



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ (ШКОЛА)

СОГЛАСОВАНО

УТВЕРЖДАЮ


Руководитель ОП ДТФИТ

И.о. зам. директора по учебной и
научно-исследовательской работе ИНТПМ


(подпись)

Нефедев К.В.
(ФИО)




(подпись)

Красицкая С.Г.
(ФИО.)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Введение в квантово-химические и квантово-механические методы
функционала электронной плотности**
Программа магистратуры
по направлению подготовки 03.04.02 Физика,
профиль «Вычислительная физика и квантовые технологии (совместно
с МФТИ)»
Форма подготовки очная

курс 1 семестр 1

лекции 00 час.

практические занятия 34 час.

лабораторные работы 00 час.

в том числе с использованием

всего часов аудиторной нагрузки 34 час.

самостоятельная работа 74 час.

в том числе на подготовку к экзамену нет час (если экзамен предусмотрен).

контрольные работы (количество) не предусмотрены

курсовая работа / курсовой проект не предусмотрены

зачет 1 семестр

экзамен нет

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями
Федерального государственного образовательного стандарта
по направлению подготовки **03.03.02 Физика**,
утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования РФ
от 7 августа 2020 г. № 891.

Рабочая программа обсуждена на заседании Департамента теоретической физики и
интеллектуальных технологий, протокол № 4 от «25» ноября 2021 г.

Директор Департамента: Нефедев К.В.

Составители: профессор, д.ф.-м.н. Афремов Л. Л., доцент, к.ф.-м.н. Ильюшин И. Г.

Владивосток,
2022

Оборотная сторона титульного листа РЦД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании ДТФИТ:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании ДТФИТ:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

III Рабочая программа пересмотрена на заседании ДТФИТ:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

IV. Рабочая программа пересмотрена на заседании ДТФИТ:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

1. Цели и задачи освоения дисциплины:

Цель: Цель изучения дисциплины – приобретение систематизированных знаний по квантово-механическим и квантово-химическим методам расчета характеристик магнитных систем с помощью методов функционала электронной плотности.

Задачи:

- изучение основных принципов квантовой теории конденсированного состояния;
- освоение математического аппарата физики квантовой теории конденсированного состояния;
- изучение основных понятий и задач квантовой теории конденсированного состояния.

Профессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения:

Тип задач	Код и наименование профессиональной компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции
Профессиональные задачи	ПК-1 Способен применять методы научных исследований в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	ПК -1.1 Анализирует способы определения видов и типов профессиональных задач, структурирования задач различных групп
		ПК -1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения основных типов задач, встречающихся в физике
		ПК – 1.3 Проводит научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
ПК -1.1 Анализирует способы определения видов и типов профессиональных задач, структурирования задач различных групп	Знает методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии
	Умеет применять методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
	Владеет навыками анализа и выбора методов научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии
ПК -1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения основных типов задач, встречающихся в физике	Знает, как проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)
	Умеет проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)
	Владеет навыками первичного поиска и анализа информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)
ПК – 1.3 Проводит научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Знает, как проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива
	Умеет проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива
	Владеет навыками проведения научных исследований, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива

2. Трудоёмкость дисциплины и видов учебных занятий по дисциплине

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачётных единиц (108 академических часов).

(1 зачетная единица соответствует 36 академическим часам)

Видами учебных занятий и работы обучающегося по дисциплине могут являться:

Обозначение	Виды учебных занятий и работы обучающегося
Пр	Практические занятия
СР	Самостоятельная работа обучающегося в период теоретического обучения
Контроль	Самостоятельная работа обучающегося и контактная работа обучающегося с преподавателем в период промежуточной аттестации

Структура дисциплины:

Форма обучения – очная

№	Наименование раздела дисциплины	Семес	Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося	Формы промежуточной аттестации

			Лек	Лаб	Пр	ОК	СР	Контроль	
1	Раздел №1 Квантовые модели описания твердого тела	1	-	-	17	-	36	-	Зачет
2	Раздел №2 Основные квантовые уравнения в физике твердого тела	1	-	-	17	-	36	-	
	Итого:	1	-	-	34	-	74	-	Зачет

3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА (Самостоятельная работа)

Раздел 1. Квантовые модели описания твердого тела час.. Дискретная упругая цепочка. Квантовая теория непрерывной упругой струны. Плазмоны. Длинноволновые оптические фононы в изотропном кристалле. Акустические колебания с большой длиной волны. Ферромагнитные магноны. Антиферромагнитные магноны. Другие вопросы, связанные с ферромагнитными магнонами.

Тема 1. Акустические фононы . Дискретная упругая цепочка. Квантовая теория непрерывной упругой струны. Акустические колебания с большой длиной волны. Фононы в изотропном кристалле. Фононы в конденсированном бозонном газе.

Тема 2. Плазмоны, оптические фононы и поляризационные волны час. 2. Плазмоны. Длинноволновые оптические фононы в изотропном кристалле. Взаимодействие оптических фононов с фотонами.

Тема 3. Магноны Ферромагнитные магноны. Антиферромагнитные магноны. Другие вопросы, связанные с ферромагнитными магнонами.

Раздел 2. Основные квантовые уравнения в физике твердого тела час. 24 час. Метод уравнений движения для полей частиц. Уравнение Хартри – Фока. Электронный газ в приближениях Хартри и Хартри - Фока. Метод самосогласованного поля. Диэлектрический формализм. Диэлектрическое экранирование точечных заряженных примесей. Численные расчеты энергии корреляции. Электрон-электронное взаимодействие. Диэлектрический формализм на языке диаграммной техники. Свободный электрон в магнитном поле. Эффект де Гааза — Ван Альфена. Полуклассическое рассмотрение динамики электрона в магнитном поле. Топологические свойства орбит в магнитном поле. Циклотронный резонанс на сфероидальных энергетических поверхностях. Магнетосопротивление. Уравнение переноса для магнетосопротивления.

Метод Вигнера — Зейтц . Приближение почти свободных электронов (обобщенный метод ортогонализированных плоских волн).

Энергетические зоны, циклотронный резонанс и примесные состояния. Энергетические зоны. Примесные состояния и уровни Ландау в полупроводниках. Экситоны

Тема 4. Фермионные поля и приближение Хартри-Фока. Метод уравнений движения для полей частиц. Уравнение Хартри – Фока. Электронный газ в приближениях Хартри и Хартри - Фока.

Тема 5. Теория систем многих частиц и её применение к электронному газу час. 6. Метод самосогласованного поля.

Диэлектрический формализм. Диэлектрическое экранирование точечных заряженных примесей. Численные расчеты энергии корреляции. Электрон-электронное взаимодействие. Диэлектрический формализм на языке диаграммной техники. Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна и симметрия кристалла.

Тема 6. Функции Блоха час. Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна и симметрия кристалла

Тема 7. Динамика электронов в магнитном поле час.. Свободный электрон в магнитном поле. Эффект де Гааза — Ван Альфена.

Полуклассическое рассмотрение динамики электрона в магнитном поле. Топологические свойства орбит в магнитном поле. Циклотронный резонанс на сфероидальных энергетических поверхностях.

Магнетосопротивление. Уравнение переноса для магнетосопротивления.

Тема 8. Расчет энергетических зон и поверхностей Ферми час.. Метод Вигнера — Зейтц . Приближение почти свободных электронов (обобщенный метод ортогонализированных плоских волн).

Тема 9. Полупроводниковые кристаллы час.. Энергетические зоны, циклотронный резонанс и примесные состояния. Энергетические зоны. Примесные состояния и уровни Ландау в полупроводниках. Экситоны.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

Самостоятельная работа студентов при подготовке к практическим занятиям состоит в тщательном и внимательном изучении лекций, материалов прошедшего занятия, решении домашних практических заданий, подготовке к теории следующего практического занятия. Самостоятельная работа студентов при подготовке к зачету состоит в углубленном изучении

теоретического материала, повторении практического материала семестра (курса), рассмотрении в литературе рекомендованных на лекциях тем.

В самостоятельной работе студентов предусматриваются следующие виды занятий:

1. Выполнение домашних заданий по следующей тематике: пространство и время в классической механике, относительность механического движения, система отсчета, задачи кинематики.

2. Самостоятельная проработка отдельных разделов лекционного курса, входящих в модули. Написание коллоквиумов.

3. Решение задач из задачников с последующей их проверкой преподавателем.

4. Самостоятельная работа студентов при подготовке к зачету состоит в углубленном изучении теоретического материала, повторении практического материала семестра (курса), рассмотрении в литературе рекомендованных на лекциях тем.

Рекомендации для самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студента предполагает изучение некоторых тем самостоятельно и ответы на вопросы:

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 1. Акустические фононы час. 2.

Рассматриваются типы химической связи и атомной структуры кристаллических твёрдых тел и, в частности, важнейших полупроводников.

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 2. Плазмоны, оптические фононы и поляризационные волны час. 4. Рассматриваются уравнения движения атомов в кристалле и их решения, закон дисперсии упругих волн, акустические и оптические колебания, квантование колебаний, понятие квазичастицы на примере фонона.

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 3. Магноны час. 4. Рассматриваются квантование одномерной цепочки. Роль нелинейности (кубический и 4-го порядка члены в гамильтониане). Определяется теплоемкость одно- дву- и трехмерной решеток, вклад в теплоемкость от оптических фононов.

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 4. Фермионные поля час. 4. Задача экранирования (уравнение Пуассона). Экранирование невырожденным электронным газом. Экранирование 2D электронами. Квантовые эффекты в задаче экранирования (фриделевские осцилляции). Плазмоны в трехмерном металле

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 5. Теория систем многих частиц час. 4. Электрон-фононное взаимодействие в модели Кронига-Пенни. Электрон-фононное взаимодействие в приближении туннельного гамильтониана.

Электрон-фононное взаимодействие. Пьезоэффект

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 6. Функции Блоха час. 4. Проводимость металла в модели Друде. Вклад в проводимость от рассеяния на примеси: шар радиуса R – классическая и квантовая задачи. Электрон-фононное рассеяние. Температурная зависимость. 1D и 2D модели

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 7. Динамика Электронов в магнитном поле час. 4. Кинетическое уравнение Больцмана

Найти проводимость электронного газа в приближении времени релаксации. Показать, что если электронный газ невырожден, а тепловая скорость электронов больше скорости звука, то рассеяние электронов на акустических фонах является квазиупругим. Решить линеаризованное уравнение Больцмана для электронов в неоднородном электрическом поле.

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 8. Расчет энергетических зон и поверхностей Ферми час. 4. Найти компоненты тензора электрической проводимости в слабом магнитном поле в приближении времени релаксации Решить задачу 1 в переменном магнитном поле Обсудить задачу 1 в случае 2D электронов в сильном магнитном поле (квантовый эффект Холла). Показать, что в пределе низких температур в однозонном приближении магнетосопротивление равно нулю.

ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗАНЯТИЕ 9. Полупроводниковые кристаллы час. 4. Найти электронную теплоемкость двумерного газа. Найти уровни энергии электронов в квантовой проволоке с прямоугольным спектром в присутствие заряженной примеси. Записать гамильтониан Рашбы (спин-орбитальное взаимодействие на изотропной ориентированной поверхности) и найти спектр электронов. Рассматриваются атомная структура и особенности энергетического спектра неупорядоченных (аморфных) полупроводников, плотность состояний и локализация электронных состояний, роль ближнего порядка в формировании электронного спектра некристаллических полупроводников, спектры оптического поглощения.

5. СТРУКТУРА, СОДЕРЖАНИЕ, УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ (и Онлайн курса при наличии)

Рекомендации по самостоятельной работе студентов

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

№ п/п	Вид самостоятельной работы	Дата/сроки выполнения	Примерные нормы времени на выполнение	Форма контроля
	Задания для самостоятельной работы к разделу 1.	1-6 неделя	36	Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)
	Задания для самостоятельной работы к разделу 2.	7-18 неделя	36	Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)

Задания для самостоятельной работы к теме 1.

Подготовка конспектов лекций, ответов на вопросы. Текущий контроль включает контроль посещаемости обучающимися еженедельных занятий, оценку их активности в ходе дискуссий, презентация бакалавром доклада по одному из разделов программы курса.

1. Структура жидких и твердых тел. Твердые тела : кристаллические, аморфные, поликристаллические, квазикристаллические
2. Типы кристаллических решеток. Решетки Бравэ.
3. Прямая и обратная решетки. Свойства обратной решетки
4. Теорема Блоха
5. Колебания решетки. Фононный спектр решетки с одним атомом в элементарной ячейке
6. Колебания решетки. Фононный спектр решетки с двумя атомами в элементарной ячейке
7. Динамика решетки графена
8. Квантование решеточных мод. Фононы
9. Теплоемкость кристаллической решетки
10. Дифракция на решетке
11. Электроны в кристаллической решетке. Модель почти свободных электронов
12. Электроны в кристаллической решетке. Модель сильной связи
13. Статистика электронов в кристалле. Электронный вклад в теплоемкость
14. Зонная структура кристаллов. Металлы, полуметаллы, диэлектрики, полупроводники.
15. Зонная структура графена. Топологические изоляторы.

Задания для самостоятельной работы к теме 2.

Подготовка конспектов лекций, ответов на вопросы. Текущий контроль включает контроль посещаемости обучающимися еженедельных занятий, оценку их активности в ходе дискуссий, презентация бакалавром доклада по одному из разделов программы курса.

- Элементарные возбуждения в твердых телах. Экситоны, плазмоны.
 Элементарные возбуждения в твердых телах. Поляроны
 Взаимодействие с внешним электро-магнитным полем. Поляритоны

Спин во внешнем поле. Магноны.

Кинетическое уравнение Больцмана. Электропроводность

Кинетическое уравнение Больцмана. Теплопроводность.

Кинетическое уравнение Больцмана. Приближение времени релаксации.

Рассеяние на кулоновской примеси. Кинетическое уравнение Больцмана.

Приближение времени релаксации. Рассеяние на фононах.

Электроны в магнитном поле. Эффект Холла. Циклотронный резонанс.

Магнетосопротивление.

Электроны в квантующем магнитном поле. Уровни Ландау. Квантовый эффект Холла.

Фазовые переходы в твердых телах. Теория Ландау. Ферромагнетизм.

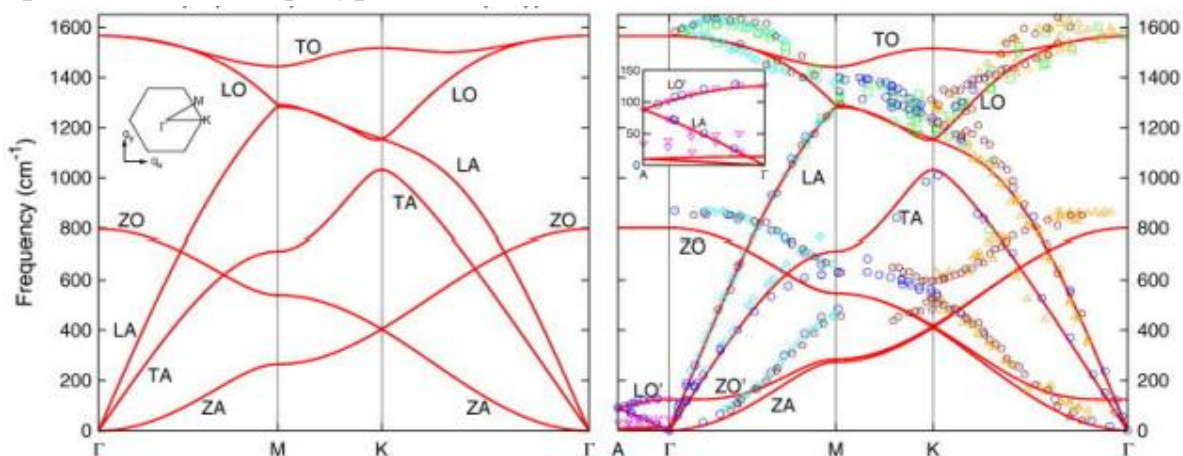
Фазовые переходы в твердых телах. Теория Ландау. Переходы в сегнетоэлектриках

Фазовые переходы в твердых телах. Переходы Мотта, Андерсена, Пайерлса.

Задания для самостоятельной работы к практическому занятию 1-2.

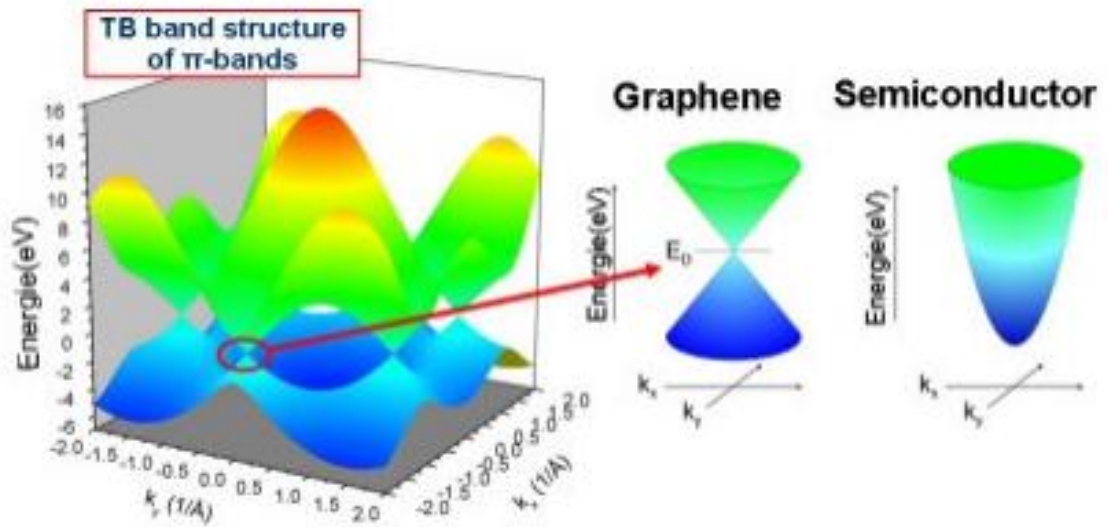
Текущий контроль включает контроль посещаемости обучающимися еженедельных занятий, оценку их активности в ходе дискуссий, обсуждения решенных задач

На Рис. 1 Показан фононный спектр графена. Нижняя ZA мода $2\omega\beta = k$ ($7\beta \approx 6 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$) соответствует колебаниям в направлении, перпендикулярном плоскости листа. Предполагая наличие только этой ветви, определить температурную зависимость фононной компоненты теплоемкости графена при низких температурах.



Задача 2

На Рис. 2 показана электронная зонная структура графена. Фермиевская скорость v_F вблизи точки Дирака ($v_F = \hbar^{-1} \partial E / \partial k$) равна 10^6 м/с . Предполагая уровень Ферми совпадающим с точкой Дирака, определить температурную зависимость электронной компоненты теплоемкости графена при низких температурах.



Задача 3

Фононный спектр одномерной решетки имеет вид $\omega = 2 \sin \frac{ka}{2}$.
 Определить температурную зависимость фоновой компоненты теплоемкости при низких температурах.

6. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Оценочные средства			
				текущий контроль	промежуточная аттестация		
	Раздел №1 Квантовые модели описания твердого тела	ПК -1.1 Анализирует способы определения видов и типов профессиональных задач, структурирования задач различных групп	Знает методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии	Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)	Экзамен. Вопросы 1-5.		
			Умеет применять методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии				
			Владет навыками анализа и выбора методов научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии				
	Раздел №2 Основные квантовые уравнения в физике твердого тела	ПК -1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения основных типов задач, встречающихся в физике	Знает, как проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)			Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)	Экзамен Вопросы 6-16
			Умеет проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)				
			Владет навыками первичного поиска и анализа информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)				
2	Раздел №2 Основные квантовые уравнения в физике твердого тела	ПК – 1.3 Проводит научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Знает, как проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)	Экзамен Вопросы 6-16		
			Умеет проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива				

			Владеет навыками проведения научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива		
--	--	--	--	--	--

Типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности, а также критерии и показатели, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие результаты обучения, представлены в Приложении

7. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(электронные и печатные издания)

1. Пайерлс, Рудольф Квантовая теория твердых тел / Рудольф Пайерлс ; перевод А. А. Абрикосов. — Москва, Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика, Институт компьютерных исследований, 2019. — 260 с. — ISBN 978-5-4344-0718-2. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/92041.html> (дата обращения: 16.03.2023)

2. Цвелик, А. М. Квантовая теория поля в физике конденсированного состояния / А. М. Цвелик. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2004. — 320 с. — ISBN 5-9221-0237-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/2714> (дата обращения: 16.03.2023). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. Квантовая теория твердых тел / Ч. Киттель ; пер. с англ. А. А. Гусева Москва : Наука, 1967. 491 с. <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=chamo:667883&theme=FEFU>

Дополнительная литература

(печатные и электронные издания)

1. Ансельм А.И. Введение в физику полупроводников. - М.: Наука, 1978.
2. Ашкрофт Н., Мермин Н. "Физика твердого тела". 1 и 2 том, 1979. Изд-во "Мир", Москва
3. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука, 1978.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. - М.: Мир, 1974.
5. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников.- М.:Наука,1990.
6. Н.Б.Брандт, С.М.Чудинов . "Энергетические спектры электронов и фононов". 1980. Изд-во Московского университета, Москва.
7. В.В.Шмидт ."Введение в физику сверхпроводимости". 2000. МЦ НМО, Москва.
8. Основы физики конденсированного состояния вещества : учебное пособие для вузов / Е. В. Бабкин, И. Краус, Г. Госманова ; Сибирский государственный аэрокосмический университет. Красноярск : [Изд-во Сибирского аэрокосмического университета] , 2007, 227 с.

9. Основы физики конденсированного состояния вещества : учебное пособие для вузов / Е. В. Бабкин, И. Краус, Г. Госманова ; Сибирский государственный аэрокосмический университет. Красноярск : [Изд-во Сибирского аэрокосмического университета] , 2007,227 с.
10. Диаграмматика. Лекции по избранным задачам теории конденсированного состояния / М. В. Садовский, Изд. 2-е, испр. и доп Москва ,Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика : Институт компьютерных исследований , 2010,376 с
11. Основы физики конденсированного состояния : [учебное пособие] / Ю. В. Петров Долгопрудный : Интеллект , 2013,213 с

**Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети
«Интернет»**

Не предусмотрено.

**Перечень информационных технологий
и программного обеспечения**

Не предусмотрено.

8.МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционные занятия ориентированы на освещение вводных тем в каждый раздел курса и призваны ориентировать студентов в предлагаемом материале, заложить научные и методологические основы для дальнейшей самостоятельной работы студентов.

Важной является самостоятельная работа по курсу. В ходе этой работы студенты отбирают необходимый материал по изучаемому вопросу и анализируют его.

Методические указания по сдаче зачета.

Зачеты принимаются ведущим преподавателем. При большом количестве групп у одного преподавателя или при большой численности потока по распоряжению заведующего кафедрой (заместителя директора филиала по учебной и воспитательной работе) допускается привлечение в помощь ведущему преподавателю других преподавателей.

Форма проведения зачета (устная, письменная и др.) утверждается на заседании кафедры по согласованию с руководителем в соответствии с рабочей программой учебной дисциплины.

Во время проведения зачета студенты могут пользоваться рабочей программой учебной дисциплины, а также с разрешения преподавателя, проводящего зачет,

справочной литературой и другими пособиями (учебниками, учебными пособиями, рекомендованной литературой и т.п.).

Зачетные ведомости являются основными первичными документами по учету успеваемости студентов. Администраторы образовательных программ до начала процедуры приема зачетов и экзаменов формируют зачетно-экзаменационные ведомости.

При явке на экзамены и зачеты студенты обязаны иметь при себе зачетную книжку, которую они предъявляют экзаменатору.

Преподаватель заполняет соответствующие графы зачетной книжки студента, а именно: название дисциплины записывается полностью, без сокращений, в соответствии с учебным планом, также указывается фамилия преподавателя, оценка, дата, подпись, трудоемкость дисциплины, указанная в зачетно-экзаменационной ведомости или листе.

При промежуточной аттестации обучающимся устанавливаются оценки: по зачетам: «зачтено» и «не зачтено».

В зачетную книжку студента и в экзаменационную ведомость вносятся только положительные оценки, неудовлетворительные оценки вносятся только в экзаменационную ведомость. При заполнении ведомости не допускаются прочерки или незаполненные графы. Неявка студента на зачет без уважительной причины может быть засчитана как получение неудовлетворительной оценки, при этом в ведомости делается запись «не явился».

Оценки, выставленные экзаменатором по итогам зачетов, не подлежат пересмотру.

Студент, не согласный с выставленной оценкой, имеет право в течение следующего рабочего дня подать заявление, согласованное с руководителем ООП, на имя директора Школы (филиала) с просьбой о передаче экзамена комиссии. В случае обоснованности поданного заявления директор Школы создает комиссию в составе не менее 3 профильных преподавателей по соответствующей кафедре. Оценка, полученная студентом во время передачи экзамена комиссии, является окончательной.

Студент должен изучить основные типы конденсированных сред, классификацию кристаллических решеток, кристаллические сингонии, пространственные группы кристалла; основные приближения зонной теории кристаллов, особенности энергетического спектра электрона в кристалле, понятие эффективной массы, классификацию твердых тел на металлы, полупроводники и диэлектрики с точки зрения зонной теории;

Рассмотреть особенности классического и квантово-механического описания электронного газа, основные термодинамические и кинетические характеристики и электромагнитные свойства электронного газа в полупроводниках и металле;

методы описания динамики решетки, основные типы колебаний решетки, оптические и акустические фононы и их свойства;

-методы описания и механизмы взаимодействия электрического и магнитного полей с решеткой; физическую теорию магнетизма, основные типы магнетиков.

В результате изучения дисциплины студент должен уметь осуществлять методологическое обоснование научного исследования; использовать в исследовательской работе современные научные методы рассчитывать кинетические и термодинамические характеристики квантового электронного газа; находить спектр локализованных состояний методами теории возмущений.

Студент должен овладеть принципами расчета кинетических и термодинамических характеристик твердого тела; методами расчета колебаний атомной решетки; описывать электронные состояния в конденсированных средах; методами использующие представление вторичного квантования; методами квантовой механики в приложении к задачам физики конденсированных состояний.

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться в следующих помещениях, оснащенных соответствующим оборудованием и программным обеспечением, расположенных по адресу 690022, г. Владивосток, о.Русский, п. Аякс, 10:

Перечень материально-технического и программного обеспечения дисциплины приведен в таблице.

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы ¹	Оснащенность специальных помещений и помещений для проведения учебных занятий, для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
Учебные аудитории для проведения учебных занятий:		
D208/347, D303, D313а, D401, D453, D461, D518, D708, D709, D758, D761, D762, D765, D766, D771, D917, D918, D920, D925, D576, D807	Лекционная аудитория оборудована маркерной доской, аудиопроигрывателем	ЗДЕСЬ ДОПОЛНИТСЯ ЛИЦЕНЗИОННЫМ ПО
D229, D304, D306, D349, D350, D351, D352, D353, D403, D404, D405, D414, D434, D435, D453, D503, D504, D517, D522, D577, D578, D579, D580, D602, D603, D657, D658, D702, D704, D705,	2 этаж, пом № 135, Мультимедийная аудитория: Проектор Mitsubishi EW330U, Экран проекционный ScreenLine Trim White Ice, профессиональная ЖК-панель 47", 500 Кд/м2, Full HD M4716CCBA LG, подсистема видеисточников документ-камера CP355AF Avervision; подсистема видеокмутации; подсистема аудиокмутации и звукоусиления; подсистема интерактивного управления	

¹ В соответствии с п.4.3. ФГОС

D707, D721, D722, D723, D735, D736, D764, D769, D770, D773, D810, D811, D906, D914, D921, D922, D923, D924, D926		
D207/346	Мультимедийная аудитория: Проектор 3-chip DLP, 10 600 ANSI-лм, WUXGA 1 920x1 200 (16:10) PT-DZ110XE Panasonic; экран 316x500 см, 16:10 с эл. приводом; крепление настенно-потолочное Elpro Large Electrol Projecta; профессиональная ЖК-панель 47", 500 Кд/м2, Full HD M4716CCBA LG; подсистема видеоисточников документ-камера CP355AF Avervision; подсистема видеокоммутации; подсистема аудиокоммутации и звукоусиления; подсистема интерактивного управления),	
D226	Мультимедийная аудитория: Проектор Mitsubishi EW330U, Экран проекционный ScreenLine Trim White Ice, профессиональная ЖК-панель 47", 500 Кд/м2, Full HD M4716CCBA LG, подсистема видеокоммутации; подсистема аудиокоммутации и звукоусиления; подсистема интерактивного управления), D362 (профессиональная ЖК-панель 47", 500 Кд/м2, Full HD M4716CCBA LG, подсистема аудиокоммутации и звукоусиления; Компьютерный класс на 15 посадочных мест	
D447, D448, D449, D450, D451, D452, D502, D575	Мультимедийная аудитория: Проектор Mitsubishi EW330U, Экран проекционный ScreenLine Trim White Ice, подсистема видеоисточников документ-камера CP355AF Avervision; подсистема видеокоммутации; подсистема аудиокоммутации и звукоусиления; подсистема интерактивного управления	
D446, D604, D656, D659, D737, D808, D809, D812	Мультимедийная аудитория: Проектор Mitsubishi EW330U, Экран проекционный ScreenLine Trim White Ice, профессиональная ЖК-панель 47", 500 Кд/м2, Full HD M4716CCBA LG, подсистема видеоисточников документ-камера CP355AF Avervision; подсистема видеокоммутации; подсистема аудиокоммутации и звукоусиления; подсистема интерактивного управления; Компьютерный класс; Рабочее место: Компьютеры (Твердотельный диск - объемом 128 ГБ; Жесткий диск - объем 1000 ГБ; Форм-фактор – Tower); комплектуется клавиатурой, мышью. Монитором AOC i2757Fm; комплектом шнуров эл. питания) Модель - M93p 1; Лингафонный класс, компьютеры оснащены программным комплексом Sanako study 1200	
D501, D601	Мультимедийная аудитория: Проектор Mitsubishi EW330U, Экран проекционный ScreenLine Trim White Ice, профессиональная ЖК-панель 47", 500 Кд/м2, Full HD M4716CCBA LG, подсистема видеоисточников документ-камера CP355AF	

	<p>Avervision; подсистема видеокоммутации; подсистема аудиокоммутации и звукоусиления; подсистема интерактивного управления; Компьютерный класс на 26 рабочих мест. Рабочее место: Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK</p>	
<p>Помещения для самостоятельной работы:</p>		
<p>A1042 аудитория для самостоятельной работы студентов</p>	<p>Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK – 115 шт.; Интегрированный сенсорный дисплей Polymedia FlipBox; Копир-принтер-цветной сканер в e-mail с 4 лотками Xerox WorkCentre 5330 (WC5330C; Полноцветный копир-принтер-сканер Xerox WorkCentre 7530 (WC7530CPS Оборудование для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья: Дисплей Брайля Focus-40 Blue – 3 шт.; Дисплей Брайля Focus-80 Blue; Рабочая станция Lenovo ThinkCentre E73z – 3 шт.; Видео увеличитель ONYX Swing-Arm PC edition; Маркер-диктофон Touch Мемо цифровой; Устройство портативное для чтения плоскочечатных текстов PEarl; Сканирующая и читающая машина для незрячих и слабовидящих пользователей SARA; Принтер Брайля Emprint SpotDot - 2 шт.; Принтер Брайля Everest - D V4; Видео увеличитель ONYX Swing-Arm PC edition; Видео увеличитель Topaz 24" XL стационарный электронный; Обучающая система для детей тактильно-речевая, либо для людей с ограниченными возможностями здоровья; Увеличитель ручной видео RUBY портативный – 2 шт.; Экран Samsung S23C200B; Маркер-диктофон Touch Мемо цифровой.</p>	<p>Microsoft Windows 7 Pro MAGic 12.0 Pro, Jaws for Windows 15.0 Pro, Open book 9.0, Duxbury BrailleTranslator, Dolphin Guide (контракт № А238-14/2); Неисключительные права на использование ПО Microsoft рабочих станций пользователей (контракт ЭА-261-18 от 02.08.2018): - лицензия на клиентскую операционную систему; - лицензия на пакет офисных продуктов для работы с документами включая формат.docx , .xlsx , .vsd , .ptt.; - лицензия па право подключения пользователя к серверным операционным системам , используемым в ДВФУ : Microsoft Windows Server 2008/2012; - лицензия на право подключения к серверу Microsoft Exchange Server Enterprise; - лицензия на право подключения к внутренней информационной системе документооборота и порталу с возможностью поиска информации во множестве удаленных и локальных хранилищах, ресурсах, библиотеках информации, включая порталные хранилища, используемой в ДВФУ: Microsoft SharePoint; - лицензия на право подключения к системе централизованного управления рабочими станциями, используемой в ДВФУ: Microsoft System Center.</p>

10. ФОНДЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонды оценочных средств представлены в приложении.

(фонды оценочных средств включают в себя: перечень форм оценивания, применяемых на различных этапах формирования компетенций в ходе освоения дисциплины модуля, шкалу оценивания каждой формы, с описанием индикаторов достижения освоения дисциплины согласно заявленным компетенций, примеры заданий текущего и промежуточного контроля, заключение работодателя на ФОС (ОМ))



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ (ФИЛИАЛ)

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
Введение в квантово-химические и квантово-механические методы
функционала электронной плотности
Программа магистратуры
по направлению подготовки 03.04.02 Физика,
профиль «Вычислительная физика и квантовые технологии (совместно
с МФТИ)»

Владивосток
2022

Перечень форм оценивания, применяемых на различных этапах формирования компетенций в ходе освоения дисциплины / модуля

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Оценочные средства			
				текущий контроль	промежуточная аттестация		
2	Раздел №1 Квантовые модели описания твердого тела	ПК -1.1 Анализирует способы определения видов и типов профессиональных задач, структурирования задач различных групп	Знает методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии	Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)	Экзамен. Вопросы 1-5.		
			Умеет применять методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии				
			Владеет навыками анализа и выбора методов научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии				
	Раздел №2 Основные квантовые уравнения в физике твердого тела	ПК -1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения основных типов задач, встречающихся в физике	Знает, как проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)			Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)	Экзамен Вопросы 6-16
			Умеет проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)				
			Владеет навыками первичного поиска и анализа информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)				
Раздел №2 Основные квантовые уравнения в физике твердого тела	ПК – 1.3 Проводит научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Знает, как проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Собеседование (УО-1), Устный опрос (УО-1), Тест (ПР-1)	Экзамен Вопросы 6-16			
		Умеет проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива					

			Владеет навыками проведения научных исследований, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива		
--	--	--	--	--	--

Оценочные средства для текущего контроля

Перевод оценки из 100-балльной в четырехбалльную производится следующим образом:

- отлично – от 80 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- хорошо – от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно – от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно – менее 45 баллов.

Критерии оценки (в баллах):

- 25-30 баллов выставляется студенту, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Студент без затруднений ответил на все дополнительные вопросы. Практическая часть работы выполнена полностью без неточностей и ошибок;
- 17-24 баллов выставляется студенту, если студент раскрыл в основном теоретические вопросы, однако допущены неточности в определении основных понятий. При ответе на дополнительные вопросы допущены небольшие неточности. При выполнении практической части работы допущены несущественные ошибки;
- 10-16 баллов выставляется студенту, если при ответе на теоретические вопросы студентом допущено несколько существенных ошибок в толковании основных понятий. Логика и полнота ответа страдают заметными изъянами. Заметны пробелы в знании основных методов. Теоретические вопросы в целом изложены достаточно, но с пропусками материала. Имеются принципиальные ошибки в логике построения ответа на вопрос. Студент не решил задачу или при решении допущены грубые ошибки;
- 1-10 баллов выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Студент не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

Оценочные средства для промежуточной аттестации

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Шкала оценивания промежуточной аттестации	
		Неудовлетворительно	Отлично
ПК -1.1 Анализирует способы определения видов и типов профессиональных задач, структурирования задач различных групп	Знает методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии	Не знает методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии	Знает все изложенные в курсе методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии
	Умеет применять методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии	Не умеет применять методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии	Умеет применять все изложенные методы научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии
	Владеет навыками анализа и выбора методов научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии	Не владеет навыками анализа и выбора методов научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии	Владеет и отлично ориентируется во всех изложенных в курсе навыками анализа и выбора методов научных экспериментальных и теоретических физических исследований, современную приборную базу и информационные технологии
ПК -1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения основных типов задач, встречающихся в физике	Знает, как проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)	Не знает, как проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)	Знает, как проводить превосходный первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)
	Умеет проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)	Не умеет проводить первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)	Умеет проводить превосходный первичный поиск информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)
	Владеет навыками первичного поиска и анализа информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)	Не владеет навыками первичного поиска и анализа информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)	Владеет навыками превосходного первичного поиска и анализа информации по заданной тематике (в том числе, с использованием патентных баз данных)

ПК – 1.3 Проводит научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Знает, как проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Не знает, как проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Знает, как проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива в рамках теории функционала плотности
	Умеет проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Не умеет проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Умеет проводить научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива в рамках теории функционала плотности
	Владеет навыками проведения научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Не владеет навыками проведения научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива	Владеет навыками проведения научные исследования, получает новые научные и прикладные результаты самостоятельно, и в составе научного коллектива в рамках теории функционала плотности

Список вопросов к Зачету

1. Вектор трансляции, решетка, базис.
2. Двухмерные кристаллы: элементарная и примитивная ячейки, решетки Браве для двухмерных кристаллов.
3. Трехмерные кристаллы, решетки Браве для трехмерных кристаллов. Индексы Миллера и обозначение направлений.
4. Простые кристаллические структуры: кубическая гранецентрированная и гексагональная с плотной упаковкой; структура алмаза и хлористого натрия.
5. Анизотропия твердых тел. Явление полиморфизма. Классификация типов связи в кристаллах: ионные, ковалентные, металлические и молекулярные кристаллы.
6. Закон Брэгга. Экспериментальные методы исследования структуры твердых тел: метод Лауэ, метод вращения кристалла, порошковый метод.
7. Мозаичная структура. Примеси. Атомы в междоузлиях и вакансии.

8. Равновесная концентрация дефектов. Дислокации.
9. Основные параметры упругих волн. Соотношения дисперсии для упругих волн в одномерной кристаллической цепочке, состоящей из одинаковых атомов и из атомов 2-х видов.
10. Акустические и оптические ветви колебаний для одномерных и трехмерных кристаллов. Акустические и оптические фононы.
11. Обратная решетка. Зоны Бриллюэна. Закон Дюлонга-Пти, модель Эйнштейна. Дебаевская теория теплоемкости решетки.
12. Теплоемкость электронов проводимости в металлах. Теплопроводность твердых тел.
13. Свободный электронный газ Ферми (одномерный случай). Энергия Ферми, функция распределения Ферми-Дирака. Свободный электронный газ в трехмерном случае. Поверхность (сфера) Ферми.
14. Электропроводность и закон Ома. Теплопроводность металлов, закон ВидеманаФранца. Причины появления запрещенных зон на основе рассмотрения брэгговского отражения электронных волн.
15. Металлы, полупроводники и диэлектрики с точки зрения зонной теории. Волновые функции электрона в периодической решетке. Схема приведенных зон. Эффективная масса электрона, дырки. Собственная проводимость. Закон действующих масс. Концентрация собственных носителей. Структура энергетических зон (на примере германия). Циклотронный резонанс в полупроводниках
16. Эффективная масса электрона, дырки. Собственная проводимость. Закон действующих масс. Концентрация собственных носителей. Структура энергетических зон (на примере германия). Циклотронный резонанс в полупроводниках.

Комплект тестов (тестовых заданий)

по дисциплине «Квантовая теория твердого тела»

1. Сопоставьте ...

1. Ионная связь а. связь осуществляющаяся посредством классической электронной пары, электрон курсирует между двумя атомами.

2. Ковалентная связь б. связь имеющее сходство с ковалентной, т.к. в основе лежит обобществление внешних валентных электронов – только атомов всей решетки.

3. Металлическая связь с. связь, обусловленная в основном электростатическим взаимодействием противоположно заряженных ионов

Ответ: 1-с, 2-а, 3-б

2. Уравнение Лауэ

а)

$$a \vec{S} = 2c\alpha \sin\theta = h\lambda$$

$$b \vec{S} = 2b\beta \sin\theta = k\lambda$$

$$c \vec{S} = 2a\gamma \sin\theta = l\lambda \}$$

б)

$$a \vec{S} = 2a\alpha \sin\theta = h\lambda$$

$$b \vec{S} = 2b\beta \sin\theta = k\lambda$$

$$c \vec{S} = 2c\gamma \sin\theta = l\lambda \}$$

12

c)

$$a \vec{S} = 2a\alpha \cos\theta = h\lambda$$

$$b \vec{S} = 2b\beta \cos\theta = k\lambda$$

$$c \vec{S} = 2c\gamma \cos\theta = l\lambda \}$$

d)

$$a \vec{S} = 2a\alpha \sin\theta = 0$$

$$b \vec{S} = 2b\beta \sin\theta = 0$$

$$c \vec{S} = 2c\gamma \sin\theta = 0$$

}

Ответ: b

3. Обычным методом описания положения плоскости в кристаллической решетке

являются

1 метод Крамера

2 метод Гаусса

3 индексы Миллера

4 индексы Хокинга

Ответ: с

4. фазовая скорость

a) $\omega\phi = x = hc$

b) $\omega\phi =$

ω

q

$= c\lambda$

c) $\omega\phi = x = \omega c = hc$

d) $\omega\phi = x = \omega q = v\lambda$

Ответ: d

5. Число фононов в твердом теле не постоянно. Фононов ...

a) тем больше, чем ниже температура, а при приближении их к нулю их число также стремится к нулю.

b) тем больше, чем ниже температура, а при приближении их к нулю их число

стремится к бесконечности.

с) тем больше, чем выше температура, а при приближении их к нулю их число также стремится к нулю.

d) тем больше, чем выше температура, а при приближении их к нулю их число стремится к бесконечности.

Ответ: с

6. Зона Бриллюэна представляет собой ...

a) ячейку Вигнера – Зейтца в обратной решетке.

b) индекс Миллера в обратной решетке.

с) ячейку Хокинга

d) зону Бриллюэна

Ответ : а

7. Первая зона Бриллюэна является ...

a) зоной с наименьшим объемом, она полностью ограничена плоскостями, которые делят пополам перпендикулярные к ним векторы обратной решетки, проведенные изначала координат

b) является зоной с наименьшим объемом, она полностью ограничена плоскостями, которые делят пополам параллельные к ним векторы обратной

решетки, проведенные к нулевым координатам

с) является зоной с наибольшим объемом не ограниченной плоскостями.

d) является зоной с наибольшим объемом, но при этом ограниченной плоскостями, которые делят пополам перпендикулярные к ним векторы обратной решетки, проведенные изначала координат

Ответ: а

8. «Волны» частиц описывают волновыми функциями, которые выглядят следующим образом:

a) $\psi = A(kx - \omega t)$

b) $\psi = Aei(kx - \omega t)$

c) $\psi = Aei(k - \omega t)$

d) $\psi = A(k + \omega t)$

Ответ: b

9. Какое из следующих утверждений верно:

a) Ферми – газ есть система взаимодействующих электронов, подчиняющихся принципу Луи де-Бройля, та же система с взаимодействием называется Ферми – жидкостью, теорию которую разработал Ландау.

b) Ферми – газ есть система взаимодействующих электронов, подчиняющихся принципу Бора, та же система с взаимодействием называется Ферми – твердое тело , теорию которую разработал Эйнштейн .

c) Ферми – газ есть система невзаимодействующих электронов, подчиняющихся принципу Паули, та же система с взаимодействием называется Ферми – жидкостью, теорию которую разработал Ландау.

d) Ферми – газ есть система невзаимодействующих электронов, подчиняющихся принципу Паули, та же система с взаимодействием называется Ферми – жидкостью, теорию которую разработал Луи де-Бройль.

Ответ: c

Закон выполняется..... Это объясняют различием типа столкновений, обуславливающих процессы теплопроводности

a) при очень низких температурах (при $T \ll \theta_L$ увеличивается)

b) при не очень высоких температурах (при $T \ll \theta_L$ уменьшается)

c) при не очень низких температурах (при $T \ll \theta_L$ уменьшается)

d) при очень низких температурах (при $T \ll \theta_L$ увеличивается)

Ответ: c

11. Движение электрона в кристалле можно описать с помощью волнового пакета, составленного из ...

- a) блоховских функций.
- b) волновых функций
- c) функций Лоренца

Ответ: a

12. Ширина энергетической щели –...

- a) запрещенная зона - равна сумме между наиболее высокой точкой зоны проводимости и наиболее низкой точкой валентной зоны.
- b) запрещенная зона - равна сумме между наиболее низкой точкой зоны проводимости и наиболее высокой точкой валентной зоны.
- c) запрещенная зона - равна разности между наиболее низкой точкой зоны проводимости и наиболее высокой точкой валентной зоны.
- d) запрещенная зона - равна разности между наиболее высокой точкой зоны проводимости и наиболее низкой точкой валентной зоны.

Ответ: c

14. Какое из следующих утверждений верно:

- a) В идеальном полупроводнике происходит рассеяние на решетке (фононах), в реальном полупроводнике – рассеяние на примесных атомах, но при высоких температурах преобладает рассеяние на фононах.

b) В идеальном полупроводнике происходит рассеяние на решетке (фононах), в реальном полупроводнике – рассеяние на фононах, но при высоких температурах преобладает рассеяние на примесных атомах.

с) В идеальном полупроводнике происходит рассеяние на решетке (фононах), в реальном полупроводнике – рассеяние на фононах, но при низких температурах преобладает рассеяние на примесных атомах.

d) В идеальном полупроводнике происходит рассеяние на решетке (фононах), в реальном полупроводнике – рассеяние на примесных атомах, но при низких температурах преобладает рассеяние на фононах.

Ответ :a

15. При поглощении света твердыми телами энергия фотонов превращается в другие виды энергии. Она может идти на изменение энергетического состояния свободных или связанных с атомами электронов, а также на изменение колебательной энергии атомов. Поглощение обусловлено, в основном, действием следующих механизмов:

a) межзонных электронных переходов из валентной зоны в зону проводимости. Связанное с этим механизмом поглощение получило название собственного или фундаментального;

b) переходов, связанных с участием экситонных состояний (экситонное поглощение);

с) переходов электронов или дырок внутри соответствующих разрешенных зон, т. е. переходов, связанных с наличием свободных носителей заряда. Данное поглощение называют поглощением свободными носителями заряда;

d) все перечисленное

Ответ: d

Критерии оценки (в баллах)

За каждый правильный ответ- 1 балл

Решение задач

1. Рассчитайте радиус октаэдрической поры в решётке γ -железа и сравните величину деформации при внедрении в них атома:

1) азота ($R_N = 0,71 \text{ \AA}$); 2) углерода ($R_C = 0,77 \text{ \AA}$); 3) кислорода ($R_O = 0,66 \text{ \AA}$).

2. Выразите концентрацию сплава в массовых процентах.

1) Al–23 ат. %Li; 2) Ag–40 ат. %Cu; 3) Fe–20 ат. %Mo; 4) Ti–40 ат. %Zr; 5) Pb–28 ат. %Sn

3. Выразите концентрацию сплава в атомных процентах.

1) Ag–25 мас. %Cu; 2) Fe–11 мас. %Si; 3) Fe–15 мас. %Mo; 4) Al–8 мас. %Ca; 5) Ti–25 мас. %Al.

4. Оцените частоту перескоков вакансии и атома и коэффициент самодиффузии при комнатной температуре и вблизи температуры плавления:

1) в никеле; 2) в железе и 3) в цинке.

5. Оцените среднеквадратическое смещение вакансии и атома за 1 час (в микронах и в единицах межатомного расстояния) при комнатной температуре и вблизи температуры плавления:

1) в золоте; 2) в вольфраме и 3) в платине.

6. Сталь с исходной концентрацией углерода C_∞ находится в цементационной печи с температурой T и углеродным потенциалом C_0 . Рассчитайте:

а) концентрацию углерода на глубине h через время τ_1 ; б) спустя какое время эта концентрация достигнет C_1 ; в) глубину слоя, где концентрация превышает C_1 , через время τ_2 ; г) во сколько раз больше времени потребуется для получения слоя такой же глубины, если температуру понизить на 100°C ? Коэффициент диффузии углерода в аустените примите равным $D = 0,10 \exp(-134 \cdot 10^3 / RT)$ см²/с (энергия активации выражена в Дж/моль). $T = 920^\circ\text{C}$; $C_\infty = 0,12\%$; $C_0 = 1,2\%$; $C_1 = 0,65\%$; $h = 0,8$ мм; $\tau_1 = 8$ ч; $\tau_2 = 16$ ч.

7. Найдите среднее расстояние между дислокациями: а) в отожжённом металле с плотностью дислокаций $\rho = 10^6$ см⁻²; б) в холоднодеформированном металле с $\rho = 10^{10}$ см⁻². Сравните его с радиусом ядра дислокаций (радиус ядра $\sim 3b$).

8. Сколько километров дислокаций содержится в 1 см³: а) отожжённого металла с плотностью дислокаций $\rho = 10^6$ см⁻²; б) холоднодеформированного металла с $\rho = 10^{10}$ см⁻²? Найдите объёмную долю ядер дислокаций в обоих случаях (принимая радиус ядра гядра $\sim 3b$).

9. В расчёте на 1 см³ металла сравните: а) энергию дислокаций при их максимально

возможной плотности $\sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$; б) энергию вакансий при их максимально возможной

16

равновесной концентрации (вблизи температуры плавления); в) энергию межатомной связи

(энергию сублимации) $\epsilon_{\text{субл}}$. Расчёт сделайте для: 1) серебра ($\epsilon_{\text{субл}} = 2,60 \text{ эВ/атом}$); 2) α -железа ($\epsilon_{\text{субл}} = 3,63 \text{ эВ/атом}$).

10. Найдите напряжение, необходимое для прохождения полной краевой дислокации

над параллельной ей закреплённой дислокацией, если расстояние между их плоскостями

скольжения составляет $10b$; $25b$; $100b$. Расчёт сделайте для 1) α -железа; 2) серебра.

11. Какое напряжение надо приложить к паре полных краевых дислокаций одного

знака, скользящих в одной плоскости, чтобы сблизить их до расстояния $10b$; $25b$; $100b$?

Расчёт сделайте для: 1) α -железа; 2) серебра.

12. Запишите все возможные типы реакций между двумя дислокациями $1/2a$ в ГЦКрешётке и отберите из них энергетически выгодные.

13. Запишите все возможные типы реакций между двумя дислокациями $1/2a$ в ОЦКрешётке и отберите из них энергетически выгодные.

14. Монокристалл серебра выращивают из расплава. Оцените плотность возникающих в ходе кристаллизации дислокаций, если перепад температуры вблизи границы раздела жидкости и твёрдой фазы составляет 10 К/мм . Коэффициент линейного расширения серебра при температуре плавления равен $28 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$

Критерии оценки (в баллах)

Приведено полное правильное решение, включающее правильный ответ и исчерпывающие верные рассуждения с прямым указанием наблюдаемых явлений и законов

1 балл

Дан правильный ответ, и приведено объяснение, но в решении имеются один или несколько недостатков

0,5 баллов

Нет правильного ответа 0 баллов

Письменная контрольная работа

1. Найти плотность кристаллов NaCl и CsCl (см. рис.1)

Рис.1

2. Зная постоянную a , вычислить межплоскостные расстояния d_{100} , d_{110} , d_{111} и их отношение для:

а) простой, б) объемноцентрированной, в) гранецентрированной кубических решеток

3. Найти постоянную решетку AgBr (тип решетки NaCl), если известно что $K\alpha$ - линия ванадия отражается в первом порядке от системы плоскостей

17

(100) под углом скольжения $\vartheta = 25.9^\circ$.

4. Вычислить длину волны рентгеновского излучения, которое отражается во втором порядке от системы плоскостей (100) кристалла NaCl (см.рис.1) под углом скольжения $\vartheta = 25.0^\circ$. Найти также угол, под которым это излучение отражается в максимальном порядке от данной системы плоскостей.

5. Монокристалл NaCl (см.рис.1) снимают по методу Лауэ вдоль оси четвертого порядка (ось z) на фотопластинку, отстоящую от кристалла на $L=50$ мм. Найти для максимумов, соответствующих отражениям от плоскостей (031) и (221):

- а) их расстояние до центра лауэграммы
- б) длины волн рентгеновского излучения

6. Узкий пучок электронов с энергией 25кэВ проходит через тонкую поликристаллическую пленку и образует на плоском экране на расстоянии $L=20,0$ см от пленки систему дифракционных колец. Диаметр первого кольца $D=13,1$ мм. Вычислить постоянную решетки. Известно, что она кубическая объемноцентрированная.

Заключение работодателя на ФОС (ОМ)