаллов.
<i>Темы лекций</i>		
2.1. Зонная структура реальных кристаллов		
2.2 Методы расчета электронной структуры кристаллов		
<i>Темы практических занятий</i>		

<b>№</b>	<b>Наименование раздела дисциплины</b>	<b>Содержание</b>
2.1.	Электронное строение поверхности полупроводниковых и диэлектрических кристаллов	
2.2	Моделирование примесных и дефектных состояний в кристаллах	
<b>Темы лабораторных занятий</b>		
2.1.	Расчет оптимальной геометрии, полной энергии и зонной структуры кристаллических арсенидов Ga(In)As.	
2.2	Вычисление зонной структуры AlAs методом псевдопотенциала	
3	<b>Зонная структура некоторых-полупроводниковых и диэлектрических кристаллов. Физика химической связи в твердых телах.</b>	Энергетические зоны в тетраэдрических кристаллах со структурой алмаза, цинковой обманки и вюрцитита; зонная структура щелочно-галоидных кристаллов; особенности зонной структуры галогенидов серебра; зонная структура оксидов щелочноземельных металлов. Образование химической связи; ионная, ковалентная, ван-дер-ваальсова типы связи; степень ковалентности, ионности; экспериментальные и теоретические методы изучения химической связи; метод подрешеток в исследовании распределения электронной плотности; механизмы образования химической связи в тетраэдрических полупроводниках, галогенидах и оксидах металлов, ионно-молекулярных кристаллах.
<b>Темы лекций</b>		
3.1.	Зонная структура типичных полупроводников и диэлектриков	
3.2	Химическая связь в кристаллах	
<b>Темы практических занятий</b>		
3.1.	Расчет зонной структуры и параметров химической связи нитридов металлов	
3.2	Электронное строение галогенидов серебра	
<b>Темы лабораторных занятий</b>		
3.1.	Зонная структура, атомные заряды и распределение электронной плотности фосфидов Al(Ga, In)P и сульфидов Be(Zn)S	
3.2	Зонная структура, атомные заряды и распределение электронной плотности фторидов NaF, CaF <sub>2</sub>	
4	<b>Оптические свойства полупроводников и диэлектриков. Фотоэлектронные свойства полупроводников и диэлектриков.</b>	Теоретический анализ междузонных оптических переходов, их связь с оптическими константами; структура оптических констант в критических точках; оптические переходы с учетом экситонных эффектов; экспериментальные и теоретические методы исследования оптических свойств; строение оптических спектров Si, Ge, GaAS, ЩГК, MgO, CaS. Фотоэлектрическая эмиссия; рентгеновская спектроскопия; методы вычисления энергетического распределения интенсивности; фотоэлектронные спектры кристаллов простого и сложного составов.
<b>Темы лекций</b>		
4.1.	Оптические свойства кристаллов	
4.2.	Фотоэмиссионные свойства кристаллов	
<b>Темы практических занятий</b>		
4.1.	Расчет оптических функций оксидов щелочных металлов	
4.2.	Моделирование фотоэлектронных спектров кристаллов	
<b>Темы лабораторных занятий</b>		
4.1.	Полная и парциальные плотности электронных состояний фосфидов Al(Ga, In)P и суль-	

<b>№</b>	<b>Наименование раздела дисциплины</b>	<b>Содержание</b>
	фидов Be(Zn)S	
4.2.	Полная и парциальные плотности электронных состояний фосфидов фторидов NaF, CaF <sub>2</sub>	

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

### **Вопросы для самостоятельной работы:**

1. Какие виды энергии электрона включаются в гамильтониан кристалла?
2. Сколько переменных содержит уравнение Шредингера для кристалла?
3. На чем основывается адиабатическое приближение?
4. На какие составляющие разбивается гамильтониан кристалла в результате адиабатического приближения?
5. Какой величиной оценивается поправка к полной энергии кристалла в результате адиабатического приближения?
6. Какое поле называется самосогласованным и почему?
7. Каким образом разыскивается самосогласованное поле?
8. Раскройте физический смысл самосогласованного потенциала.
9. В чем состоит значение введения самосогласованного приближения?
10. Чем отличаются уравнения Хартри и Хартри-Фока?
11. Как математически записать условие периодичности потенциальной энергии электрона в кристалле?
12. Докажите, что оператор трансляции коммутирует с оператором Гамильтона.
13. Чему равны собственные функции оператора трансляции?
14. Как записывается условие, которое называется трансляционным свойством волновой функции?
15. Какое решение должно иметь уравнение Шредингера для электрона в периодическом поле решетки кристалла?
16. Как выбираются волновые функции и оператор возмущения в теории квазивсвободного электрона.
17. Чему равны матричные элементы оператора возмущения в теории квазивсвободного электрона.
18. К чему приводит в спектре энергии поправка в первом порядке теории возмущений.
19. В каком случае в спектре энергии возникает вырождение.
20. Какие значения принимает энергия электрона в кристалле в случае вырождения.
21. Какой геометрический смысл имеют состояния, в которых энергия терпит разрыв.
22. Физический смысл первой зоны Бриллюэна.
23. Объясните механизм образования зон энергии в приближении квазивсвободного электрона.
24. Какой физический смысл имеют интегралы перекрывания.
25. Как выбираются базисные функции и оператор возмущения в теории квазивсвязанного электрона.
26. В чем состоит смысл обменной энергии.
27. Объясните механизм образования зон энергии в приближении квазивсвязанного электрона.
28. Почему в однородном электрическом поле электрон совершает колебательные периодические движения вдоль поля?
29. Где на шкале энергий располагаются локализованные состояния?
30. Чем определяется вблизи какой из зон (валентной или проводимости) располагаются зоны поверхностных состояний?

31. От чего зависит размер области локализации примесных состояний, какие функции используются для их описания?
32. Где на энергетической шкале будут располагаться акцепторные состояния?
33. Дайте определение поверхностных состояний.
34. Где на энергетической шкале будут располагаться поверхностные состояния и почему?
35. Как направлены скорости дырки и свободного состояния, если их энергии имеют одинаковое абсолютное значение?
36. Какое уравнение называется псевдоволновым и почему?
37. Как определяется структурный и форм-фактор псевдопотенциала?
38. Почему метод псевдопотенциала получил широкое распространение в практических расчетах зонной структуры? Что выгодно отличает его от других методов.
39. В чем состоит метод ЛКАО?
40. Как соотносятся между собой энергии связывающих и антисвязывающих орбиталей?
41. Сформулируйте схему вычисления зонной структуры по методу сильной связи «вручную»
42. В чем заключаются основные положения теории функционала плотности? Свободна ли эта теория от приближений?
43. Каким условиям должна удовлетворять электронная плотность в теории функционала плотности?
44. В чем состоит основная сложность в решении уравнений Кона-Шэма?
45. Чем отличаются между собой кристаллические структуры типа цинковой обманки и вюрцитита?
46. Назовите типичных представителей соединений  $A^{III}B^{IV}$  и укажите, в каких структурных формах они могут существовать?
47. Сколько зон содержит валентная область соединений  $A^{III}B^{IV}$ ?
48. Какими состояниями формируются верхние валентные и нижние зоны проводимости соединений  $A^{III}B^{IV}$ ?
49. К какому классу: прямозонных или непрямозонных относятся соединений типа  $A^{II}B^{VI}$ ?
50. Чем принципиально отличаются валентные области BeS и ZnS?
51. Какие практические важные свойства кристаллов определяют параметры зонной структуры?
52. Чем принципиально отличается зонное строение сульфида цинка в структуре сфалерита и вюрцитита?
53. Имеются ли принципиальные различия в зонных спектрах галоидов и оксидов щелочных металлов?
54. Чем отличаются, чем обусловлено и как проявляется в практических важных свойствах зонные спектры галогенидов щелочных металлов и галогенидов серебра?
55. Назовите типичных представителей классов соединений типа  $A^{II}B_2^{VII}$  и  $A_2^I B^{VI}$  и чем отличаются их зонные спектры?
56. Какие изменения в зонном спектре должны наблюдаться в ряду LiF, NaF, KF, RbF исходя из общих закономерностей диэлектрических кристаллов?
57. В чем состоит метод валентных связей в теории молекул?
58. В чем сходство и различие  $\sigma$ -связей и  $\pi$ -связей?
59. Какие типы химической связи выделяют в твердых телах?
60. Какими физическими свойствами обладают ковалентные кристаллы?
61. Какая связь в твердом теле самая слабая и почему?
62. Какую информацию несут карты распределения деформационной плотности в различных кристаллографических плоскостях?
63. В чем состоит метод подрешеток для исследования механизмов образования химической связи в кристаллах?
64. В чем состоят основные характеристики химической связи в щелочно-галоидных кристаллах?
65. Какими экспериментальными методами можно установить распределение электронного

- заряда в кристаллах?
66. В каких из перечисленных соединений  $d$ -электроны участвуют в образовании химической связи: CuCl, AgCl, ZnS и почему?
67. Кристаллы BeO и ZnO относятся к одному структурному типу вюртцита. Есть ли различия в химической связи этих соединений и почему?
68. Какие оптические процессы могут возникать при освещении кристаллической среды?
69. Как определяются и какую информацию несут в себе коэффициенты отражения и поглощения?
70. Что называется коэффициентом экстинкции?
71. В чем состоит метод оптической эллипсометрии?
72. Для чего используются соотношения Крамерса-Кронига?
73. Какую информацию несут критические точки?
74. Какие величины, характеризующие оптические свойства могут быть рассчитаны теоретически?
75. Перечислите типы сингулярностей Ван Хова.
76. Что позволяет сравнение теоретических и экспериментальных оптических спектров?
77. Что называется краем фундаментального поглощения?
78. Чем принципиально отличается зонная структура кристаллов с прямым и непрямым краем поглощения?
79. Какой край поглощения наблюдается в оксиде меди, имеющего структуру куприта?
80. В каких типах кристаллов экситонные эффекты проявляются наиболее явно и почему?
81. Для чего необходимо исследование энергий связи оставшихся электронов в кристаллах?
82. Как называются методы исследования в которых в качестве падающих частиц используются электроны и регистрируются также электроны?
83. Какой источник дает самый широкий спектр излучения возбуждающих частиц?
84. Почему пики в энергетических спектрах испущенных электронов метода фотоэмиссии имеют сдвиги по отношению к энергии падающего фотона?
85. Дайте схематическое описание фотоэлектронного спектрометра.
86. Как определяется и какой величиной характеризуется выбор начала отсчета по шкале энергий в методах РФЭС и УФС?
87. Какой формулой характеризуется энергетический порог фотоэмиссии?
88. Какой спектр: плотности состояний или экспериментальный УФС имеет более богатую структуру?
89. Дайте качественное объяснение УФС AgCl. Чем полоса, отвечающая  $d$ -электронам, отличается от остальных валентных полос?

### **Задания для самостоятельной работы:**

1. Ознакомьтесь со статьей: Yoon-Suk Kim, Kerstin Hummer, and Georg Kresse. Accurate band structures and effective masses for InP, InAs, and InSb using hybrid functionals // PHYSICAL REVIEW B **80**, 035203 (2009). Выполните с помощью пакета ABINIT в LDA и GGA приближениях обменно-корреляционного потенциала расчет зонной структуры кристаллов InX (X: P, As, Sb). Проведите сравнение полученных вами параметров зонной структуры: ширины валентной, запрещенной зон, величины спин-орбитального расщепления с параметрами полученными в указанной статьей, цитированной в ней литературы, в том числе экспериментальными данными. Сделайте заключение о точности и корректности используемых вычислительных методик, в частности, выбора формы обменно-корреляционного функционала.
2. Ознакомьтесь со статьей: Жуков В.П., Зайнуллина В.М. Расчеты из первых принципов электронной структуры кристаллов типа флюорита ( $\text{CaF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ ,  $\text{SrF}_2$ ,  $\text{PbF}_2$ ) с френкелевскими дефектами. Анализ оптических и транспортных свойств. // Физика твердого тела. 40, №116 2019-2025 (1998). С помощью пакета CRYSTAL06 с использованием гибридных функционалов выполните расчет электронной структуры молекулы  $\text{F}_2$ , зонной структуры кристаллов  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ , плотности

- электронных состояний и сопоставьте результаты ваших вычислений и приведенных в статье. Сделайте вывод о результатах вычислений методами ЛКАО и ЛМТО.
3. Ознакомьтесь со статьей A. I. Kalugin and V. V. Sobolev. Electronic structure of cadmium fluoride // PHYSICAL REVIEW B **71**, 115112 (2005). С помощью пакета ABINIT выполните в LDA приближении расчет зонной структуры, плотности электронных состояний и оптических функций CdF<sub>2</sub>. Проведите сопоставление полученных Вами параметров зонной структуры, плотности состояний и мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости и данными приведенными в цитируемой статье. Сделайте вывод о корректности используемых вами расчетных параметров.
  4. Ознакомьтесь со статьей Bing Wang and M. J. Stott. First-principles local pseudopotentials for group-IV elements // PHYSICAL REVIEW B **68**, 195102 (2003). С помощью пакета ABINIT в LDA приближении с использованием различных типов псевдопотенциалов выполните расчет молекул Si<sub>2</sub>, Ge<sub>2</sub> и зонную структуру кристаллических кремния и германия. Проведите сравнение с приведенными в цитируемой литературе данными и сделайте заключение о влиянии формы псевдопотенциала на энергетический спектр молекул и кристаллов.
  5. Ознакомьтесь со статьей M. Cardona, R. K. Kremer, R. Lauck, and G. Siegle. Electronic, vibrational, and thermodynamic properties of ZnS with zinc-blende and rocksalt structure // PHYSICAL REVIEW B **81**, 075207 (2010). С помощью пакета ABINIT выполните расчет равновесной геометрии ZnS в структуре сфалерита и каменной соли. Проведите расчет зонной структуры и плотности состояний этих фаз в LDA и GGA приближениях обменно-корреляционного функционала. Проведите сопоставление с полученными в цитируемой статье результатами и сделайте вывод о корректности вычислений d-зон цинка.
  6. Ознакомьтесь со статьей U. Iessi, C. Parisi, M. Bernasconi, and Leo Miglio Role of tight-binding parameters and scaling laws on effective charges in semiconductors // PHYSICAL REVIEW B **61**, N 7 (2000). С помощью программного пакета CRYSTAL06 выполните расчет заселенностей электронных оболочек атомов в GaAs, InP и заселенностей перекрывания с ближайшими соседями. Определите эффективные заряды атомов и сопоставьте с приведенными данными в цитируемой статье. Сделайте вывод о характере химической связи в этих кристаллах.
  7. Ознакомьтесь со статьей S. Picozzi and A. Continenza, R. Asahi, W. Mannstadt, and A. J. Freeman, W. Wolf and E. Wimmer, C. B. Geller Volume and composition dependence of direct and indirect band gaps in ordered ternary III-V semiconductor compounds: A screened-exchange LDA study // PHYSICAL REVIEW B **61**, N 7 (2000). С помощью пакета ABINIT в LDA-приближении выполните расчет зонной структуры GaAs, InAs, InSb, GaSb. Сопоставлением с приведенными в цитируемой статье данными о параметрах зонной структуры, в том числе экспериментальными сделайте заключение о влиянии различных форм LDA- потенциалов на зонную структуру типичных полупроводников.
  8. Ознакомьтесь со статьями: a) Giancarlo Cappellini, Sophie Bouette-Russo, Bernard Amadon, Claudine Noguera and Fabio Finocchi. Structural properties and quasiparticle energies of cubic SrO, MgO and SrTiO<sub>3</sub> // J. Phys.: Condens. Matter **12** (2000) 3671–3688; b) Atsushi Yamasaki and Takeo Fujiwara<sup>†</sup>. Electronic structure of the MO oxides .M: Mg, Ca, Ti, V. in the GW approximation // PHYSICAL REVIEW B **66**, 245108 (2002). С помощью пакета ABINIT в LDA-приближении с использованием GW-схемы выполните расчет зонной структуры кристалла MgO. Сопоставлением с результатами других авторов и экспериментальными данными сделайте вывод об эффективности применения GW-апроксимации на параметры электронного строения диэлектриков.
  9. Ознакомьтесь со статьей Peter V. Sushko a,b, Alexander L. Shluger. Electronic structure of excited states at low-coordinated surface sites of MgO // Surface Science 421 (1999) L157–L165. С помощью программного пакета CRYSTAL06 выполните расчет поверхностной энергии и зарядов атомов на поверхности MgO для 2, 3, 4, 5 слоев. Сравнением с литературными данными сделайте заключение о сходимости результатов к объему и рассчитайте зонную структуру поверхности MgO для направлений {1,0,0} и {1,1,1}.
  10. Ознакомьтесь со статьей Vladimir Oleshko Electronic, dielectric, and optical properties of individual composite silver halide microcrystals using the EELS and LMTO-ASA techniques // PHYSICAL REVIEW B **67**, 115409 (2003). С помощью программного пакета ABINIT выполните расчет зонной структуры и оптических функций кристалла AgBr. Сопоставлением с литературными теоре-

тическими и экспериментальными данными дайте описание оптических свойств этого кристалла.

11. Ознакомьтесь со статьей S. R. Barman, N. Shanthi, A. K. Shukla, and D. D. Sarma. Order-disorder and electronic transitions in Ag<sub>2</sub>S single crystals studied by photoemission spectroscopy // PHYSICAL REVIEW B **53**, N. 7 (1996). С помощью программного пакета CRYSTAL06 выполните расчет зонной структуры и плотности состояний Cu<sub>2</sub>S. Сопоставлением с экспериментальными УФС и РФЭС спектрами сделайте заключение о фотоэмиссионных свойствах этих кристаллов.
12. Ознакомьтесь со статьей Bjorn Baumeier, Peter Kruger, and Johannes Pollmann, Grigori V. Vajenine. Electronic structure of alkali-metal fluorides, oxides, and nitrides: Density-functional calculations including self-interaction corrections // PHYSICAL REVIEW B **78**, 125111 (2008). С помощью пакета ABINIT в LDA-приближении выполните расчеты равновесной геометрии и зонной структуры фторидов и оксидов лития, натрия, калия и сравнением с литературными данными сделайте вывод об эффективности применения поправки на самодействие (SIC) в случае диэлектриков.
13. Ознакомьтесь со статьей Mazharul M. Islam, Thomas Bredow, and Christian Minot. Theoretical Analysis of Structural, Energetic, Electronic, and Defect Properties of Li<sub>2</sub>O // J. Phys. Chem. B **2006**, *110*, 9413-9420. С помощью программного пакета CRYSTAL06 выполните расчет равновесной геометрии и зонного энергетического спектра кристалла Li<sub>2</sub>O. Сравнением с литературными данными подберите оптимальные параметры расчета. В модели суперячейки установите влияние на энергетический спектр вакансий лития, кислорода, а также смоделируйте примесь атомов магния в 25% отношении.
14. Ознакомьтесь со статьей E. A. Mikajlo and M. J. Ford. Energy and momentum resolved band structure of K<sub>2</sub>O: electron momentum spectroscopy and linear combination of atomic orbitals calculation // J. Phys.: Condens. Matter **15** (2003) 6955–6968. С помощью пакета CRYSTAL06 выполните расчет зонной структуры кристалла K<sub>2</sub>O. Путем сопоставления с экспериментальной зонной структурой выберите оптимальные (базис, обменно-корреляционный потенциал) параметры расчетной модели.
15. Ознакомьтесь со статьей H. Shi, R. I. Eglitis, and G. Borstel. *Ab initio* calculations of the CaF<sub>2</sub> electronic structure and F centers. PHYSICAL REVIEW B **72**, 045109 (2005). С помощью программного пакета CRYSTAL06 выполните расчет равновесной геометрии, параметров зонной структуры и химической связи CaF<sub>2</sub>. Сопоставлением с литературными данными убедитесь в корректности расчетной модели. Для суперячейки 2x2x2 выполните модельные вычисления энергий F-центров.
16. Ознакомьтесь со статьей Elisabeth A. Mikajlo, Helen E. Dorsett, Michael J. Ford. Trends in the band structures of the group-I and -II oxides // JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **120**, N 22 (2004). С помощью пакета CRYSTAL06 выполните расчеты равновесной геометрии и зонной структуры оксидов щелочных и щелочноземельных металлов. Сопоставлением с теоретическими и экспериментальными данными, приведенными в статьей сделайте заключение об общности и различии в электронном строении этих кристаллов. Установите энергетическое положение O<sub>1s</sub> основных состояний и определите зависимость их от зарядового состояния атомов кислорода.

## **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 компетен- ции (или её части)	наименование оценоч- ного средства
1.	<b>Основы зонной теории по- лупроводников и диэлек- триков. Образование энер- гетических зон в идеаль- ных кристаллах.</b>	<i>ОПК – 6 (Знать: 1,2, Уметь: 1,2, Владеть: 1,2)</i>	Реферат. Контрольная работа. Зачет.

2.	<b>Особенности зонной структуры реальных кристаллов. Развитие методов расчета зонного спектра электронов в кристаллах. Методы теории функционала электронной плотности.</b>	<i>ПК – 1</i> (Знать: 5, Уметь: 5, Владеть: 5); <i>ПК – 1</i> (Знать: 5, Уметь: 5, Владеть: 5); <i>ОПК – 6</i> (Знать: 3,4, Уметь: 3,4, Владеть: 3,4)	Реферат. Контрольная работа. Зачет.
3.	<b>Зонная структура некоторых полупроводниковых и диэлектрических кристаллов. Физика химической связи в твердых телах.</b>	<i>ПК – 1</i> (Знать: 1,2,5, Уметь: 1,2,5, Владеть: 1,2,5)	Реферат. Контрольная работа. Зачет.
4.	<b>Оптические свойства полупроводников и диэлектриков. Фотоэлектронные свойства полупроводников и диэлектриков.</b>	<i>ПК – 1</i> (Знать: 3,4,5, Уметь: 3,4,5, Владеть: 3,4,5)	Реферат. Контрольная работа. Зачет.

## 6.2 Типовые контрольные задания или иные материалы

### Темы рефератов:

1. Полупроводники и диэлектрики
2. Приближение квазисвободного электрона
3. Причины образования зонной структуры
4. Приближение квазисвязанного электрона
5. Метод эффективной массы
6. Эффект Зинера
7. Локализованные состояния
8. Функции Ванье
9. Водородоподобная модель описания примесных состояний
10. Квазичастицы поляроны
11. Экситоны Ванье и Френкеля
12. Метод плоских волн
13. Метод ортогонализованных и присоединенных плоских волн
14. Метод эмпирического псевдопотенциала
15. Приближение локальной электронной плотности
16. Особенность обобщенной градиентной аппроксимации обменно-корреляционного потенциала
17. Обменно-корреляционный потенциал в так называемых гибридных схемах
18. Остовные состояния кристаллов
19. Типичные характеристики зонного строения щелочно-галлоидных кристаллов
20. Особенности зонного строения соединений типа  $A^{II}B^{VI}$
21. Эффективный заряд атома в кристалле
22. Теоретические и экспериментальные методы установления природы квантовых состояний в кристаллах
23. Основные особенности химической связи к кристаллах со структурой сфалерита

24. Типы химической связи в ионно-молекулярных кристаллах
25. Методы экспериментального исследования оптических свойств кристалла
26. Теоретический и экспериментальный спектр кристалла германия
27. Химический сдвиг
28. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия
29. Метод спектроскопии электронных энергетических потерь
30. Трехступенчатая модель описания фотоэмиссии
31. Основные особенности спектра фотоэлектронов валентной области типичных соединений  $A^{III}B^V$
32. Метод обратной фотоэмиссии

### **Примеры контрольных заданий:**

- 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 поисковые 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 зонной структуры и плотности состояний объекта исследования. Нарисуйте зонную структуру, а количественные параметры приведите в таблице, вместе с данными других авторов (если имеются). График плотности состояний приведите на Рисунке вместе с экспериментальным ФЭС (если имеется). Дайте описание зонного строения объекта в виде раздела «Зонная структура»
- Выполните расчет распределения электронной плотности в актуальных кристаллографических плоскостях и приведите их на графиках. Определите эффективные заряды атомов в кристаллах и параметры заселенности перекрывания с ближайшими соседями. Установите характер химической связи в кристаллах. Результаты оформите в виде раздела «Химическая связь».
- 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»
- 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»

- По результатам проделанной работы сформулируйте основные результаты и выводы, которые оформите в разделе «Заключение». Окончательно скомпонуйте Вашу работу и представьте на проверку в установленные сроки.

**Объекты исследования:**

- Нитриды (AlN, GaN, InN - вюрцит)
- Арсениды (GaAs, InAs)
- Сульфиды (ZnS – все модификации)
- Фосфиды (GaP, InP)
- Бориды (BN, BAs, BSb)

**Вопросы к зачету:**

- Уравнение Шредингера для кристалла
- Адиабатическое приближение
- Одноэлектронное приближение
- Периодическое поле решетки кристалла
- Квазимпульс электрона в кристалле
- Эффективная масса электрона
- Приближение квазисвободного электрона
- Образование зон энергии в приближении квазисвободного электрона
- Приближение квазисвязанного электрона
- Образование зон энергии в приближении квазисвязанного электрона
- Расчеты зонной структуры методами псевдопотенциала
- Форм-факторы псевдопотенциала
- Методы эмпирического и неэмпирического псевдопотенциала
- Молекулярные орбитали и параметры перекрытия
- Зонная структура элементов IV группы по методу сильной связи
- Параметры перекрытия и расстояния между ближайшими соседями
- Теория функционала электронной плотности
- Энергия системы как функционал плотности
- Самосогласованные уравнения Кона-Шема
- Приближение локальной плотности
- Градиентное приближение
- Электронная структура кристаллов  $A^{III}B^V$
- Электронная структура кристаллов  $A^{II}B^{VI}$
- Электронная структура кристаллов со структурой вюрцита
- Электронная структура кристаллов со структурой каменной соли
- Электронная структура кристаллов со структурой флюорита и антифлюорита
- Вычисление параметров зонной структуры тетраэдрических полупроводников методом псевдопотенциала «вручную»
- Вычисление параметров зонной структуры тетраэдрических полупроводников методом сильной связи «вручную»
- Вычисление зонной структуры полупроводников со структурой цинковой обманки методами теории функционала плотности
- Вычисление зонной структуры полупроводников со структурой вюрцита методами теории функционала плотности
- Вычисление зонной структуры диэлектриков со структурой каменной соли методами теории функционала плотности
- Вычисление зонной структуры диэлектриков со структурой флюорита и антифлюорита методами теории функционала плотности
- Решеточное поглощение инфракрасного излучения в полупроводниках и диэлектриках

34. Поглощение света на межзонных переходах в диэлектриках и собственных полупроводниках
  35. Поглощение в экситонной области спектра
  36. Рассеяние света в твердых телах
  37. Фотоэлектронная эмиссия
- Применение методов РФС и УФС к анализу электронного строения кристаллов

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

Для магистранта достигнутый уровень обученности (итоговая отметка) определяется в соответствии с алгоритмом, приведенным в таблице.

<b>Уровни усвоения материала и сформированности способов деятельности</b>	<b>Конкретные действия студентов, свидетельствующие о достижении данного уровня</b>
Первый меньше 50 баллов «не засчитено»	<p>Результаты обучения студентов свидетельствуют об усвоении ими некоторых элементарных знаний основных вопросов по дисциплине. Допущенные ошибки и неточности показывают, что студенты не овладели необходимой системой знаний по дисциплине.</p>
Второй (репродуктивный) от 51 до 65 баллов «засчитено»	<p>Достигнутый уровень оценки результатов обучения показывает, что студенты обладают необходимой системой знаний и владеют некоторыми умениями по дисциплине. Студенты способны понимать и интерпретировать освоенную информацию, что является основой успешного формирования умений и навыков для решения практико-ориентированных задач:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– воспроизводят термины, конкретные факты, методы и процедуры, основные понятия, правила и принципы;</li> <li>– проводят простейшие расчеты;</li> <li>– выполняют задания по образцу (или по инструкции).</li> </ul>
Третий (реконструктивный) от 66 до 85 баллов «засчитено»	<p>Студенты продемонстрировали результаты на уровне осознанного владения учебным материалом и учебными умениями, навыками и способами деятельности по дисциплине. Студенты способны анализировать, проводить сравнение и обоснование выбора методов решения заданий в практико-ориентированных ситуациях, а именно:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– объясняет факты, правила, принципы;</li> <li>– преобразует словесный материал в математические выражения;</li> <li>– предположительно описывает будущие последствия, вытекающие из имеющихся данных;</li> <li>– устанавливает взаимосвязи между составом, строением и свойствами веществ;</li> <li>– проводить расчеты;</li> <li>– применяет законы, теории в конкретных практических ситуациях;</li> <li>– использует понятия и принципы в новых ситуациях.</li> </ul>

<p><b>Четвертый (творческий) от 86 до 100 баллов «зачтено»</b></p>	<p>Студенты способны использовать сведения из различных источников для успешного исследования и поиска решения в нестандартных практико-ориентированных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– ориентируется в потоке физической информации, определяет источники необходимой информации, получать её, анализировать;</li> <li>– пишет реферат;</li> <li>– предлагает план проведения расчета;</li> <li>– составляет схемы задачи.</li> <li>– оценивает логику построения;</li> <li>– оценивает соответствие выводов имеющимся данным;</li> <li>– оценивает значимость того или иного продукта деятельности;</li> <li>– прогнозирует свойства веществ на основе знания об их составе и строении и, наоборот, предполагает строение веществ на основе их свойств;</li> <li>– планирует и осуществляет компьютерный эксперимент.</li> </ul>
--	--

Компетенции, приобретенные в результате обучения, оцениваются на основе учета посещаемости, написанных рефератов, выполненных контрольных заданий и сданного зачета.

1. Посещение каждого лекционного, практического и лабораторного занятия оценивается в 2, 2 и 3 балла, соответственно.

2. Максимальная оценка реферата - 8 баллов. Оценка «удовлетворительно» (4-5 баллов) выставляется, если реферат оформлен согласно требованиям, присутствуют основные разделы в его структуре. Оценка «хорошо» (6-7 баллов) выставляется, если не только оформление, но и содержание реферата отвечает требованиям к выполнению рефератов. Оценка «отлично» (8 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 дубляж отдельного источника, а посредством проработки целого ряда различных источников.

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 Суг или Arial Суг, 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 основная 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, уходом от проблемы, категоричность и пестрота изложения, бедный или слишком научно-образный 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.

3. Контрольные задания оцениваются по следующей системе: оценка 4-5 баллов выставляется, если студент 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 6-7 баллов выставляется в случае, если проблема решена, студент владеет методами её решения. Оценка 8-9 баллов выставляется, если выбран оптимальный метод решения проблемы, задание выполнено с осмыслением логических взаимосвязей и полученных результатов. Студент должен уметь доказательно объяснять действия необходимые для выполнения задания.

Максимальный аттестационный балл - 20:

На зачете оценка выставляется согласно ответам на вопросы. Оценка «удовлетворительно» (10-13 баллов) выставляется, если студент владеет понятийным аппаратом, терминологией. Оценка «хорошо» (14-17 балла) выставляется, если ответ содержит не только терминологические аспекты, но и понимание физического смысла. Оценка «отлично» (18-20 баллов) выставляется, если студент 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.

<b>Вид деятельности</b>	<b>Макс. балл</b>	<b>Кол-во</b>	<b>итого</b>
посещение лекций	2	9	18
посещение практик	2	9	18
посещение лабораторных	3	9	27
контрольные задания	9	1	9
реферат	8	1	8
зачет	20	1	20
			100

Результирующая оценка определяется как сумма всех полученных оценок. Для получения «зачета» необходимо и достаточно, чтобы результирующая оценка составляла не менее 51 балла. Если студент за текущую работу (по текущей успеваемости) получает 51 и более баллов, то он автоматически получает «зачет» без итогового аттестационного испытания.

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

### *a) основная учебная литература:*

1. Цирельсон, В.Г. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов. [Электронный ресурс] : учеб. пособие — М. : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/94104> (дата последнего обращения: 14.10.17)
2. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. [Электронный ресурс] : учеб. пособие — М. : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 397 с. — Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/94111> (дата последнего обращения: 14.10.17)

### *b) дополнительная учебная литература:*

1. Теория физических и физико-химических свойств сложных кристаллических соединений с различным типом химической связи" под общ. ред. Поплавного А.С. // Кемерово. - 2012. - 399 с. ([http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=25&pl1\\_id=44378](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=44378))
2. Корабельников Д.В., Поплавной А.С., Кравченко Н.Г. Физикаnanoструктур: учеб. пособие – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2016. – 161 с.
3. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. – М.: Наука , 1977. –672 с.
4. А.И.Ансельм Введение в теорию полупроводников. СП.: Лань, 2008. – 624 с..
5. Журавлев Ю.Н. Химическая связь в полупроводниковых и диэлектрических кристаллах. Кемерово. 2009. – 208 с.

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

<http://www.crystal.unito.it> (Дата обращения: 10.01.2017)

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины**

Следует внимательно изучить учебную программу дисциплины, характеризующую курс «Электронное строение полупроводников и диэлектриков» 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 и учебно-методические пособия.

Во время лекции по «Электронное строение полупроводников и диэлектриков» студент 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. Во время конспектирования в работу включается моторно-двигательная память, позволяющая эффективно усвоить лекционный материал. Весь иллюстративный материал, представляемый на лекции (на слайдах, на доске, в раздаточном материале) также должен быть зафиксирован в конспекте лекций. Каждому студенту необходимо помнить о том, что конспектирование лекции – это не диктант. Студент должен уметь (или учиться уметь) выделять главное и фиксировать основные моменты «своими словами». Это гораздо более эффективно, чем запись «под диктовку».

Каждому студенту необходимо основательно закреплять полученные знания и вырабатывать навыки самостоятельной работы. Для эффективного достижения целей обучения по дисциплине «Электронное строение полупроводников и диэлектриков», процесс изучения материала курса предполагает достаточно интенсивную работу не только на лекциях и семинарах, но и с различными информационными ресурсами в ходе самостоятельной работы на которую отводится более половины времени обучения. В рабочей программе приведены вопросы и 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 такое понятие как «самосогласованный потенциал», при изучении раздела №2 на понятия «локализованные состояния», «экзитоны и поляроны», «функционал плотности», а при изучении раздела №4 на такие принципиально важные понятия как «оптические переходы» и «фотоэлектрическая эмиссия».

При подготовке к зачету особое внимание следует обратить на то, что целью курса является овладение теоретическими и информационными методами исследования и анализа электронных характеристик, а также обучение описанию наблюдаемых и прогнозированию новых физических свойств полупроводниковых и диэлектрических материалов, 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.

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

1. Microsoft Office ([www.microsoft.com](http://www.microsoft.com)) – лицензия КемГУ
2. Программа CRYSTAL (<http://www.crystal.unito.it>) – лицензия КемГУ

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

1. Компьютерный класс, подключенный к сети ИНТЕРНЕТ, на 10 рабочих мест.
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:**

применяемые на лекционных занятиях

- Технология концентрированного обучения (лекция-беседа, привлечение внимания студентов к наиболее важным вопросам темы, содержание и темп изложения учебного материала определяется с учетом особенностей студентов)
- Технология активного (контекстного) обучения (визуализированная лекция с разбором конкретных ситуаций)
- Технология проблемного обучения (проблемная лекция)
- Технология развивающего обучения (лекция-визуализация, развернутое комментирование подготовленных наглядных материалов)

применяемые на практических занятиях

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

## ***12.2. Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья***

В процессе изучения дисциплины и осуществления процедур текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации лиц с ограниченными возможностями здоровья применяются адаптированные формы обучения с учётом индивидуальных психофизиологических особенностей. При определении форм проведения занятий с обучающимися-инвалидами учитываются рекомендации данные по результатам медико-социальной экспертизы, содержащиеся в индивидуальной программе реабилитации инвалида, относительно рекомендованных условий и видов труда.

При необходимости обучающиеся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья пользуются специальными рабочими местами, созданными с учётом нарушенных функций и ограничений жизнедеятельности.

*Для лиц с нарушением зрения (слепых и слабовидящих):*

- специализированное стационарное рабочее место ЭлСИС 201;
- специализированное стационарное рабочее место ЭлСИС 221;
- специализированное мобильное место ЭлНОТ 301;
- принтер Брайля (+ПО для трансляции текста в шрифт Брайля).

*Для лиц с нарушением слуха:*

- система информационная для слабослышащих стационарная «Исток» С-1И;
- беспроводная звукозаписывающая аппаратура коллективного пользования: радиокласс (радиомикрофон) «Сонет-PCM» РМ-3.1.

*Для лиц с нарушением опорно-двигательного аппарата:*

- компьютерный стол для лиц с нарушениями опорнодвигательной системы с электроприводом;

- клавиатура с накладной и с кнопочной мышкой с расположением кнопок сверху Аккорд;
- беспроводная мышь трекбол для ПК Logitech M570;
- клавиатура с джойстиком для выбора клавиши на цветовом поле.

Особенности процесса изучения дисциплины и осуществления процедур текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации:

Для лиц с нарушением зрения задания и инструкции по их выполнению предоставляются с укрупненным шрифтом, для слепых задания оформляются рельефно-точечным шрифтом Брайля или в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением для слепых, либо зачитываются им. При необходимости обеспечивается индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс, предоставляется увеличивающее устройство, а также возможность использовать собственное увеличивающие устройство.

Для лиц с нарушением слуха дидактический материал (слайд-презентации лекций, задания и инструкции к их выполнению) предоставляются в письменной форме или электронном виде при необходимости. Обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости студентам предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования.

Для лиц с тяжелыми нарушениями речи текущий и промежуточный контроль проводятся в письменной форме.

При необходимости лица с нарушениями двигательных функций нижних конечностей выполняют лабораторные работы на базе 7 блочной аудитории в паре с обучающимся без ограниченных возможностей здоровья; письменные задания выполняются дистанционно, при этом взаимодействие с преподавателем осуществляется через ЭИОС; лекции проводятся в 1 и 2 блочных аудиториях, практические занятия в аудиториях 8 и 2 корпусов КемГУ.

Для лиц с нарушениями двигательных функций верхних конечностей или отсутствием верхних конечностей лабораторные работы выполняются в паре с обучающимся без ограниченных возможностей здоровья; письменные задания выполняются дистанционно, при этом взаимодействие с преподавателем осуществляется через ЭИОС; зачет сдаётся в устной форме.

При необходимости лицу с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для выполнения заданий и сдачи зачёта, но не более чем на 0.5 часа.

Студенты с ограниченными возможностями здоровья сдают зачёт в одной аудитории совместно с иными обучающимися, если это не создает трудностей для студентов при сдаче зачёта.

Студенты с ограниченными возможностями здоровья могут в процессе обучения и прохождения текущего и итогового контроля пользоваться техническими средствами, необходимыми им в связи с их индивидуальными особенностями.

Допускается присутствие в аудитории во время сдачи зачёта ассистента из числа работников КемГУ или привлечённых лиц, оказывающих студентам с ограниченными возможностями здоровья необходимую техническую помощь с учётом их индивидуальных особенностей (занять рабочее место, передвигаться, прочитать и оформить задание, общаться с преподавателями).

Особые условия предоставляются студентам с ограниченными возможностями здоровья на основании заявления, содержащего сведения о необходимости создания соответствующих специальных условий.

Составители:

Корабельников Д. В., к.ф.-м.н., доцент кафедры теоретической физики

Журавлев Ю. Н., д.ф.-м.н., профессор кафедры общей физики