

Документ подписан электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 22.07.2024 16:05:29
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Б.Б.Педько



«21»

мая

2024 г.

Рабочая программа дисциплины

**Экспериментальные и расчетные методы в физике
конденсированного состояния**

Закреплена за кафедрой: **Общей физики**

Направление подготовки: **03.03.02 Физика**

Направленность (профиль): **Медицинская физика**

Квалификация: **Бакалавр**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **5**

Программу составил(и):

д-р физ.-мат. наук, проф., Самсонов В.М.

Тверь, 2024

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Овладение основами и современным состоянием физики конденсированного состояния (ФКС) вещества. ФКС бурно развивается в последние годы и актуальна как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Эта область науки открывает широкие возможности для применения компьютерных методов, в том числе методов компьютерного моделирования. Наиболее разработанным разделом ФКС является физика твердого тела. Физика жидкого состояния, а также экспериментальные методы, используемые в ФКС, остаются вне поля зрения. Данный спецкурс восполняет в той или иной степени указанный пробел.

Задачи:

1. знакомство студентов с современными экспериментальными методами, включая рентгеноструктурный анализ и атомно-силовую микроскопию,
2. комплексное изучение основ физики твердого тела и физики жидкого состояния.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В.ДВ.01Б1.В

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Математический анализ
Аналитическая геометрия и линейная алгебра
Векторный и тензорный анализ
Механика
Молекулярная физика
Электричество и магнетизм
Оптика
Физическая кристаллография

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Физика конденсированного состояния, особенно физика твердого тела, очень тесно связана с целым рядом технических приложений. Можно даже сказать, что наша цивилизация является твердотельной, хотя в перспективе возможно изменение акцента в сторону физики жидкого состояния и наносистем. Соответственно, студентам, обучающимся по данной специальности, необходимо владеть основными понятиями ФКС и знать основные методы изучения структурных и иных характеристик конденсированных тел.

Поскольку данный предмет изучается на 3 курсе, он ориентирован на первоначальное знакомство с современными экспериментальными методами ФКС. Соответственно, данный курс не предполагает, что студенты самостоятельно проводят соответствующие экспериментальные исследования. Знакомство с экспериментальными установками осуществляется в основном в виде экскурсий в лаборатории физико-технического и химического факультетов. В задачу практикума входит изучение основ методов и обработка результатов спектроскопических и иных экспериментов.

Физика нано- и гетероструктур
Технологическая практика
Физика полупроводников и диэлектриков
Физика кристаллов
Аэро- и гидродинамика

Научно-исследовательская работа

Преддипломная практика

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	3 ЗЕТ
Часов по учебному плану	108
в том числе:	
аудиторные занятия	68
самостоятельная работа	40

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ПК-3.1: Осуществляет анализ данных с применением математических методов и информационных технологий

УК-1.1: Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
зачеты	5

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. 1. Понятие о конденсированном состоянии вещества, особенности твердого и жидкого состояний. Агрегатные состояния вещества. Классификация конденсированных тел по типу химической связи. Особенности движения частиц в кристаллах и жидкостях. Понятие о ближнем и дальнем порядке. Раздельная функция распределения как количественная мера ближнего порядка в жидкостях					
1.1	1. Понятие о конденсированном состоянии вещества, особенности твердого и жидкого состояний	Лек	5	2	Л1.2 Л1.1 Л1.3Л2.1	
1.2	1. Понятие о конденсированном состоянии вещества, особенности твердого и жидкого состояний	Ср	5	4		

	Раздел 2. 2. Основы кристаллографии. Набор операций симметрии. Прimitives ячейки. Основные типы кристаллографических решеток. Положение и ориентация плоскостей в кристаллах. Простые кристаллические структуры. Реальные кристаллические структуры.					
2.1	2. Основы кристаллографии	Лек	5	4		
2.2	2. Основы кристаллографии	Лаб	5	4		
2.3	2. Основы кристаллографии	Ср	5	5		
	Раздел 3. 3. Типы связей в кристаллах. Кристаллы инертных газов. Силы Ван дер Ваальса. Ионные кристаллы. Вычисления постоянной Маделунга. Объемный модуль упругости. Ковалентные кристаллы. Металлические кристаллы. Атомные радиусы.					
3.1	3. Типы связей в кристаллах	Лек	5	4		
3.2	3. Типы связей в кристаллах	Лаб	5	4		
3.3	3. Типы связей в кристаллах	Ср	5	5		
	Раздел 4. 4. Фононы и колебания решетки. Квантовый характер колебаний решетки. Неупругое рассеяние фотонов на акустических фононах. Локальные фононные колебания					
4.1	4. Фононы и колебания решетки.	Лек	5	4		
4.2	4. Фононы и колебания решетки.	Лаб	5	6		
4.3	4. Фононы и колебания решетки.	Ср	5	4		

	Раздел 5. 5. Рассеяние рентгеновского излучения, электронов и нейтронов в жидкостях и твердых телах. Рассеяние рентгеновских лучей свободным электроном и свободным атомом. Рассеяние электронов свободным атомом. Рассеяние медленных нейтронов на свободном ядре. Параметры, определения по кривым интенсивности. Определение парной корреляционной функции. Определение функций распределения электронной плотности для молекулярных жидкостей и аморфных тел					
5.1	5. Рассеяние рентгеновского излучения, электронов и нейтронов в жидкостях и твердых телах.	Лек	5	4		
5.2	5. Рассеяние рентгеновского излучения, электронов и нейтронов в жидкостях и твердых телах.	Лаб	5	6		
5.3	5. Рассеяние рентгеновского излучения, электронов и нейтронов в жидкостях и твердых телах.	Ср	5	5		
	Раздел 6. 6. Исследование структуры жидкостей. Методы дифракции рентгеновских лучей. Общие уравнения дифракции. Аппаратура. Монохроматизация. Системы детектирования. Анализ данных, некоторые экспериментальные результаты.					
6.1	6. Исследование структуры жидкостей.	Лек	5	4		
6.2	6. Исследование структуры жидкостей.	Лаб	5	6		
6.3	6. Исследование структуры жидкостей.	Ср	5	4		
	Раздел 7. 7. Метод рассеяния нейтронов. Теория Ван Хофа. Временные корреляционные функции. Традиционные эксперименты. Исследование структуры металлов.					
7.1	7. Метод рассеяния нейтронов	Лек	5	4		

7.2	7. Метод рассеяния нейтронов	Лаб	5	4		
7.3	7. Метод рассеяния нейтронов	Ср	5	4		
	Раздел 8. 8. Электронография конденсированного вещества. Методологические особенности электронографии. Информация, получаемая из кривой интенсивности. Строение жидких металлов. Электронография поверхностных слоев.					
8.1	8. Электронография конденсированного вещества.	Лек	5	4		
8.2	8. Электронография конденсированного вещества.	Лаб	5	2		
8.3	8. Электронография конденсированного вещества.	Ср	5	4		
	Раздел 9. 9. Другие экспериментальные методы. Изучение конденсированных тел методом рассеяния света. Ультразвуковые методы. Ядерный магнитный резонанс. Электронный парамагнитный резонанс. Инфракрасная спектроскопия. Электронный микроскоп. Атомная силовая микроскопия. Туннельная микроскопия					
9.1	9. Другие экспериментальные методы.	Лек	5	4		
9.2	9. Другие экспериментальные методы.	Лаб	5	2		
9.3	9. Другие экспериментальные методы.	Ср	5	5		

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Задание:

Подготовить и представить презентацию по одному из экспериментальных методов исследования конденсированных систем.

Способ аттестации: устный

Критерии оценки:

Высокий уровень (3 балла) - Презентация подготовлена на высоком уровне, ее представление также заслуживает высокой оценки.

Средний уровень (2 балла) - Презентация подготовлена на высоком уровне, но ее представление не заслуживает высокой оценки

Низкий уровень (1 балл) - Имеется ряд замечаний как по самой презентации, так и по ее представлению.

Задание:

Используя справочную литературу, составить таблицу теплоёмкости простых веществ и сделать мотивированное заключение о степени выполнения закона Дюлонга и Пти.

Способ аттестации: письменный

Критерии оценки:

- Задание выполнено аккуратно, проанализирована степень выполнимости закона Дюлонга и Пти – 3 балла

- Задание выполнено формально, отсутствует анализ выбранных табличных данных - 2 балла

- Задание выполнено формально и не вполне аккуратно – 1 балл

1. Текущий контроль успеваемости

Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:

1. Особенности структуры и движения атомов в жидкостях.

2. Радиальная функция распределения.

3. Разновидности решеточных теорий жидкости.

4. Природа межмолекулярных сил отталкивания.

5. Чем объясняется тепловое расширение кристаллов?

6. В чем заключаются основные отличия квантовой теории теплоемкости Дебая от теории Эйнштейна?

7. Закон Дюлонга и Пти.

Задачи для проверки умений при освоении дисциплины

Задание 1. Определение вращательной постоянной, момента инерции и межъядерного расстояния для двухатомных молекул

1. Познакомиться с основными положениями теории вращательных спектров на основе модели жесткого ротатора

2. На основе изученной теории вывести расчетные формулы для получения характеристических постоянных для изучаемого вещества.

3. Используя данные опыта по измерению волновых чисел для конкретного вещества, состоящего из двухатомных молекул, рассчитать вращательную постоянную, момент инерции и межъядерное расстояние.

4. Сравнить полученные результаты с имеющимися справочными данными, если таки существуют. Объяснить возможные расхождения.

Задание 2. Расчет частот первых линий во вращательном спектре поглощения двухатомной молекулы

1. Познакомиться с основными положениями теории вращательных спектров на основе модели жесткого ротатора.

2. На основе изученной теории вывести расчетные формулы для получения частот спектра по имеющимся характеристическим постоянным для изучаемого вещества.

3. По имеющимся характеристическим постоянным, для указанного преподавателем вещества, рассчитать частоты первых трех линий во вращательном спектре поглощения.

4. По полученным результатам сделать вывод о возможности применения той или иной области спектроскопии для изучения данной характеристики указанного вещества.

Задание 3. Изучение колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул

1. Познакомиться с основными положениями теории колебательно-вращательных спектров на основе модели не жесткого ротатора.

2. Вывести основные формулы для расчета термов колебательно вращательных состояний.

3. Определить частоту колебаний и силовую постоянную для двухатомной молекулы, указанного преподавателем вещества, по известной постоянной центробежного растяжения и вращательной постоянной.

4. Оценить полученный результат.

Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:

1. Классификация твердых тел по проводимости.
2. Основные положения зонной теории.
3. Собственная и примесная проводимости полупроводников. Понятие о дырке.
4. Основные материалы электронной техники: германий, кремний.
5. Полупроводниковые соединения.

Задачи для проверки умений при освоении дисциплины

Задание 1. Оценка изотопического эффекта в спектрах двухатомных молекул

1. Ознакомиться с теорией изотопов и влияние изотопозамещенных молекул на вращательный и колебательный спектр.

2. Найти массовое число изотопа, по известным из опыта первым линиям поглощения для указанного преподавателем вещества.

3. Найти смещение первой линии в спектре указанной преподавателем двухатомной молекулы при замещении одной из них более тяжелым изотопом.

4. Оценить влияние изотопического эффекта на молекулярные постоянные различных химических соединений.

Задание 2. Определение энергии диссоциации различными экспериментальными методами

1. Познакомится с различными методами оценки энергии диссоциации по экспериментальным данным.

2. Метод оценки по границе наблюдаемого электронно-колебательно-вращательного спектра.

3. Метод графической экстраполяции.

4. Оценить энергию диссоциации по имеющимся колебательным постоянным для указанного вещества.

5. Найти колебательное квантовое число, соответствующее энергии диссоциации молекулы вещества, определенной из опыта, которая ведет себя как гармонический осциллятор с известным коэффициентом жесткости.

Задание 3. Изучение принципиальной оптической схемы спектральных приборов

Основное назначение спектральных приборов – разложение электромагнитного излучения на его монохроматические составляющие. Спектральные приборы используются для качественного анализа спектрального состава излучения и выделения излучения данной длины волны.

1. Ознакомиться с основными положениями теории линейной оптики.

2. Изучить принципиальное влияние элементов оптической схемы спектральных приборов на электромагнитное излучение видимого диапазона.

3. По указанию преподавателя построить оптическую схему необходимую для получения определенного оптического преобразования.

Задание 4. Изучение основных характеристик спектральных приборов

1. Ознакомиться с основными положениями волновой теории.

2. Изучить характеристики спектральных приборов, с помощью которых их можно сравнивать и характеризовать. Спектральный диапазон. Дисперсия. Разрешающая способность. Светосила.

Задание 5. Рассмотрение основных типов спектральных приборов, их характеристик и применения

1. Изучить основные способы диспергирования света.

2. Сравнить возможности различных приборов: призмные спектральные приборы, дифракционные спектральные приборы, интерференционные спектральные приборы.

3. Рассмотреть основные классические и современные способы регистрации спектров полученных в спектральных приборах.

4. Определение качественного и количественного состава вещества по спектрам испускания, поглощения, отражения или рассеяния света. Изучение различных физико-химических свойств и строения веществ.

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

См. Приложение

8.3. Требования к рейтинг-контролю

Форма проведения экзамена: студенты, освоившие программу курса, могут получить оценку по итогам семестровой и полусеместровой рейтинговой аттестации согласно «Положению о рейтинговой системе обучения ТвГУ» (протокол №8 от 30 апреля 2020 г.).

Если условия «Положения о рейтинговой системе ...» не выполнены, то экзамен сдается согласно «Положению о промежуточной аттестации (экзаменах и зачетах) обучающихся по программам высшего образования ТвГУ» (протокол №11 от 28 апреля 2021 г.)

Модуль 1 - 40 баллов

Модуль 2 - 40 баллов + 20 баллов (зачет)

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Рекомендуемая литература

9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	Савельев И. В., Курс общей физики. В 3-х тт. Том 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц, Санкт-Петербург: Лань, 2023, ISBN: 978-5-507-47045-7, URL: https://e.lanbook.com/book/322505
Л1.2	Епифанов Г. И., Физика твердого тела, Санкт-Петербург: Лань, 2022, ISBN: 978-5-8114-1001-9, URL: https://e.lanbook.com/book/210671
Л1.3	Матухин В. Л., Ермаков В. Л., Физика твердого тела, Санкт-Петербург: Лань, 2022, ISBN: 978-5-8114-0923-5, URL: https://e.lanbook.com/book/210305

9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Владимиров Г. Г., Физика поверхности твердых тел, Санкт-Петербург: Лань, 2022, ISBN: 978-5-8114-1997-5, URL: https://e.lanbook.com/book/212228

9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	WinDjView
5	OpenOffice
6	Mozilla Firefox
7	Notepad++
8	Python
9	Origin 8.1 Sr2
10	Mathcad 15 M010
11	MATLAB R2012b

9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	ЭБС «ZNANIUM.COM»
2	ЭБС «ЮРАИТ»
3	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
4	ЭБС «Лань»
5	ЭБС ТвГУ

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-228	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, экран

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Для выполнения практических заданий студентам рекомендуется самостоятельно выбрать привычную для них среду разработки программ. В качестве таковых студенты могут использовать среду разработки Delphi или Builder. В этом случае для визуализации вычислений студенты могут использовать пакет математической графики Origin.

С целью экономии времени студентам рекомендуется использовать математические пакеты Maple и Mathcad. Благодаря мощной интеллектуальной среде программирования студенты могут полностью сосредоточиться на разработке и исследовании математических моделей, минуя этап написания вспомогательных подпрограмм по дифференцированию интегрированию и т.д. Для быстрой выработки необходимых навыков использования этих пакетов к данному методическому комплексу прилагаются электронные учебники по данным пакетам.

Перечень программного обеспечения, разработанного на факультете

Программа для молекулярно-динамического моделирования процесса эпитаксиального роста (разработана В.М. Самсоновым и М.Ю. Пушкарем);

Программа для молекулярно-динамического моделирования эволюции малых систем (разработанная В.М. Самсоновым и В.В. Дронниковым);

2. Промежуточная аттестация

Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:

1. Понятие о конденсированном состоянии вещества.
2. Особенности твердого и жидкого состояний. Агрегатные состояния вещества.
3. Классификация конденсированных тел по типу химической связи.
4. Особенности движения частиц в кристаллах и жидкостях. Понятие о ближнем и дальнем порядке.
5. Основы кристаллографии.
6. Типы связей в кристаллах.
7. Фононы и колебания решетки.

Задачи для проверки умений при освоении дисциплины

Задача 1. Показать, что для потенциала Леннарда Джонса $d = 1.12a$.

Задача 2. Показать, что из

$$U = \frac{1}{2} \sum \Phi(r_{ij}) = \frac{1}{2} N(4\varepsilon) \left[\sum_j \left(\frac{a}{p_j r_1} \right)^{12} - \sum_j \left(\frac{a}{p_j r_1} \right)^6 \right]$$

следует, что $r_1 < d$ и найти выражение, связывающее r_1 и a .

Задача 3. С использованием выражения $d = 1.12a$ для равновесного расстояния между ближайшими соседями, вывести формулу для энергии связи и сравнить результат с приближенной формулой

$$E_{\text{св}} = -U = \frac{1}{2} N(+\varepsilon) 12 = 6N\varepsilon$$

Задача 4. Вывести формулу

$$U = -\frac{N\alpha q^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0} \right)$$

для полной энергии кристаллической решетки, где R_0 – равновесное расстояние между ближайшими соседями.

Задача 5. Рассчитать α для бесконечной цепочки ионов противоположного знака.

Задача 6. Пренебрегая вкладом сил отталкивания, оценить молярную энергию связи в монокристалле KCl. Равновесное расстояние между ближайшими соседями $R_0 = 3,147 \text{ \AA}$.

Задача 7. На кубический кристалл падает излучение с $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. Отражение наблюдается при $\theta_{min} = 11^\circ$. Найти постоянную решетки d .

Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:

1. Раздельная функция распределения как количественная мера ближнего порядка в жидкостях.
2. Рассеяние рентгеновского излучения, электронов и нейтронов в жидкостях и твердых телах.
3. Определение радиальной функции распределения из экспериментов по рассеянию рентгеновских лучей.
4. Исследование структуры жидкостей. Метод дифракции рентгеновских лучей.
5. Метод рассеяния нейтронов.
6. Электронография конденсированного вещества.
7. Другие экспериментальные методы.

Задачи для проверки умений при освоении дисциплины

Задача 1. Из выражения для энергии леннард-джонсовского кристалла

$$U = \frac{1}{2} \sum \Phi(r_{ij}) = \frac{1}{2} N(4\varepsilon) \left[\sum_j \left(\frac{a}{P_j r_1} \right)^{12} - \sum_j \left(\frac{a}{P_j r_1} \right)^6 \right]$$

получить формулу для энергии связи в допущении, что $r_1 = d$, и что учитывается взаимодействие только с ближайшими соседями.

Задача 2. Ионные кристаллы состоят из положительно и отрицательно заряженных ионов. Эти ионы сферически симметричны, а силами взаимодействия

между ними являются центральные кулоновские силы и некие силы отталкивания, природа которых не может быть описана в рамках классической теории. Поэтому выражение для энергии взаимодействия ε_{ij} между двумя ионами i и j в кристалле состава XY, образованном из ионов с зарядами $+e$ и $-e$, содержит два члена и записывается так:

$$\varepsilon_{ij} = \pm \frac{e^2}{r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^n},$$

где r_{ij} – расстояние между двумя разноименными ионами, а b и n – эмпирические константы.

Измеряя r_{ij} в единицах расстояния r между ближайшими соседями, т.е. полагая

$$r_{ij} = \alpha_{ij}r,$$

и суммируя по всем ионам при $j \neq i$, находим энергию ε_i -го иона в поле всех других ионов:

$$\varepsilon_i = -\frac{Ae^2}{r} + \frac{B}{r^n},$$

где

$$A = \sum_{j \neq i} \pm \alpha_{ij}^{-1}, \quad B = b \sum_{j \neq i} \alpha_{ij}^{-n}.$$

Если рассматриваемый i -ый ион заряжен отрицательно, то плюсы и минусы в последнем выражении для постоянной Маделунга A относятся соответственно к положительным и отрицательным ионам.

Из выражения для ε_i вытекает, что полная энергия решетки $U(r)$ кристалла, содержащего $2N$ ионов равна

$$U(r) = N\varepsilon_i = -N\left(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n}\right)$$

если предположить, что N достаточно велико, чтобы можно было пренебречь поверхностными эффектами.

Показать, что энергия решетки $U(r_0)$, соответствующая равновесному кратчайшему расстоянию между ионами $r = r_0$, задается в виде:

$$U(r_0) = -\frac{NAe^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

