

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:  
Декан физического факультета  
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

**Спектроскопия твердого тела**

по направлению подготовки

**03.04.02 Физика**

Направленность (профиль) подготовки:  
**«Фундаментальная и прикладная физика»**

Форма обучения  
**Очная**

Квалификация  
**Магистр**

Год приема  
**2023**

СОГЛАСОВАНО:  
Руководитель ОП  
О.Н. Чайковская

Председатель УМК  
О.М. Сюсина

Томск – 2023

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1 – Способен 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.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

– ИПК-1.1. Знает основные стратегии исследований в выбранной области физики, критерии эффективности, ограничения применимости.

– ИПК 1.2. Умеет выделять и систематизировать основные цели исследований в выбранной области физики, извлекать информацию из различных источников, включая периодическую печать и электронные коммуникации, представлять её в понятном виде и эффективно использовать.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Освоить математический аппарат теории функционала электронной плотности, разработанный в зонной теории твердых тел.

– Изучить основные методы расчета электронной структуры кристаллических твердых тел, освоить применение этих методов для квантовохимических расчетов молекул, кластеров и наночастиц.

## **3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, входит в профессиональный модуль по выбору «Физика атомов и молекул».

## **4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине**

Семестр 2, зачет

## **5. Входные требования для освоения дисциплины**

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

## **6. Язык реализации**

Русский

## **7. Объем дисциплины (модуля)**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часа, из которых:

– лекции: 12 ч..

В том числе практическая подготовка: 6 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

## 8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Введение.

Твердое тело как система многих частиц. Ближний и дальний порядок в твердых телах. Наличие дальнего порядка отличает кристаллы от других видов твердых тел.

Тема 2. Дефекты кристаллической решётки.

Тема 3. Наноструктуры.

Тема 4. Методы теоретического описания свойств твердых тел.

Тема 5. Типы связи структурных элементов кристаллической решётки.

Ван-дер-Ваальсова связь. Дисперсионные силы. Ионная связь. Ковалентная связь. Металлическая связь. Водородная связь.

Тема 6. Трансляционная симметрия.

Простые и сложные кристаллические решётки. Элементарная ячейка. Базисные векторы кристаллической решетки. Ячейка Вигнера-Зейтца.

Тема 7. Основные типы кристаллических структур.

Структура NaCl (простая кубическая). Металлы – ОЦК, ГЦК, ГПУ решётки. Полупроводники – структура алмаза.

Тема 8. Прямая и обратная решетки.

Основные векторы обратной решетки.

Тема 9. Понятие группы симметрии.

Точечные группы. Группа трансляций. Сингонии. Решетки Бравэ. Кристаллические классы. Пространственные группы.

Тема 10. Квазикристаллы.

Аморфные твёрдые тела. Жидкие кристаллы. Жидкие кристаллы в биологии. Кристаллы гидроксипатита как основа костной ткани.

Тема 11. Метод функционала электронной плотности в квантовой теории.

Одноэлектронное приближение и метод Хартри-Фока. Градиентное разложение обменно-корреляционного потенциала.

Тема 12. Движение электрона в периодическом поле.

Теорема Блоха. Обратная решетка. Квазиимпульс электрона. Зоны Бриллюэна. Теорема Крамерса. Циклические граничные условия Борна-Кармана. Приближение слабо связанных электронов. Приближение сильно связанных электронов.

Тема 13. Теория энергетических зон и зонная структура кристаллов.

Закон дисперсии. Тензор эффективной массы. Зонная теория в объяснении свойств металлов, полупроводников, диэлектриков. Электроны и дырки. Локализованные состояния электрона в кристалле. Функции Ванье. Доноры, акцепторы в полупроводниках. Экситоны Френкеля и экситоны Ванье-Мотта.

Тема 14. Общая характеристика методов расчета зонной структуры кристаллов.

Маффин-Тин потенциал. Метод присоединённых плоских волн. Метод функции Грина.

Метод ортогонализированных плоских волн. Метод псевдопотенциала.

Тема 15. Макроскопическая теория поглощения света.

Соотношения Крамерса-Кронига. Межзонное поглощение. Прямые и непрямые переходы.

## 9. Текущий контроль о дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты выполнения заданий по материалам курса, и фиксируется в баллах. Контрольная точка проводится не менее одного раза в семестр. Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>

## 10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачёт во втором семестре проводится в письменной форме по вопросам. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

## 11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=24586>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

*Методические рекомендации студентам по самостоятельной работе.*

Вопросы, вынесенные на самостоятельное изучение.

1. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.
2. Кулоновский и обменный потенциалы в уравнениях Хартри-Фока.
3. Локальные аппроксимации обменного потенциала.
4. Обменный потенциал  $X\alpha$  Слэтера.
5. Обменный потенциал Гашпара-Кона-Шэма.
6. Обменно-корреляционный потенциал Гуннарсона-Лундквиста.
7. Обобщенное градиентное приближение для обменно-корреляционного потенциала.
8. Мета-градиентное приближение для обменно-корреляционного потенциала.
- 9.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

### Основная литература

1. Дж. Займан. Вычисление блоховских функций..М., Мир, ,1973, –160 С.
2. У Харрисон. Теория твёрдого тела. – М. Мир, 1972, –616 С.
3. В. М, Бонч-Бруевич, С. П. Калашников. Физика полупроводников.– М., Наука, 1977,672 С.
4. А. С. Давыдов. Теория твёрдого тела – М., Наука, 1976, – 640 С.
5. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. – М.: Мир, 1978. – 662 С.

### Дополнительная литература

1. И. Б. Берсукер Электронная структура и свойства координационных соединений. – Л., Химия, 1976, – 352 С.
2. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. – М.: Мир, 1978. – 662 С.
3. А. В. Нявро. Эволюция электронных состояний: атом-молекула-кластер-кристалл. – Томск, Издательский Дом Томского Государственного Университета, 2013. – 268 С.

#### **Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет:**

1. Электронный каталог НБ ТГУ (<http://chamo.lib.tsu.ru>)
2. Библиографическая база данных SCOPUS (<http://www.scopus.com/>)
3. Библиографическая база данных ISI Web of Knowledge (<http://www.isiknowledge.com/>)
4. Поисковая система Google Scholar (<https://scholar.google.ru/>)
5. Электронные версии специализированных научных журналов

### **13. Перечень информационных технологий**

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
  - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
- б) информационные справочные системы:
- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
  - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
  - ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
  - ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
  - Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
  - ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
  - ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

### **14. Материально-техническое обеспечение**

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате, оснащенные системой («Актру»).

### **15. Информация о разработчиках**

Нявро Александр Владиславович, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедры оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ.