

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)



Первый проректор, проректор по научной
и инновационной работе

В.Г. Прокошев

« 03 » июня 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ»

(наименование дисциплины)

Направление подготовки 03.06.01 Физика и астрономия

Направленность (профиль) подготовки Физика конденсированного состояния

Уровень высшего образования Подготовка кадров высшей квалификации

Квалификация выпускника «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения очная

Год	Трудоем- кость зач. ед, час.	Лек- ции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРА, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачет)
4	3/108	18	4	-	50	ЭКЗАМЕН (36)
Итого	3/108	18	4	-	50	ЭКЗАМЕН (36)

г. Владимир 2015 г.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Физика конденсированного состояния» состоит из двух разделов: «Симметрия в физике конденсированного состояния» и «Теория и практика структурного анализа».

Целями освоения первого раздела «Симметрия в физике конденсированного состояния» являются:

1. Освоение применения теоретико-групповых методов к проблемам физики конденсированного состояния.
2. Овладение как универсальными (общенаучными), так и инструментальными компетенциями в области приложения методов современной физики конденсированного состояния.
3. Освоение основ геометрической кристаллографии, теорий симметрии формы кристаллов и симметрии кристаллических структур.
4. Формирование навыков самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области структурного анализа кристаллов.

Целями освоения второго раздела «Теория и практика структурного анализа» являются:

1. Знакомство с задачами структурного анализа, а также основными методами исследования вещества с использованием дифракции рентгеновского и синхротронного излучения, электронов и нейтронов.
2. углубленное изучение теоретических и методологических основ структурного анализа. В том числе: изучение фазовой проблемы и путей ее решения, методов расчета дифракционного спектра; знакомство с условиями Лауэ и формулой Вульфа-Брэгга, понятием обратной решетки, основами Фурье-анализа и Фурье-синтеза.
3. Освоение комплекса компьютерных программ SHELX-97 расшифровки и уточнения кристаллических структур по рентген-дифракционным данным и описания молекулярных и кристаллических структур.
4. Формирование навыков самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области структурного анализа кристаллов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОСНОВНОЙ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ (ОПОП ВО)

«Симметрия в физике конденсированного состояния» является одной из разделов специальной дисциплины «Физика конденсированного состояния». Актуальность ее заключается в активном применении симметричного подхода и теоретико-групповых методов к решению проблем физики твердого тела и физики конденсированного состояния. Данная дисциплина подготовит аспиранта к самостоятельным исследованиям некоторых физических свойств кристаллов с помощью теоретико-групповых методов, а так же будет способствовать выполнению научно-исследовательской работы, подготовке кандидатской диссертации и участию в научных конференциях.

В качестве «входных» следует указать знания аспирантами основ аналитической геометрии, линейной алгебры, векторного и тензорного анализа, теории функций комплексного переменного, компьютерного моделирования в физике твердого тела,

теории групп. Необходимо также владеть компьютерными технологиями, уметь пользоваться базами данных, пакетами вычислительных программ. Знания, полученные при изучении этого раздела, активно используются при изучении другого раздела специальной дисциплины «Теория и практика структурного анализа».

Освоение второго раздела опирается на знания, полученные при освоении первого раздела ОПОП (ВО) «Симметрия в физике конденсированного состояния». В качестве «входных» следует указать знание аспирантами теории групп, точечной и пространственной симметрии кристаллов. Аспирант должен уметь выписывать преобразования симметрии для наиболее распространенных пространственных групп.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

- 1) Знать:
 - основы теории симметрии (ОПК – 1);
 - особенности симметрии кристаллических структур и форм кристаллов (ОПК – 2);
- 2) Уметь:
 - использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ОПК – 1, ОПК – 2);
 - использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач (ОПК – 1);
 - применять на практике базовые профессиональные навыки (ОПК – 1);
 - пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации (ОПК – 1);
 - использовать специализированные знания в области теории симметрии для освоения профильных физических дисциплин (ОПК – 2);
- 3) Владеть:
 - методами анализа и описания симметрии молекул, формы кристаллов, кристаллических структур (ОПК – 1, ОПК – 2);
 - методами вывода наиболее распространенных в природе пространственных групп симметрии кристаллов (ОПК – 1, ОПК – 2);

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Год обучения	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу аспирантов и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	СРА	
Раздел I «Симметрия в физике конденсированного состояния»							
1.	Теория групп и	4	1		-	5	Тестирование

	симметрия кристаллов. 32 класса точечной симметрии. 14 типов решеток Бравэ. 230 пространственных групп симметрии кристаллов.						
2.	Классификация собственных функций и кратность вырождения собственных значений операторов.	4	2	1	-	6	Тестирование
3.	Правила отбора для прямых и не прямых переходов в кристаллах.	4	2	1	-	5	Контрольная работа
4.	Применение теории симметрии к исследованию нормальных колебаний кристаллической решетки.	4	2		-	5	Тестирование
5.	Применение теории симметрии к исследованию фазовых переходов в кристаллах.	4	1		-	5	Тестирование
Раздел II «Теория и практика и структурного анализа»							
1.	Рентгеновские трубки. Рентгеновские аппараты. Методы регистрации рентгеновского излучения.	4	1		-	3	Тестирование
2.	Взаимодействие рентгеновских лучей с	4	2	1	-	5	Тестирование

	веществом. Обратная решетка. Сфера Эвальда. Уравнения Лауэ, уравнение Вульфа - Бреггов.						
3.	Основные методы рентгенострукт урного анализа. Структурный фактор.	4	2	1	-	5	Контрольная работа
4.	Этапы расшифровки атомной структуры кристаллов. Интерференция рентгеновских лучей рассеянных кристаллами.	4	2		-	4	Тестирование
5.	Количественны й и качественный фазовый анализ. Прецизионное определение параметров решетки кристаллическо го вещества	4	2		-	4	Тестирование
6.	Современные методы исследования структур с помощью рентгеновских лучей: топография, малоугловые исследования.	4	1		-	3	Тестирование
	ИТОГО:		18	4	-	50	ЭКЗАМЕН (36)

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Освоение первого раздела «Симметрия в физике конденсированного состояния» предполагает использование следующих инновационных форм проведения занятий:

– опережающее обучение (темы 1-5);

- проблемное обучение (темы 2-4);
- компьютерный тренинг (темы 1, 2);

Освоение второго раздела «Теория и практика структурного анализа» предполагает использование следующих инновационных форм проведения занятий:

- опережающее обучение (темы 1-6);
- проблемное обучение (темы 2-4);
- компьютерный тренинг (темы 2-3);

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ АСПИРАНТОВ

Вопросы к экзамену (Раздел I)

1. Классификация собственных функций и кратность вырождения собственных значений операторов физических величин, симметрия оператора возмущения и расщепление вырожденных уровней энергии.
2. Расщепление термов атомов во внешнем поле.
3. Связанные системы.
4. Построение симметризованного базиса кристаллических и молекулярных орбиталей.
5. Соотношения совместности.
6. Правила отбора для прямых переходов в кристаллах.
7. Правила отбора для непрямых переходов в кристаллах.
8. Влияние симметрии относительно инверсии времени на энергетические зоны кристалла. Копредставления.
9. Применение теории симметрии к исследованию нормальных колебаний кристаллической решетки.
10. Применение теории групп к исследованию фазовых переходов в кристаллах.
11. Системы кристаллохимических радиусов, принцип плотнейшей упаковки. Многослойные плотнейшие упаковки. Структурные типы кристаллов. Некоторые структурные типы соединений с общей формулой AX , A_2X , AX_2 , $A_mB_nC_k$. Полиморфизм. Изоморфизм. Морфотропия. Твердые растворы.

Задачи к экзамену (Раздел I)

1. Рассмотрим систему, обладающую симметрией O . Предположим, что на эту систему наложено возмущение, которое понижает симметрию до симметрии группы T . Найдите, как уровни, принадлежащие представлениям E , F_1 и F_2 группы O , расщепляются в результате наложенного возмущения.
2. Построить кристаллическую орбиталь для кристалла NaN_3 (группа симметрии C_{2h}^3).
3. Построить молекулярную орбиталь иона NO_3^- NO (группа симметрии D_{3h}). В качестве базисных функций и для кислорода и для азота использовать s , $3p$ - функции.
4. Найти соотношения совместности для плоской квадратной решетки с группой симметрии C_{4v} , C_{4h} .
5. Найти соотношения совместности для групп волновых векторов простой кубической решетки.

Темы рефератов по дисциплине (самостоятельная работа)

(Раздел I)

1. Современные методы исследования и описания симметрии форм кристаллов.
2. Теория представлений и пространственная симметрия кристаллических структур.
Симметрия в квантово-химических расчетах

Вопросы к экзамену (Раздел II)

1. Рассеяние рентгеновских лучей электроном и атомом.
2. Рассеяние группой атомов. Структурный фактор как вектор на плоскости. Фаза и модуль структурного фактора.
3. Факторы, влияющие на измеряемую интенсивность. (Кинематический фактор, поглощение, экстинкция)
4. Учет поглощения рентгеновских лучей в монокристалльном образце.
5. Определение дифракционного класса по экспериментальным данным. Перестановка осей.
6. Фазовая проблема РСА и основные методы ее решения.
7. Матричное представление симметрии пространственной группы. Преобразование индексов Мюллера, точечная и дифракционная симметрия. Погасания рефлексов.
8. Функция Паттерсона (ФП) в интегральном виде и в виде ряда Фурье. Основное и векторное пространство.
9. Свойства ФП: симметрия, координаты, ширины и веса максимумов.
10. Основная и векторная система точек. Особенности расположения пиков векторной системы, построенной для centrosymmetric основной системы.
11. Разностная и обостренная ФП.
12. Пики связки (Харкера) и пики взаимодействия в ФП.
13. Использование харкеровских сечений для определения координат атомов. Решение проблемы неоднозначности.
14. Общий метод выделения основной системы из векторной. Функции, выделяющие изображение основной системы.
15. Метод приведения измеренных интенсивностей к абсолютной шкале.
16. Нормализация структурных факторов.
17. Основа прямого метода нахождения фаз. Неравенства Харкера-Каспера, равенство Сейера.
18. Тангенс-формула Карле-Хауптмана.
19. Тройные произведения (триплеты). Вероятностная оценка равенства нолю суммы фаз.
20. Структурные инварианты и полуинварианты. Фиксация начала координат и энантиоморфизма.
21. Многовариантный метод расчета фаз. Уточнение фаз, критерии отбора наилучших вариантов.
22. Квартеты и их использование при нахождении фаз прямым методом.
23. E-синтезы и их анализ.
24. Виды синтезов Фурье, применяемых в РСА.
25. Влияние обрыва ряда и методы устранения.
26. Полный и частичный разностный синтез электронной плотности.
27. Уточнение структуры методом Фурье синтеза.
28. Принцип метода наименьших квадратов (МНК). Матрица нормальных уравнений (свойства). Корреляционная матрица.
29. Полноматричный, блок-диагональный и диагональный МНК. Этап и итерация в МНК.
30. Уточняемые параметры структуры. Эффекты корреляции параметров.
31. МНК с наложением ограничений.
32. Изотропный и анизотропный температурный фактор атома.

33. Учет ангармонизма колебаний атома при уточнении температурного фактора атома.
 34. Триклинная и ортогональная система координат. Основные параметры структуры, рассчитываемые из координат атомов. Вероятностная оценка погрешности структурных параметров.
 35. Принцип автоматизации РСА. Эксперимент, обработка, проведение вычислений.

Темы рефератов по дисциплине (самостоятельная работа)

(Раздел II)

1. Современные автоматические монокристалльные дифрактометры и их математическое обеспечение.
2. Современные методы исследования структур с помощью рентгеновских лучей: топография, малоугловые исследования.
3. Двукристалльные и трехкристалльные спектрометры. Рефлектометрия.

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

№ п/п	Название и выходные данные (автор, вид издания, издательство, издания, количество страниц)	Год издания	Количество экземпляров в библиотеке университета	Наличие в электронной библиотеке ВлГУ	Количество аспирантов, использующих указанную литературу	Обеспеченность аспирантов литературой, %
1	2	3	4	5	6	7
Основная литература						
1.	Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] / И.Г. Каплан. - М.: БИНОМ, 2014.	2014		ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556	1	100
2.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд., испр. (эл.). -	2014		ЭБС «Консультант студента» http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623	1	100

	М.: БИНОМ, 2014.					
3.	Физика твердого тела: Учебное пособие / Ю.А. Стрекалов, Н.А. Тенякова. - М.: ИЦ РИОР: НИЦ Инфра-М, 2013. - 307 с - ISBN: 978-5-369-00967-3	2013		ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=363421	1	100
4.	Физика конденсированного состояния [Электронный ресурс] / Байков Ю.А., Кузнецов В.М. - М.: БИНОМ, 2013.	2013		ЭБС «Консультант студента» http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322596	1	100
5.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] / Цирельсон В.Г. - М.: БИНОМ, 2012.	2012		ЭБС «Консультант студента» http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982	1	100
Дополнительная литература						
1	Физическое материаловедение. Ч. 2. Фазовые превращения в металлах и сплавах [Электронный ресурс] : учеб. пособие. В 3 ч. / А.К. Федотов. – Минск : Выш. шк., 2012. – 446 с.: ил. - ISBN 978-985-06-2063-7.	2012		ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=508082	1	100
2	Дифракционный анализ [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.М.	2011		ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=50	1	100

	Анищик, В.В. Понарядов, В.В. Углов. – Минск: Выш. шк., 2011. – 215 с - ISBN 978- 985-06-1834-4			<u>6981</u>		
3	Малеев, Андрей Владимирович. Модель послойного роста разбиений, упаковок и графов : монография / А. В. Малеев, А. В. Шутов ; ВлГУ .— ВлГУ.— 107 с. : ил., табл. — Библиогр.: с. 100- 107.— ISBN 978-5- 8311-0546-9.	2011	5		1	33

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Cambridge Structural Database System. Version 1.18. Cambridge Crystallographic Data Centre, 2015.
2. Программный комплекс для исследования координационных окружений в модели послойного роста графов связанности (регистрационный номер №2013619399).
3. Программа перебора вариантов периодических упаковок полигексов в плоскости (регистрационный номер №2014661669).
4. Программа перебора вариантов периодических упаковок полимино в плоскости (регистрационный номер №2013619301).
5. Программа сравнения молекулярных упаковок в кристаллических структурах (регистрационный номер №2015662262).
6. <http://crystal.geology.spbu.ru/studies/materiaux-denseignement>
7. <http://ums.usu.ru/x-ray/Labs1-4/>

Периодические издания:

1. Журнал структурной химии
2. Кристаллография

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1. Супер-ЭВМ «СКИФ-Мономах».
2. Персональные компьютеры типа Core i7 2,4 ГГц (16 GB RAM).
3. По договорам о творческом содружестве ВлГУ с Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Нижегородским государственным университетом им. Н.И. Лобачевского имеется возможность проведения экспериментов на современных автоматических монокристалльных дифрактометрах.
4. Доступ к базе данных Cambridge Crystallographic Data Center (CDC).


Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО (уровень подготовки кадров высшей квалификации) по направлению 03.06.01 – Физика и астрономия и направленности (профилю) подготовки Физика конденсированного состояния

Рабочую программу составил _____  д.ф.-м.н, доц. А.В. Малеев

Рецензент (ы) _____ д.ф.-м.н., профессор
кафедры информационных технологий Владимирского филиала Российской академии народного хозяйства и государственной службы при президенте Российской Федерации (РАНХиГС) В.Г. Рау

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры общей и теоретической физики

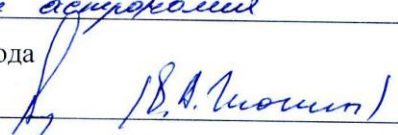
протокол № 10 от 03.06.2015 года.

Заведующий кафедрой _____ 

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 03.06.01 - физика и астрономия

Протокол № 1 от 03.06.2015 года

Председатель комиссии _____


(ФИО, подпись)

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Рабочая программа одобрена на 2020/21 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.20 года

Заведующий кафедрой _____



А.В. Машев