

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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Оценочные материалы по дисциплине

Спектроскопия твердого тела

по направлению подготовки

03.04.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
О.Н. Чайковская

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

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. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

- посещаемость;
- активная работа на лекции;
- рефераты.

Темы рефератов:

1. Наноструктурные материалы, методы получения и их свойства..
2. Уравнения Хартри-Фока и объяснение явлений магнетизма на их основе.
3. Метод функционала электронной плотности для исследования электронных состояний молекул, кластеров и кристаллов.
4. Метод рассеянных волн для расчета электронных состояний нанокластеров и кристаллов.

Критерии оценивания:

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты участия в работе на семинаре, и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом):

- посещаемость, максимальный балл 10,
- выступление и работа на лекциях, максимальный балл 3 балла на одной лекции.
- реферат по одной из тем, 40 баллов.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Зачет во 2 семестре проводится в устной форме по экзаменационным билетам.

Билет содержит два теоретических вопроса, проверяющие компетенции ПК 1 в соответствии с индикаторами достижения компетенций ИПК 1.1, ИПК 1.2. После ответа на билет студент отвечает на уточняющие и дополнительные вопросы из открытого перечня вопросов экзаменационных билетов.

В курсе «Спектроскопия твердого тела» используется балльно-рейтинговая система оценки знаний. Максимальная сумма баллов по дисциплине составляет 60 баллов и формируется следующим образом: 40 баллов по результатам текущей аттестации и 20 баллов по результатам промежуточной аттестации (зачет). Итоговая оценка по дисциплине складывается из суммы баллов, полученной по итогам текущего контроля и промежуточной аттестации (устного зачета).

Экзаменационный билет включает 2 вопроса из списка контрольных вопросов по курсу, проверяющих сформированность компетенции ПК-1 в соответствии с индикаторами освоения компетенции ИПК-1.1 и ИПК-1.2. Ответы даются в развернутой форме.

Пример билета:

БИЛЕТ № 1

Вопрос 1. Квазикристаллы, их особенности и свойства.

Вопрос 2. Обобщенный градиентный потенциал.

Дополнительные и/или уточняющие вопросы по основным темам и содержанию курса (части 1-3), позволяющие оценить уровень освоения всей программы. Ответ на уровне формулировки основных определений и/или краткого изложения физики явления и соответствующих представлений.

Контрольные вопросы

Часть 1.

1. Какие свойства твердых тел свидетельствуют о наличии дальнего порядка.
2. Что такое квазичастица. Примеры квазичастиц.
3. Какие типы химической связи преобладают у различных кристаллических структур.
4. Почему углерод обладает уникальным свойством - образует большое число соединений и во всех соединениях, где присутствует, играет особую роль.
5. Дефекты кристаллической решетки.
6. Наноструктуры.
7. Трансляционная симметрия. Ячейка Вигнера-Зейтца.
8. Основные типы кристаллических структур.
9. Прямая и обратная решетки. Основные векторы обратной решетки.
10. Понятие группы симметрии. Точечные группы. Группа трансляций.
11. Сингонии.
12. Решетки Бравэ.
13. Кристаллические классы.
14. Пространственные группы.
15. Квазикристаллы
16. Аморфные твердые тела
17. Жидкие кристаллы.
18. Кристаллы гидроксиапатита как основа костной ткани.

Часть 2. Одноэлектронное приближение и метод функционала электронной плотности.

1. Как устраняется нелокальность обменного потенциала.
2. Физический смысл обменной (фермиевской) дырки в электронной плотности.
3. Условие нормирования обменных плотностей для разных проекций спина.
4. На чем основываются уточнения обменно-корреляционных потенциалов в методе обобщенного градиентного приближения.
5. Какие условия позволяют разделить вклад обмена и корреляции в потенциал ОГП.
6. Рассчитывать вклад в корреляционный потенциал можно как аналитически, так и с помощью программ символьных вычислений – МАТЛАБ, MAPLE.
7. Почему мета-градиентное приближение (МГП) в действительности может не приводить к улучшению результатов?

Часть 3.

1. Сформулировать теорему Блоха.
2. Как строятся зоны Бриллюэна.
3. Для чего нужны условия Борна-Кармана.
4. Почему можно рассматривать волновой вектор (квазиимпульс электрона) только в пределах первой зоны Бриллюэна.
5. Как приближение слабо связанных электронов объясняет появление запрещенной зоны в спектре электрона в кристалле.
6. Каков физический смысл появления области запрещённых энергий в спектре.
7. Что такое тензор эффективной массы электрона в кристалле.
8. Виды экситонов и какую роль они играют в полупроводниках и диэлектриках.
9. В чем смысл введения МТ (маффин-тин) приближения для потенциала электронов в кристаллах.
10. Основные методы исследования электронной структуры кристаллов:
 - а) метод присоединенных плоских волн - ППВ;
 - б) метод Корринги-Кона-Ростокера - ККР;
 - в) метод ортогонализированных плоских волн - ОПВ;
 - г) метод псевдопотенциала.
11. Соотношения Крамерса-Кронига.
12. Прямые и непрямые переходы между валентной зоной и зоной проводимости..
13. Коэффициенты поглощения.

Литература

1. К. Дей, Д. Селбин. Теоретическая неорганическая химия. М: Химия. – 1976. – 568 С.
2. Википедия.
3. Elliott J.C. Structure and Chemistry of the Apatites and Other Calcium Orthophosphates / Studies in Inorganic Chemistry 18. – Amsterdam: Elsevier, 1994. – 389 P.
4. Wopenka B., Pasteris J.D. A mineralogical perspective on the apatite in bone // Material science and engineering.– 2005.– V. C 25. – P. 131-143.
5. Брик А.Б., Данильченко С.Н., Радчук В.В. и др. Термоактивируемые изменения свойств биогенных и синтетических карбонатсодержащих апатитов по данным рентгеновской дифракции и ЭПР // Минералогический журнал. –2007. – Т.29, № 2. – С. 32-47.
6. Frondel C., Marvin U.B. // Lonsdaleite, a new hexagonal polymorph of diamond. Nature . – 1967. – V. 214. – P. 587 – 589.
7. Z. Pan, H. Sun, Y. Zhang, and C. Chen. // Harder than Diamond: Superior Indentation Strength of Wurtzite BN and Lonsdaleite. Phys. Rev. Lett. – 2009. – V. 102. – 055503.
8. Q. Li, Y.Ma, A. R. Oganov, H. Wang, H. Wang, Y. Xu, T. Cui, Ho-K. Mao, and G. Zou// Superhard Monoclinic Polymorph of Carbon. – 2009. – Phys. Rev. Lett. –V. 102. – 175506.
9. E. Osawa. Kagaku (Kyoto) (in Japanese). – 1970. V. 25. – P. 854 – 863.
10. E. Osawa.// The original conjecture of a stable C60 molecule. – 1971. –Chem. Abstr. – V.74. –75698v.

11. Kroto H. W., Heath J. R., O'Brien S. C., Curl R. F., Smalley R. E. // *C₆₀: Buckminsterfullerene*. – 1985. – Nature. – V. 318. P. 162.
12. Hebard A.F., Rosseinsky M.J., Haddon R.C. et al.// *Conducting films of C₆₀ and C₇₀ by alkali-metal doping* – 1991. – Nature. – V. 350. P. 320-322.
13. Allemand P.M., Khemani K.C., Koch A. et al. // Organic molecular soft ferromagnetism in a fullerene C₆₀. – 1991. – Science. – V. 253. – P. 301-303.
14. А. В. Елецкий.// Углеродные нанотрубки. – 1997. – УФН. – Т. 167. – № 9. – С. 954.
15. А. В. Елецкий.// Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства. – 2002. –УФН. – Т. 172, № 4. – С. 401.
16. S. Iijima.// *Helical microtubules of graphitic carbon*. – 1991. – Nature. – V. 354. – P. 56-58.
17. A. Oberlin, M. Endo, and T. Koyama.// *High resolution electron microscope observations of graphitized carbon fibers*. – 1976. – Carbon. – V. –14, № 2. – P. 133-135.
18. Буянов Р. А., Чесноков В. В., Афанасьев А. Д., Бабенко В. С. // Карбидный механизм образования углеродистых отложений и их свойства на железохромовых катализаторах дегидрирования. – 1977. – Кинетика и катализ. – Т. 18. – С. 1021.
19. J.O.E. Gibson.// *Early nanotubes?* – 1992. – Nature. – V. 359. – P. 369.
20. Л. В. Радущкевич и В. М. Лукьянович.// О структуре углерода, образующегося при термическом разложении окиси углерода на железном контакте. – 1952. – Журнал физической химии. – Т. 26, №1. – С. 88-95.
21. D. E. H. Jones (Daedalus) // *Carbon nanotube*. – 1986. – New Scientist. – V.110. P. 80 – 88.
22. З. Я. Косаковская, Л. А. Чернозатонский, Е. А. Фёдоров // Нановолоконная углеродная структура. – 1992. – Письма в ЖЭТФ. – Т. 56. – С.26-28.
23. М. Ю. Корнилов // Нужен трубчатый углерод. – 1985. – Химия и жизнь. – №8. С. 55-59.
24. Крестинин А. В. Однослойные углеродные нанотрубки: механизм образования и перспективы технологии производства на основе электродугового процесса // Рос. хим. ж. – 2004. – Т. 48, № 5. – С. 21 – 27.
25. Chen Zh. et. al.// *Graphene Nano-Ribbon Electronics*. – 2007. – Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. – V. 40/2. P. 228-232.
26. Novoselov K. S. et al. // *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*. – Science. – 2004. – V. 306. P. 666-669.
27. *Novoselov K. S. et al.// Two-dimensional atomic crystals*. – 2005. – *PNAS*. – V.102. – P.10451.
28. Rollings E. et. al. // *Synthesis and characterization of atomically thin graphite films on a silicon carbide substrate*. – 2006. – J. Phys. Chem. Solids. – V. 67, № 9. – P. 2172-2177.
29. Hass J. et. al. // *Highly ordered graphene for two dimensional electronics*. – 2006. – Appl. Phys. Lett. V. 89. – P. 143106.
30. Novoselov K. S. et al. // *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme*. – 2005. – Nature. –V. 438. P. 197-200.
31. Wallace P. R. // *The Band Theory of Graphite*. – 1947. – Phys. Rev. – V. 71. P. 622-634.
32. Zhang Y. et al. // *Fabrication and electric-field-dependent transport measurements of mesoscopic graphite devices*. – 2005. – Appl. Phys. Lett. – V. 86. – P. 073104.
33. Zhang Y. et. al. // *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in grapheme*. – 2005. – Nature. – V. 438. – P. 201-204.

34. S. Niyogi, E. Bekyarova, M. E. Itkis, J. L. McWilliams, M. A. Hamon, and R. C. Haddon. // Solution Properties of Graphite and Graphene. –2006. – J. Am. Chem. Soc. – V.128, № 24. – P. 7720-7721.
35. Sidorov A. N. *et al.* // Electrostatic deposition of grapheme. – 2007. –Nanotechnology. V. 18. – P. 135301.
36. Schedin F. *et. al.* // Detection of Individual Gas Molecules Absorbed on Graphene. – 2007. – Nature Materials. – V. 6. – P. 652-655.
37. Hwang E. H. *et. al.* // Transport in chemically doped graphene in the presence of adsorbed molecules. – 2007. – Phys. Rev. B **76**. P. 195421.
38. Wehling T. O. *et. al.* // Molecular Doping of Graphene. – 2008. – Nano Lett. – V. 8. – P. 173-177.
39. S.R.C.Vivekchand, C. S. Rout, K.S.Subrahmanyam, A.Govindaraj and C.N.R.Rao. // Graphene-based electrochemical supercapacitors. – 2008. – J. Chem. Sci., Indian Academy of Sciences. – V.120, № 1. P. 9-13.
40. В.С.Урусов, Н.Н.Еремин. Кристаллохимия. Часть 1. М: Изд-во МГУ. 2004. – 87 С.
41. Г. А. Розман. Строение и свойства вещества. Учебное пособие. Псков: Изд-во ПГПУ. 2001. – 292 С.
42. <http://fn.bmstu.ru/data-physics/library/physbook/tom6/front.html>
43. Гатчин Ю.А., Ткалич В.Л., Камаев П.А., Симаков Д.Д., Хмелёв Е.Д. Материалы электронных средств. Учебное пособие. СПб:СПбГУ ИТМО. – 2010. – 112 С.
44. Конвей Дж., Смит Д. О кватернионах и октавах, об их геометрии, арифметике и симметриях. М.: МЦНМО, 2009. 184 С.
45. Ю. К. Егоров-Тисменко, Г. П. Литвинская, Ю. Г. Загальская, Кристаллография, М.: МГУ, 1992 288 С
46. Ю. К. Егоров-Тисменко, Г. П. Литвинская, Теория симметрии кристаллов, М.: ГЕОС, 2000 394 С.
47. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn. Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry // Physical Review Letters. — 1984. — Vol. 53. — P. 1951-1953.
48. L.I.Kveglis, R.B.Abylkalykova, F.M.Noskov, V.G.Arhipkin, V.A.Musikhin, V.N.Cherepanov, A.V.Niavro Local electron structure and magnetization in beta-Fe₈₆Mn₁₃C // Elsevier Superlattices and Microstructures – 2009. – V.46. – P.116-120.
49. Ю.Х. Векилов, М. А. Черников. Квазикристаллы. – 2010. – УФН. – Т. 180, № 6. – С. 561 – 586.
50. Воронов С. А., Переверзева Л. П., Поплавко Ю. М. Физическое материаловедение. Ч. 1. Перспективные направления материаловедения: Киев: Изд-во Национального Технического Университета Украины. – 2004. – 196 С.
51. Steurer W., Sutter-Widmer D. J. Phys. D 40 R229 (2007)
52. Kaputkina N. E. *et al.* Philos. Mag. 88 2253 (2008)
53. С.Н. Данильченко. Вісник СумГУ. Структура и свойства апатитов кальция с точки зрения биоминералогии и биоматериаловедения. Серия Фізика, математика, механіка. 2007, №2, 33-59.
54. Baig A.A., Fox J.L., Young R.A. *et al.* Relationships Among Carbonated Apatite Solubility, Crystallite Size, and Microstrain Parameters // Calcif Tissue Int.- 1999.- V. 64.-P. 437- 449.
55. Ньюмен У., Ньюмен М. Минеральный обмен кости / М.: Иностранная литература. – 1961. – 270 С.

56. Landis W.J. The strength of a calcified tissue depends in part on the molecular structure and organization of its constituent mineral crystals in their organic matrix // *Bone*.-1995.- V.16.- P. 533-544.
57. Glimcher M.J. Bone: Nature of the Calcium Phosphate Crystals and Cellular, Structural, and Physical Chemical Mechanisms in Their Formation // *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*. - Mineralogical Society of America, 2006. -V.64. - P. 223–282.
58. Каназава Т. Неорганические фосфатные материалы / К.: Наукова думка, 1998. – 297 С.
59. Hughes J.M. and Rakovan J. The Crystal Structure of Apatite, $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{OH}, \text{Cl})$. In Kohn M.J., Rakovan J., Hughes J.M. (eds) *Phosphates: geochemical, geobiological and materials importance*. Series: *Reviews in mineralogy and geochemistry*, volume 48. - Mineralogical Society of America, Washington, DC, 2002.- P. 1–12.
60. Morgan H., Wilson R.M., Elliott J.C. et al. Preparation and characterization of monoclinic hydroxyapatite and its precipitated carbonate apatite intermediate // *Biomaterials*.- 2000.-V. 21.- P. 617–627.
61. Ivanova T.I., Frank-Kamenetskaya O.V., Kol'tsov A.B. et al. Crystal Structure of Calcium-Deficient Carbonated Hydroxyapatite. Thermal decomposition // *J. Solid State Chem*.- 2001.- V. 160.- P. 340-349.
62. Betts F., Blumenthal N.C., Posner A.S. Bone mineralization // *J. Crystal Growth*.- 1981.- V. 53.- P. 63–73.
63. Gross K.A., Berndt C.C. Biomedical Application of Apatites. In Kohn M.J., Rakovan J., Hughes J.M. (eds) *Phosphates: geochemical, geobiological and materials importance*. Series: *Reviews in mineralogy and geochemistry*, volume 48. - Mineralogical Society of America, Washington, DC, 2002.- P. 631–672.
64. Elliott J.C. Calcium Phosphate Biominerals. In Kohn M.J., Rakovan J., Hughes J.M. (eds) *Phosphates: geochemical, geobiological and materials importance*. Series: *Reviews in mineralogy and geochemistry*, volume 48. - Mineralogical Society of America, Washington, DC, 2002.- P. 427 – 454.
65. А. В. Нявро. Эволюция электронных состояний: атом – молекула – кластер – кристалл. Томск: Издательский Дом Томского Государственного Университета. – 2013. – 268 С.
66. Slater J. C. A simplification of the Hartree-Fock method // *Phys. Rev.* – 1951. – V. 81, N 3. – P. 385 – 391.
67. Rennert P. A survey on exchange potentials in atoms and solids // *Acta Phys. Hung.* – 1974. – V. 37, N 3. – P. 219 – 252.
68. Pedersen T. B. Exchange-correlation functional – a study towards improving the precision of electron density calculations // Master Thesis. – 2000. – <http://dcwww.fys.dtu.dk/wwwdirectory/masterthesis/masterdirectory/project/project.html>.
69. Bardeen C. J., Schaefer H. F. III. Quantum chemistry in the 21st century// *Pure Appl. Chem*. – 2000. – V. 72, N. 8. – P. 1405 – 1423.
70. Van Voorhis T., Scuseria G. E. A novel form for the exchange-correlation energy functional // *J. Chem. Phys.* – 1998. – V. 109, N 2. – P. 400 – 410.
71. Becke A. D. Hartree-Fock exchange energy on inhomogeneous electron gas // *Int. J. Quant. Chem.* – 2004. – V. 23, N 6. – P. 1915 – 1922.

72. Kurth S., Perdew J. P., Blaha P. Molecular and solid-state tests of density functional approximations // Int. J. Quant. Chem. – 1999. – V. 75, N 4–5. – P. 889 – 909.
73. Tao J. and Perdew J. P. Nonempirical Construction of Current-Density Functionals from Conventional Density-Functional Approximations // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V. 95, N 19. – P. 196403 – 4.
74. Tao J., Perdew J. P., Almeida L. M., Fiolhais C., Kümmel S. Nonempirical density functionals investigated for jellium: spin-polarized surfaces, spherical clusters, and bulk linear response // Phys. Rev. B – 2008. – V. 77, N 24. – P. 245107 – 14.
75. Constantin L. A., Perdew J. P., Pitarke J. M. Exchange-correlation hole of a generalized gradient approximation for solids and surfaces// Phys. Rev. B. – 2009. – V. 79, N 7. – P. 075126–7.
76. Нявро А. В., Черепанов В. Н., Масягина А. С. Информационная система по физическим характеристикам атомов. Электронное учебное пособие. – Томск: ТГУ. – 2006. – [Электронный продукт]. – http://ido.tsu.ru/iop_res/atom.
77. Cho S. J. Spin-polarized electronic energy-band structure in EuS // Phys. Rev. – 1967. – V. 157, N 3. – P. 622 – 640.
78. Cho S. J. Spin-polarized energy bands in Eu chalcogenides by the augmented-plane-wave method // Phys. Rev. B – 1970. – V. 1, N 12. – P. 4589 – 4603.
79. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. – М.: Мир, 1978. – 662 С.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Теоретические вопросы.

1. Почему нелокальность обменного потенциала приводит к большим трудностям в квантово-химических расчётах.
Ответ: 90 процентов расчетного времени тратится на обменный потенциал.
2. Каким образом уравнения Хартри-Фока позволяют описать эффекты магнетизма.
Ответ: Использование неограниченного приближения (метод НХФ).
3. Как Д. Слэтеру удалось устранить нелокальность обменного потенциала.
Ответ: Усреднение по всем состояниям, введение локальной плотности электронов, использование приближения газа свободных электронов для атомов.
4. Как формулируется теорема Ноемберга и Кона.
5. Что лежит в основе обобщенного градиентного приближения.
6. Как рассчитываются корреляционные поправки в потенциал в методе функционала электронной плотности.
7. Какие методы исследования электронной структуры кристаллов эффективно применяются в квантовохимических расчетах.

Информация о разработчиках.

Нявро Александр Владиславович, канд. ф.-м. наук, доцент;

Черепанов Виктор Николаевич, профессор, зав кафедрой оптики и спектроскопии.