

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

СОГЛАСОВАНО
ДИРЕКЦИЯ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ
ПРОГРАММ

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе

_____ С.Т. Князев
«__» _____ 2016 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

ФИЗИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Модуль Физическое моделирование свойств твердых тел	Код модуля 1126057
Образовательная программа Физика	Код ОП 03.03.02./01.02
Траектория образовательной программы (ТОП)	ТОП 1. Физика кинетических явлений
Направление подготовки Физика	Код направления и уровня подготовки 03.03.02
Уровень подготовки Бакалавриат	
ФГОС ВО	Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО: 07.08.2014 № 937

Екатеринбург, 2016

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	ФИО	Ученая степень, ученое звание	Должность	Кафедра	Подпись
1	Германенко Александр Викторович	Д.ф.-м.н., профессор	профессор	Компьютерно й физики физики	

Руководитель модуля

А.В. Германенко

Рекомендовано учебно-методическим советом Института естественных наук

Председатель учебно-методического совета

Е.С. Буянова

Протокол № 5 от 18.04.2016 г.

Согласовано:

Дирекция образовательных программ

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Физическое моделирование свойств твердых тел

1.1. Объем модуля б.з.е.

1.2. Аннотация содержания модуля

Модуль включает два курса: Компьютерное моделирование свойств полупроводников и диэлектриков и Кооперативные явления в твердых телах. В курсе «Компьютерное моделирование свойств полупроводников и диэлектриков» рассматривается моделирование полупроводников и диэлектриков в оболочечной модели, а также моделирование из первых принципов, методами Хартри-Фока, функционала плотности. Рассматривается современное программное обеспечение для этих целей.

Дисциплина «Кооперативные явления в твердых телах» на основе анализа экспериментальных данных дает представления об особенностях энергетического спектра электронов и фононов в металлах и диэлектриках. Особое внимание обращено на взаимосвязь и взаимовлияние составляющих кристалл подсистем. Рассматриваются эффекты, наиболее ярко проявляющиеся при низких температурах, в квазиодномерных кристаллах и органических сверхпроводниках, в частности – инициированные разными факторами (концентрация примесей, давление, магнитное поле) переходы металл-диэлектрик.

2. СТРУКТУРА МОДУЛЯ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ ПО ДИСЦИПЛИНАМ

Наименования дисциплин с указанием, к какой части образовательной программы они относятся: базовой (Б), вариативной – по выбору вуза (ВВ), вариативной - по выбору студента (ВС)	Семестр изучения	Объем времени, отведенный на освоение дисциплин модуля							
		Аудиторные занятия, час.				Самостоятельная работа, включая все виды текущей аттестации, час.	Промежуточная аттестация (зачет, экзамен), час.	Всего по дисциплине	
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Всего			Час.	Зач. ед.
1. (ВС) Компьютерное моделирование свойств полупроводников и диэлектриков	7	9	42		51	39	Э, 18	108	3
2. (ВС) Кооперативные явления в твердых телах	8	8	40		48	42	Э, 18	108	3
Всего на освоение модуля		17	82		99	81	36	216	6

3. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИН В МОДУЛЕ

3.1.	Пререквизиты и постреквизиты в модуле	отсутствуют
------	---------------------------------------	-------------

3.2.	Коррективы	отсутствуют
------	------------	-------------

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ МОДУЛЯ

4.1. Планируемые результаты освоения модуля и составляющие их компетенции

Коды ОП, для которых реализуется модуль	Планируемые в ОХОП результаты обучения -РО, которые формируются при освоении модуля	Компетенции в соответствии с ФГОС ВО, а также дополнительные из ОХОП, формируемые при освоении модуля
03.03.02 /01.02	РО-О1 Способность осуществлять научно-исследовательскую деятельность.	ОК7 - способность к самоорганизации и самообразованию; ОПК2 - способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей; ПК1 - способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин;
	РО-О2 Способность осуществлять научно-инновационную деятельность	ОК7 - способность к самоорганизации и самообразованию; ОПК3 - способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач; ПК3 - готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований; ПК4 - способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин; ПК5 - способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований; ДПК1 - способность оценивать эффективность разработанных технологий.
	РО-О3: Способность осуществлять организационно-управленческую деятельность	ОК7 - способность к самоорганизации и самообразованию; ОПК2 - способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей; ОПК3 - способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач; ОПК4 - способность понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности; ОПК5 - способность использовать основные методы, способы

	и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией; ОПК6 - способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности; ДПК1 - способность оценивать эффективность разработанных технологий.
РО-ТОП1 Способность осуществлять научные исследования процессов переноса и релаксации в материальных средах.	ДПК2 - способность применять на практике теоретические знания и экспериментальные методы физических исследований в области физики и техники низкотемпературного эксперимента, физики неравновесных процессов в газе, жидкости и твердом теле; ДПК4 - владеть основами экспериментальных методов теплофизических и электромагнитных измерений.

4.2. Распределение формирования компетенций по дисциплинам модуля

Дисциплины модуля		ОК-7	ОПК-2	ОПК-3	ОПК-4	ОПК-5	ОПК-6	ПК-1	ПК-3	ПК-4	ПК-5	ДПК-1	ДПК-2	ДПК-4
1	(ВС) Компьютерное моделирование свойств полупроводников и диэлектриков	*	*	*	*	*	*		*	*	*	*	*	
2	(ВС) Кооперативные явления в твердых телах	*		*				*	*	*	*		*	*

5. ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО МОДУЛЮ *Не предусмотрена*

6. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ МОДУЛЯ

Номер листа изменений	Номер протокола заседания проектной группы модуля	Дата заседания проектной группы модуля	Всего листов в документе	Подпись руководителя проектной группы модуля

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

Перечень сведений о рабочей программе дисциплины	Учетные данные
Модуль Физическое моделирование свойств твердых тел	Код модуля 1126057
Образовательная программа Физика	Код ОП 03.03.02./01.02
Направление подготовки Физика	Код направления и уровня подготовки 03.03.02
Уровень подготовки Бакалавриат	
ФГОС ВО	Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО: 07.08.2014 № 937

Екатеринбург, 2016

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	ФИО	Ученая степень, ученое звание	Должность	Кафедра	Подпись
1	Чернышев Владимир Артурович	кандидат физ.- мат. наук, доцент	Доцент	компьюте рной физики	

Руководитель модуля

А.В. Германенко

Рекомендовано учебно-методическим советом Института естественных наук

Председатель учебно-методического совета

Е.С. Буянова

Протокол № 49 от 02.06.2016 г.

Согласовано:

Дирекция образовательных программ

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ «Компьютерное моделирование свойств полупроводников и диэлектриков»

1.1. Аннотация содержания дисциплины

В курсе рассматривается моделирование полупроводников и диэлектриков в оболочечной модели, а также моделирование из первых принципов, методами Хартри-Фока, функционала плотности. Рассматривается современное программное обеспечение для этих целей - программа GULP (оболочечная модель), программа CRYSTAL, предназначенная для моделирования периодических структур методами Хартри-Фока и функционала плотности. Рассматривается моделирование структуры и динамики кристаллической решетки, расчет упругих модулей, диэлектрических постоянных, зонной структуры, влияние давления на кристаллическую и электронную структуру. Рассматривается моделирование полупроводников и диэлектриков, активированных d и f элементами.

1.2. Язык реализации программы - русский

1.3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Результатом обучения в рамках дисциплины является формирование у студента следующих компетенций:

ОК7 - способность к самоорганизации и самообразованию;

ОПК2 - способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей;

ОПК3 - способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач;

ОПК4 - способность понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности;

ОПК5 - способность использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией;

ОПК6 - способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности;

ПК3 - готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований;

ПК4 - способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин;

ПК5 - способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований;

ДПК1 - способность оценивать эффективность разработанных технологий.

ДПК2 - способность применять на практике теоретические знания и экспериментальные методы физических исследований в области физики и техники низкотемпературного эксперимента, физики неравновесных процессов в газе, жидкости и твердом теле.

В результате освоения дисциплины студент должен:

Знать основные эмпирические и *ab initio* модели для описания кристаллической и электронной структуры полупроводников и диэлектриков. Основные методы моделирования примесных центров. Знать возможности моделей и методов, программного обеспечения.

Уметь сделать правильный выбор модели и метода, программы для решения конкретной задачи. Уметь находить необходимую симметричную информацию в открытых базах данных, базисные наборы, параметры потенциалов.

Учитывать границы применимости данного метода и обеспечивать необходимую точность. Уметь работать с прикладными пакетами для визуализации полученных результатов, уметь их представлять и анализировать.

Владеть навыками работы с программами для ab initio расчетов и программами, реализующими оболочечную модель. Владеть навыками работы с базами данных о кристаллической структуре, с научными публикациями по ab initio моделированию.

1.1. Объем дисциплины

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)*	7
1.	Аудиторные занятия	51	51	51
2.	Лекции	9	9	9
3.	Практические занятия	42	42	42
4.	Лабораторные работы			
5.	Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей аттестации	57	7.65	57
6.	Промежуточная аттестация	4	2.33	3
7.	Общий объем по учебному плану, час.	108	60.98	108
8.	Общий объем по учебному плану, з.е.	3		3

2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для очной формы обучения

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины	Содержание
1	Оболочечная модель. Работа с программой GULP.	Основные работы с программой GULP. Создание входных файлов для моделирования кристаллических структур. Оболочечная модель. 2. Виды потенциалов, используемые в программе GULP. Потенциалы Buckingham и General. Библиотеки параметров потенциалов в программе GULP.
2	Моделирование дефектов. Метод Мотта-Литлтона.	Моделирование дефектов в кристаллах. Метод Мотта-Литлтона. Пример расчета кристаллической структуры кубического и тетрагонального примесных центров Eu в CaF ₂ . Выбор размеров дефектной области.
3	Расчет структуры и динамики кристаллической решетки, упругих свойств, влияния давления в оболочечной модели (GULP).	Расчет фононного спектра, плотности состояний, влияния гидростатического сжатия на структуру и динамику кристаллической решетки. Пример расчета для MeF ₂ (Me=Ca, Sr, Ba). Кристаллическое поле. Расчет параметров кристаллического поля в модели обменных зарядов. Доля обменного вклада в параметрах кристаллического поля. Пример расчета параметров

		кристаллического поля в кубическом и тетрагональном примесных центрах Eu^{3+} в CaF_2 . Определение необходимого радиуса суммирования параметров кристаллического поля.
4	Первопринципные расчеты. Методы Хартри-Фока и функционала плотности. Программа CRYSTAL	Основы работы программой CRYSTAL09. Создание входных файлов для моделирования периодических структур. Метод МО ЛКАО.
5	Полноэлектронные базисы, псевдопотенциалы.	Полноэлектронные базисные наборы. Псевдопотенциалы. Диффузные и поляризационные орбитали. Их влияние на свойства кристаллических структур. Выбор базисного набора.
6	Расчет фононного спектра методами Хартри-Фока и DFT. Влияние давления на свойства кристалла.	Методы Хартри-Фока и функционала плотности. Функционалы DFT B3LYP, BPEsol, PBE0, WC1LYP и другие. Гибридные методы. Расчет структуры кристаллической решетки, упругих модулей, влияния давления. Расчет фононного спектра, LO-TO расщепления. Построение дисперсионных зависимостей.
7	Точность расчета. Параметры TOLDEE, SHRINK, TOLINTEG.	Точность расчета. Параметры TOLDEE, SHRINK, TOLINTEG. Улучшение сходимости. Метод Бройдена.
8	Моделирование соединений с незаполненными оболочками. Метод неограниченного Хартри-Фока	Расчет соединений, содержащих d и f ионы. Метод неограниченного Хартри-Фока. Опция SPINLOCK. Моделирование примесных дефектов. Увеличение ячейки. Опции SUPERCEL и SUPERCON. Расчет электрического поля на ядре. Расчет параметров Ферми-контактного взаимодействия методами Хартри-Фока и DFT.
9	Визуализация результатов моделирования.	Пример моделирования структуры и свойств нестехиометрического циклогерманата $\text{Y}_2\text{CaGe}_4\text{O}_{12}$. Визуализация результатов. Программы Jmol, J-ice.

3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ

3.1. Распределение аудиторной нагрузки и мероприятий самостоятельной работы по разделам дисциплины

Для очной формы обучения

4. ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ, САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

4.1. Лабораторные работы

не предусмотрено

4.2. Практические занятия

Код раздела, темы	Номер занятия	Тема занятия	Время на проведение занятия (час.)
1	1	Оболочечная модель. Работа с программой GULP.	2
2	2	Моделирование дефектов. Метод Мотта-Литлтона.	2
2	3	Метод Мотта-Литлтона. Моделирование примесных центров f- элементов в ионных кристаллах.	2
3	4	Расчет структуры и динамики кристаллической решетки, упругих свойств в оболочечной модели (GULP).	2
3	5	Расчет влияния давления на кристаллическую решетку ионных кристаллов в оболочечной модели (GULP).	2
4	6	Первопринципные расчеты. Метод Хартри-Фока. Программа CRYSTAL	2
4	7	Первопринципные расчеты Расчеты в рамках теории функционала плотности. Программа CRYSTAL	2
5	8	Полноэлектронные базисы. Валентно-расщепленные базисные наборы.	2
5	9	Псевдопотенциалы. Валентные базисные наборы.	2
5	10	Применение псевдопотенциалов для описания структуры и динамики кристаллической решетки.	2
5	11	Псевдопотенциалы для ряда лантаноидов.	2
6	12	Расчет фононного спектра методом Хартри-Фока.	2
6	13	Расчет фононного спектра в рамках теории функционала плотности. Типы функционалов.	2
6	14	Расчет фононного спектра в рамках теории функционала плотности. LDA, GGA, гибридные функционалы.	2
6	15	Расчет влияния давления на свойства кристалла.	2
7	16	Точность расчета. Параметры TOLDEE, SHRINK, TOLINTEG.	2
7	17	Точность расчета. Выбор сетки.	2
8	18	Моделирование соединений с незаполненными оболочками. Метод неограниченного Хартри-Фока	2
8	19	Моделирование соединений с незаполненными оболочками в рамках теории функционала	2

		плотности.	
8	20	Моделирование соединений с незаполненными оболочками. Карты зарядовой плотности	2
9	21	Визуализация результатов моделирования.	2

Всего: 42

4.3. Примерная тематика самостоятельной работы

4.3.1. Примерный перечень тем домашних работ

не предусмотрено

4.3.2. Примерный перечень тем графических работ

не предусмотрено

4.3.3. Примерный перечень тем рефератов (эссе, творческих работ)

не предусмотрено

4.3.4. Примерная тематика индивидуальных или групповых проектов

не предусмотрено

4.3.5. Примерный перечень тем расчетных работ (программных продуктов)

не предусмотрено

4.3.6. Примерный перечень тем расчетно-графических работ

не предусмотрено

4.3.7. Примерный перечень тем курсовых проектов (курсовых работ)

не предусмотрено

4.3.8. Примерная тематика контрольных работ

1. Расчет структуры и динамики кристаллической решетки MeF_2 ($\text{Me}=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$), расчет кристаллической структуры примесного дефекта (R^{3+} , $\text{R}=\text{Ce}-\text{Yb}$) в MeF_2 в программе GULP. Расчет кристаллического поля на примесном ионе с использованием собственного программного обеспечения.

2. Расчет структуры и динамики кристаллической решетки, зонной структуры методами Хартри-Фока функционала плотности кристаллов YTiO_3 , $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$, $\text{PrFe}(\text{BO}_3)_4$, $\text{Cs}_2\text{NaYbF}_6$, $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. Исследование влияния давления на кристаллическую и зонную структуру.

4.3.9. Примерная тематика коллоквиумов

не предусмотрено

5. СООТНОШЕНИЕ РАЗДЕЛОВ, ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРИМЕНЯЕМЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ

Код раздела, темы дисциплины	Активные методы обучения						Дистанционные образовательные технологии и электронное обучение					
	Проектная работа	Кейс-анализ	Деловые игры	Проблемное обучение	Командная работа	Другие (указать, какие)	Сетевые учебные курсы	Виртуальные практикумы и тренажеры	Вебинары и видеоконференции	Асинхронные web-конференции и семинары	Совместная работа и разработка контента	Другие (указать, какие)
1-9				*	*							

6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

(Приложение 1)

7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ (Приложение 2)

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (Приложение 3)

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1.Рекомендуемая литература

9.1.1.Основная литература

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.
2. Б. П. Демидович, И. А. Марон. Основы вычислительной математики. СПб.: Лань, 2009.
Демидович, Борис Павлович. Основы вычислительной математики : для вузов / Б.П. Демидович, И.А. Марон .— Изд. 4-е, испр. — Москва : Наука, 1970 .— 664 с. : черт. ; 22 см .— Библиогр. в конце гл. — Предм. указ.: с. 659-664.
3. Волков Е.А. Численные методы. СПб.: Лань, 2008.
4. С. М. Устинов, В. А. Зимницкий. Вычислительная математика. СПб.: БХВ-Петербург, 2009.

9.1.2.Дополнительная литература

1. Калиткин, Н. Н. Численные методы. Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2011.
 1. <http://www.crystal.unito.it/> Сайт программы CRYSTAL. Электронный ресурс.
 2. <http://projects.ivec.org/gulp/> Сайт программы GULP. Электронный ресурс.

9.2.Методические разработки

не используются

9.3.Программное обеспечение

Программа CRYSTAL, программа GULP, пакеты MathCAD.

9.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

При проведении практических занятий и подготовке к аудиторным занятиям источниками информации могут служить Интернет-ресурсы.

Зональная научная библиотека УрФУ lib.urfu.ru

9.5.Электронные образовательные ресурсы

1. Ларин А.В., Чернышев В.А. «Моделирование наноструктур на основе применения программных пакетов GULP и GAMESS». Электронный ресурс.
http://study.urfu.ru/view/aid_view.aspx?AidId=10969 УрФУ, 2012.
2. Можегоров А.А., Чернышев В.А. «Моделирование наноструктур на основе применения программных пакетов CRYSTAL и AB INIT». Электронный ресурс.
http://study.urfu.ru/view/aid_view.aspx?AidId=10970 УрФУ, 2012.

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием

Аудитории, оборудованные мультимедийной техникой. Компьютерный класс с установленными пакетами Maple, Mathematica. Доступ в интернет.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1
к рабочей программе дисциплины

6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Весовой коэффициент значимости дисциплины – 1

6.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции:		
Весовой коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – к лек.= 0.5		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Посещение лекций	VII, 1 - 17	60
Выполнение контрольной работы (СРС)	VII, 5,15	40
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – к тек.лек.=0.5		
Промежуточная аттестация по лекциям – зачет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – к пром.лек. = 0.5		
2. Практические/семинарские занятия:		
Весовой коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – к прак. = 0.5		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Посещение практических занятий	VII, 1 - 17	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – к тек.прак.=0.5		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям - нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – к пром.прак. = 0		
3. Лабораторные занятия: не предусмотрены		
Весовой коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – к лаб. =0.0		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по		

лабораторным занятиям – k тек.лаб.= 0
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям - Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – k пром.лаб. = 0

6.3. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта – не предусмотрены

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта <input type="checkbox"/> перечислить контрольно-оценочные мероприятия во время выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – ...		

6.4. Коэффициент значимости семестровых результатов освоения дисциплины

Порядковый номер семестра по учебному плану, в котором осваивается дисциплина	Коэффициент значимости результатов освоения дисциплины в семестре
7	1
Семестр <input type="checkbox"/> указать номер семестра <input type="checkbox"/>	...

*В случае проведения промежуточной аттестации по дисциплине (экзамена, зачета) методом тестирования используются официально утвержденные ресурсы: АПИМ УрФУ, СКУД УрФУ, имеющие статус ЭОР УрФУ; ФЭПО (www.фэпо.рф); Интернет-тренажеры (www.i-exam.ru).

**7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ
НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ**

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО <http://fepo.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте Интернет-тренажеры <http://training.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

В связи с отсутствием Дисциплины и ее аналогов, по которым возможно тестирование, на сайтах ФЭПО, Интернет-тренажеры и портале СМУДС УрФУ, тестирование в рамках НТК не проводится.

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

8.1. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ В РАМКАХ БРС

В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре критерии оценивания достижений студентов по каждому контрольно-оценочному мероприятию. Система критериев оценивания, как и при проведении промежуточной аттестации по модулю, опирается на три уровня освоения компонентов компетенций: пороговый, повышенный, высокий.

Компоненты компетенций	Признаки уровня освоения компонентов компетенций		
	пороговый	повышенный	высокий
Знания	Студент демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем самостоятельного воспроизведения и применения информации.	Студент демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	Студент может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.
Умения	Студент умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое использование умений (технологий)
Личностные качества	Студент имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Студент имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Студент имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

8.2. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ

– НТК не применяется.

8.3. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Выбрать из списка, либо дополнить наименования оценочных средств

8.3.1. Примерные задания для проведения мини-контрольных в рамках учебных занятий не предусмотрено

8.3.2. Примерные контрольные задачи в рамках учебных занятий

1. Как запускается программа GULP в операционной системе Windows?
2. Как задаются размеры дефектной области при моделировании дефекта в программе GULP?
3. В каких единицах выражены координаты остовов и оболочек ионов в выходном файле программы GULP?
4. От какой точки отсчитывается радиус второй области при моделировании дефекта в методе Мотта-Литтлтона?
5. Какими командами во входном файле задается нахождение оптимальной структуры кристалла и расчет его свойств?
6. Какими командами во входном файле задается расчет структуры дефекта и вывод в выходной файл координат ионов из первой и второй областей?
7. Какая из команд будет выполнена, если во входном файле одновременно написать “conv” и “conv” ?
8. В каких единицах задается гидростатическое давление во входном файле?
9. Как задается группа симметрии кристалла во входном файле?
10. Создайте входной файл для оптимизации структуры кристалла LiF. Потенциалы межионных взаимодействий возьмите из библиотеки GULP. Рассмотрите два варианта: запись параметров взаимодействия непосредственно во входном файле и ссылка на библиотечный файл. Где в Интернете можно найти библиотеки с параметрами межионных взаимодействий для программы GULP ?
11. Создайте входной файл для оптимизации структуры кристалла LiF. Поместите дефект Zn^{2+} вместо катиона Li^+ . Исследуйте, проведя расчет в программе GULP, насколько далеко от примесного иона распространяется искажение решетки.
12. Создайте входной файл для оптимизации структуры кристалла CaF_2 . Параметры межионных взаимодействий возьмите в методических указаниях «[Моделирование наноструктур на основе применения программных пакетов GULP и GAMESS](https://study.urfu.ru/Aid/ViewMeta/10969)» (на портале <https://study.urfu.ru/Aid/ViewMeta/10969>). Рассчитайте частоты фононов в Г-точке.
13. При моделировании кристалла вы получили хорошее воспроизведение кристаллической структуры (т.е. параметров решетки и позиций ионов в элементарной ячейке), но несколько отрицательных значений частот фононов. Если вы поместите в этот кристалл дефект (например, примесный ион, замещающий один из ионов кристалла), сможете ли вы адекватно воспроизвести искажения кристаллической решетки вблизи дефекта?
14. Дефект в кристаллической решетке состоит из двух примесных ионов, расположенных на расстоянии периода кристаллической решетки. Как задать такой дефект во входном файле? Нужно ли удваивать элементарную ячейку?
15. При моделировании наноразмерных эпитаксиальных пленок приходится задавать кубическую структуру флюорита CaF_2 в H-системе (группа 143). Попробуйте создать соответствующий входной файл. На любом алгоритмическом языке напишите собственную программу, которая удаляет из элементарной ячейки «избыточные» ионы- т.е. те, которые воспроизводятся операциями симметрии.
16. Оболочечная модель. Как представлен ион в оболочечной модели? Для кристаллов с каким типом связи эта модель дает наилучшие результаты? Какие межионные взаимодействия в ней учитываются?
17. При моделировании кристалла необходимо задать один вид межионных взаимодействий для расстояний 0-1 ангстрем и другой вид взаимодействий на расстояниях 1-10 ангстрем. Как это сделать во входном файле?

18. Кристаллическое поле. Какие эффекты учитывает модель обменных зарядов?
19. Моделирование наноразмерных структур. Эпитаксиальные гетероструктуры фторидов. Какие эффекты необходимо учитывать при моделировании кристаллической структуры? Как учитывается влияние подложки на наноразмерную структуру?
20. Оптический спектр Eu^{3+} в наноразмерной структуре $\text{CdF}_2/\text{CaF}_2/\text{Si}$. Можно ли при расчете кристаллической структуры, определяющей параметры кристаллического поля, и, тем самым, оптический спектр, рассматривать гетероструктуру $\text{CdF}_2/\text{CaF}_2$ как бесконечную решетку? Если да, то из каких оценок это следует?
21. Наноразмерные кластеры редкоземельных ионов (Ce, Gd, Yb) во флюорите CaF_2 содержат 4, 6 и более редкоземельных ионов и собственных дефектов- ионов фтора. Напишите фрагмент входного файла в программе GULP, содержащий описание нанокластера из 6 ионов Yb^{3+} в структуре CaF_2 . Ионы Yb замещают 6 катионов в центрах граней ГЦК-решетки CaF_2 .
22. Создайте входной файл для расчета кристаллической структуры NaCl методом Хартри-Фока для программы CRYSTAL.
23. Создайте входные файлы для расчета кристаллической структуры NaCl методами DFT B3LYP и WC1LYP для программы CRYSTAL.
24. Рассчитайте фоновый спектр NaCl с учетом LO-TO расщепления методами Хартри-Фока и гибридным методом B3LYP. Используйте экспериментальное значение высокочастотной диэлектрической постоянной.
25. Рассчитайте фоновый спектр $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ методом DFT B3LYP. Проведите ряд расчетов, варьируя параметр SHRINK от 4 до 10.
26. Рассчитайте высокочастотную диэлектрическую постоянную для NaCl методами Хартри-Фока и DFT, используя опцию CPHF. Сравните результаты с экспериментальным значением.
27. Рассчитайте кристаллическую и зонную структуру YTiO_3 методами неограниченного Хартри-Фока и гибридным методом B3LYP. Объясните полученные результаты.
28. Рассчитайте влияние гидростатического сжатия 3 GPa на кристаллическую структуру и фоновый спектр CaF_2
29. Рассчитайте упругие постоянные кристалла $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ методом DFT B3LYP.
30. Рассчитайте фоновый спектр $\text{PrFe}(\text{BO}_3)_4$, используя псевдопотенциал для Pr^{3+} (<http://www.tc.uni-koeln.de/PP/clickpse.en.html>)
31. Увеличьте элементарную ячейку кристалла BaF_2 с помощью опции SUPERCON, проведите расчет кристаллической структуры. Определите пространственную группу симметрии и позиции ионов получившейся структуры, используя программу FINDSYM.
32. Увеличьте постоянные элементарной ячейки кристалла CaF_2 с помощью опции SUPERCON вдвое, с помощью опции ATOMSUBS замените ион Ca, находящийся на оси C_4 , на ион Cu^{2+} . Рассчитайте структуру примесного кристалла.

8.3.3. Примерные контрольные кейсы

не предусмотрено

8.3.4. Перечень примерных вопросов для экзамена

1. Оболочечная модель. Расчет кристаллической структуры в программе GULP. Виды потенциалов межоионного взаимодействия, используемые в программе GULP. Эмпирические и неэмпирические параметры межоионных взаимодействий.
2. Как задать элементарную ячейку и группу симметрии кристалла во входном файле программы GULP? Как задать диапазон действия потенциала в программе GULP?
3. Команды «buck», «general», «interstitial», «impurity», «centre», «size» во входном файле программы GULP. В каких единицах записываются во входном файле параметры потенциалов межоионного взаимодействия?
4. Как рассчитать частоты фононов в Г-точке кристалла в программе GULP?
5. Моделирование дефектов в кристаллической структуре с помощью программы GULP. Метод Мотта-Литтлтона. Релаксация решетки в первой и второй областях. Выбор размеров дефектной области.
6. Расчет параметров кристаллического поля в модели обменных зарядов. Каков вклад обменной части в параметры кристаллического поля? Что необходимо учитывать при расчете кристаллического поля на примесном ионе Eu^{3+} в гетероструктурах $\text{CdF}_2/\text{CaF}_2:\text{Eu}^{3+}/\text{Si}$?
7. Опции «conv», «convp», «regi», «regi2a», «opti», «defect» программы GULP.
8. Запуск программы GULP под Windows. Запустите программу GULP с входным файлом «safeu.txt», описанным в методических указаниях [«Моделирование наноструктур на основе применения программных пакетов GULP и GAMESS»](#).

9. Как воспользоваться библиотеками потенциалов программы GULP? Создайте входной файл для любой кристаллической структуры, который содержит ссылку на библиотеку потенциалов.
10. Рассчитайте упругие постоянные кристалла CaF_2 , используя входной файл «safeu.txt», описанный в методических указаниях «[Моделирование наноструктур на основе применения программных пакетов GULP и GAMESS](#)».
11. В программе GULP рассчитайте кристаллическую структуру тетрагонального примесного центра Eu^{3+} в CaF_2 , взяв размеры первой и второй областей 8 и 14 ангстрем.
12. Системы какой размерности можно моделировать в пакете CRYSTAL? Как задается размерность системы во входном файле?
13. Как задается элементарная ячейка и группа симметрии во входном файле для программы CRYSTAL? Приведите пример.
14. Как задается суперячейка во входном файле программы CRYSTAL? Задайте суперячейку для кристалла LiF , содержащую 16 атомов.
15. Как задается базис во входных файлах программы CRYSTAL? Как задается псевдопотенциал? В чем суть оптимизации базисного набора? Что означает выражение «хартри-фоковский предел»?
16. Типы базисов. Диффузные и поляризованные орбитали.
17. В каких случаях используется метод неограниченного Хартри-Фока? Приведите пример.
18. Приведите пример использования опции SPINLOCK.
19. Расчет фононного спектра в программе CRYSTAL. Метод «замороженных» фононов. Какие параметры расчета фононов можно устанавливать? Какой температуре соответствует рассчитанный фононный спектр?
20. Почему расчет зонной структуры YTiO_3 методом Хартри-Фока предсказывает отсутствие щели?
21. Создайте входной файл для расчета кристаллической структуры $\text{PrFe}_3(\text{BO}_3)_4$. Можно ли провести расчет методом ограниченного Хартри-Фока? Как задать высокоспиновое состояние Fe?
22. Как рассчитываются упругие модули в программе CRYSTAL? Создайте входной файл для расчета упругих модулей $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$
23. Гибридные функционалы DFT B3LYP, PBEsol. Для каких соединений они предназначены?
24. Опишите процесс расчета зонной структуры.
25. При оптимизации кристаллической решетки сколько раз рассчитывается самосогласованное поле?
26. Точность расчета. Параметры SHRINK, TOLINTEG, TOLDEE. Какие значения параметров рекомендуется брать для расчета фононного спектра, упругих модулей?

8.3.5. Перечень примерных вопросов для зачета

не предусмотрено

8.3.6. Ресурсы АПИМ УрФУ, СКУД УрФУ для проведения тестового контроля в рамках текущей и промежуточной аттестации

не используются

8.3.7. Ресурсы ФЭПО для проведения независимого тестового контроля

не используются

8.3.8. Интернет-тренажеры

не используются

8.3.9 не используются

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
КООПЕРАТИВНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Перечень сведений о рабочей программе дисциплины	Учетные данные
Модуль Физическое моделирование свойств твердых тел	Код модуля 1126057
Образовательная программа Физика	Код ОП 03.03.02./01.02
Направление подготовки Физика	Код направления и уровня подготовки 03.03.02
Уровень подготовки Бакалавриат	
ФГОС ВО	Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО: 07.08.2014 № 937

Екатеринбург, 2016

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	ФИО	Ученая степень, ученое звание	Должность	Кафедра	Подпись
1	Бабушкин Алексей Николаевич	Д.ф.м.н., профессор	Зав. кафедрой	физики низких температур	

Руководитель модуля

А.В. Германенко

Рекомендовано учебно-методическим советом Института естественных наук

Председатель учебно-методического совета

Е.С. Буянова

Протокол № 49 от 02.06.2016 г.

Согласовано:

Дирекция образовательных программ

2. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ Кооперативные явления в твердых телах

1.2. Аннотация содержания дисциплины

Задача дисциплины - на основе анализа экспериментальных данных дать представления об особенностях энергетического спектра электронов и фононов в металлах и диэлектриках. Обратить особое внимание на взаимосвязь и взаимовлияние составляющих кристалл подсистем. Рассмотреть эффекты, наиболее ярко проявляющиеся при низких температурах, в квазиодномерных кристаллах и органических сверхпроводниках, в частности – инициированные разными факторами (концентрация примесей, давление, магнитное поле) переходы металл-диэлектрик.

Цель - сформировать у студентов представление о проблемах, стоящих перед физикой конденсированного состояния. Научить студентов работе со специальной литературой и применению теоретических знаний к интерпретации результатов экспериментальных исследований применительно к рассматриваемым проблемам.

Дисциплина опирается на модули «Введение в специальность» и «Общая физика», дисциплины из модулей «Структура твердых тел».

1.2. Язык реализации программы – русский

1.3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Результатом обучения является формирование у студента следующих компетенций:

ОК7 - способность к самоорганизации и самообразованию;

ОПК3 - способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач;

ПК1 - способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин;

ПК3 - готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований;

ПК4 - способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин;

ПК5 - способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований;

ДПК2 - способность применять на практике теоретические знания и экспериментальные методы физических исследований в области физики и техники низкотемпературного эксперимента, физики неравновесных процессов в газе, жидкости и твердом теле;

ДПК4 - владеть основами экспериментальных методов теплофизических и электромагнитных измерений.

В результате освоения дисциплины студент должен:

Знать: основные представления о способах описания электронной и колебательной подсистем конденсированных сред, понятие обратной решетки, особенности энергетических спектров электронов и фононов, роль периодичности кристаллической решетки в формировании энергетических спектров кристаллов.

Уметь: ставить и решать задачи экспериментальных исследований и работать со специальной научной литературой и применять теоретические знания к интерпретации результатов экспериментальных исследований.

Демонстрировать навыки:

- описания кристаллической структуры, прямой и обратной решеток,
- анализа энергетических спектров кристаллов.

1.1. Объем дисциплины для очной формы обучения

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины	Распределение объема дисциплин
-------	---------------------	------------------	--------------------------------

				ы по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)*	8
1.	Аудиторные занятия	48	48	48
2.	Лекции	8	8	8
3.	Практические занятия	40	40	40
4.	Лабораторные работы	-	-	-
5.	Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей аттестации	42	7.20	42
6.	Промежуточная аттестация	18	2.33	Э, 18
7.	Общий объем по учебному плану, час.	108	57.53	108
8.	Общий объем по учебному плану, з.е.	3		3

6. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ для очной формы обучения

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины	Содержание
1	Введение	Теплоемкость электронного газа. Плотность электронных состояний. Особенности динамики электронов в кристаллической решетке. Возможность циклического движения электронов в постоянном электрическом поле. Поверхность Ферми.
2	Периодичность кристаллической решетки и зонный спектр электронов	Заполнение зоны Бриллюэна металла электронами. Топология поверхности Ферми металла. Использование понятия поверхности Ферми для описания электронных свойств металлов. Экспериментальные методы построения поверхностей Ферми. Метод Харрисона. Применение метода Харрисона для гипотетического металла с плоской квадратной кристаллической решеткой и валентностями 3 и 4, а также для кубического металла валентностью 1. Заполнение зон электронами. Электронные и дырочные поверхности Ферми. Влияние гидростатического давления на электронный спектр металлов.
3	Кинетическое уравнение Больцмана	Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в металле. Электропроводность металлов. Рассеяние электронов в металлах примесями, фононами, электронами. Температурные зависимости электропроводности и электронной теплопроводности. Правило Матиссена. Изотопическое рассеяние электронов в металлах. Рассеяние электронов в металлах парамагнитными примесями (эффект Кондо). Влияние топологии поверхности Ферми на электропроводность металла. Формула Лифшица.

4	Влияние магнитного поля на электронные свойства металлов	Электронные свойства металлов в магнитном поле. Продольное магнетосопротивление. Сильные и слабые магнитные поля. Влияние топологии поверхности Ферми на электропроводность металлов в магнитном поле. Поперечное магнетосопротивление. Влияние магнитного поля на переход диэлектрика в металлическое состояние.
5	Системы с пониженной размерностью	Модели экситонной сверхпроводимости Литтла и Гинзбурга. Квазиодномерные кристаллы. Особенности одномерного состояния. Переход Пайерлса. Особенности спектра фононов. Солитоны в квазиодномерных кристаллах. Органические сверхпроводники. История обнаружения сверхпроводимости в органических соединениях. Явление «химического» сжатия.

7. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ

3.2. Распределение аудиторной нагрузки и мероприятий самостоятельной работы по разделам дисциплины для очной формы обучения

8. ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ, САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

4.3. Лабораторные работы Не предусмотрено

4.4. Практические занятия

Код раздела, темы	Номер занятия	Тема занятия	Время на проведение занятия (час.)
1	1	Введение	2
2	2-6	Периодичность кристаллической решетки и зонный спектр электронов	10
3	7-11	Кинетическое уравнение Больцмана	9
4	11-15	Влияние магнитного поля на электронные свойства металлов	9
5	16-20	Системы с пониженной размерностью	10

Всего: 40

4.3. Примерная тематика самостоятельной работы

4.3.4. Примерный перечень тем домашних работ

Раздел 2. Домашняя работа №1. Построение обратной решетки для кристаллов различных сингоний

Домашняя работа №2. Построение поверхности Ферми для металлов с валентностью от 1 до 4

Раздел 3. Домашняя работа №1. Механизмы рассеяния носителей заряда

4.3.5. Примерный перечень тем графических работ

Не предусмотрено

4.3.6. Примерный перечень тем рефератов (эссе, творческих работ)

Не предусмотрено

4.3.4. Примерная тематика индивидуальных или групповых проектов

Не предусмотрено

4.3.9. Примерный перечень тем расчетных работ (программных продуктов)

Не предусмотрено

4.3.10. Примерный перечень тем расчетно-графических работ

Не предусмотрено

4.3.11. Примерный перечень тем курсовых проектов (курсовых работ)

Не предусмотрено

4.3.12. Примерная тематика контрольных работ

Не предусмотрено

4.3.9. Примерная тематика коллоквиумов

Не предусмотрено

5. СООТНОШЕНИЕ РАЗДЕЛОВ, ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРИМЕНЯЕМЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ

Код раздела, темы дисциплины	Активные методы обучения					Дистанционные образовательные технологии и электронное обучение					
	Проектная работа	Кейс-анализ	Деловые игры	Проблемное обучение	Командная работа	Другие (указать, какие)	Сетевые учебные курсы	Виртуальные практикумы и тренажеры	Вебинары и видеоконференции	Асинхронные web-конференции и семинары	Совместная работа и разработка контента
Введение					=						
Периодичность кристаллической решетки и зонный спектр электронов				=							
Кинетическое уравнение Больцмана				=	=						
Влияние магнитного поля на электронные свойства металлов				=							
Системы с пониженной размерностью				=	=						

6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ (Приложение 1)

7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ (Приложение 2)

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (Приложение 3)

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1.Рекомендуемая литература

9.1. Рекомендуемая литература

9.1.1. Основная литература

1. Брандт Н.Б., Чудинов С.М. Электроны и фононы в металлах. М.: Изд-во МГУ, 1990.
2. Марг Н., Паринелло М. Коллективные эффекты в твердых телах и жидкостях. М.: Мир, 1986.
3. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М.: Мир, 1981.
4. Николаев И.Н, Маймистов А.И. Сборник задач по курсу Физика твердого тела. М.: МИФИ, 2009.- 60с.
5. Гуртов, В.А. Физика твердого тела для инженеров : учебное пособие / В.А. Гуртов, Р.Н. Осауленко ; науч. ред. Л.А. Алешина. - 2-е изд., испр. и доп. - Москва : Техносфера, 2012. - 560 с. - (Мир физики и техники). - ISBN 978-5-94836-327-1 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=233466>

9.1.2. Дополнительная литература

1. П.В. Павлов, А.Ф. Хохлов. Физика твердого тела. М., «Высшая школа», 1985.
2. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. М., «Наука», 1978.
3. А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., «Наука», 1978.
4. У.Харрисон. Теория твердого тела. М.: Мир, 1972. – 616 с.
5. Фомин, Д.В. Экспериментальные методы физики твердого тела : учебное пособие / Д.В. Фомин. - Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2014. - 186 с. : ил., схем., табл. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-4475-2829-4 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=259074>

9.2.Методические разработки

Не используются

9.3.Программное обеспечение

Не используется

9.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Открытая база данных по кристаллографии. <http://www.crystallography.net/>

9.5. Электронные образовательные ресурсы

А.Н.Бабушкин. Введение в структурный анализ. https://learn.urfu.ru/subject/index/card/subject_id/2819

Кристаллография для начинающих. <http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index-en.html>
Crystallography & Struc. Biol. c/ Serrano 119 E-28006 Madrid (Spain)

Учебник по кристаллической структуре. <http://www.aprendelo.com/rec/crystal-structure-tutorials.html>

Symmetry and Space Group Tutorial by Jerry P. Jasinski and Bruce M. Foxman
<http://people.brandeis.edu/~foxman1/teaching/indexpr.html>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием

Имеются аудитории, оснащенные мультимедийной техникой

6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Весовой коэффициент значимости дисциплины – 1

6.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.5		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Посещение лекций (8)	8, 1-8	16
Мини опросы по темам лекций	8, 1-8	84
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.6		
Промежуточная аттестация по лекциям – зачет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.4		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.5		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Посещение практических /семинарских занятий (9)	8, 1-8	18
Домашние работы	8, 1-8	82
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – 1.0		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрена		
3. Лабораторные занятия: не предусмотрены		
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – 0		

6.3. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы не предусмотрена

6.4. Коэффициент значимости семестровых результатов освоения дисциплины

Порядковый номер семестра по учебному плану, в котором осваивается дисциплина	Коэффициент значимости результатов освоения дисциплины в семестре
Семестр 8	1

ПРИЛОЖЕНИЕ 2
к рабочей программе дисциплины

7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО <http://fepo.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте Интернет-тренажеры <http://training.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

В связи с отсутствием Дисциплины и ее аналогов, по которым возможно тестирование, на сайтах ФЭПО, Интернет-тренажеры и портале СМУДС УрФУ, тестирование в рамках НТК не проводится.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3
к рабочей программе дисциплины

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

8.1. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ В РАМКАХ БРС

В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре критерии оценивания достижений студентов по каждому контрольно-оценочному мероприятию. Система критериев оценивания, как и при проведении промежуточной аттестации по модулю, опирается на три уровня освоения компонентов компетенций: пороговый, повышенный, высокий.

Компоненты компетенций	Признаки уровня освоения компонентов компетенций		
	пороговый	повышенный	высокий
Знания	Студент демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем самостоятельного воспроизведения и применения информации.	Студент демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	Студент может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.
Умения	Студент умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач,	Студент умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе	Студент умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое

	требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	использование умений (технологий)
Личностные качества	Студент имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Студент имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Студент имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

8.2. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ

НТК не предусмотрен

8.3. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.3.1. Примерные задания для проведения мини-контрольных в рамках учебных занятий Теплоемкость электронного газа.

Поверхность Ферми.

Метод Харрисона.

Электронные и дырочные поверхности Ферми.

Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в металле.

Рассеяние электронов в металлах примесями, фононами, электронами.

Температурные зависимости электропроводности и электронной теплопроводности.

Правило Матиссена.

Продольное магнетосопротивление.

Сильные и слабые магнитные поля.

Поперечное магнетосопротивление.

Модели экситонной сверхпроводимости Литтла и Гинзбурга.

Квазиодномерные кристаллы.

Переход Пайерлса.

Явление «химического» сжатия.

8.3.2. Примерные контрольные задачи в рамках учебных занятий

Не предусмотрено

8.3.3. Примерные контрольные кейсы

Не предусмотрено

8.3.4. Перечень примерных вопросов для зачета

Не предусмотрено

8.3.5. Перечень примерных вопросов для экзамена

Теплоемкость электронного газа. Плотность электронных состояний. Особенности динамики электронов в кристаллической решетке. Возможность циклического движения электронов в постоянном электрическом поле. Поверхность Ферми.

Заполнение зоны Бриллюэна металла электронами. Топология поверхности Ферми металла.

Использование понятия поверхности Ферми для описания электронных свойств металлов.

Экспериментальные методы построения поверхностей Ферми. Метод Харрисона.

Применение метода Харрисона для гипотетического металла с плоской квадратной кристаллической решеткой и валентностями 3 и 4, а также для кубического металла валентностью 1. Заполнение зон электронами. Электронные и дырочные поверхности Ферми. Влияние гидростатического давления на электронный спектр металлов. Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в металле. Электропроводность металлов. Рассеяние электронов в металлах примесями, фононами, электронами. Температурные зависимости электропроводности и электронной теплопроводности. Правило Матиссена. Изотопическое рассеяние электронов в металлах. Рассеяние электронов в металлах парамагнитными примесями (эффект Кондо). Влияние топологии поверхности Ферми на электропроводность металла. Формула Лифшица. Электронные свойства металлов в магнитном поле. Продольное магнетосопротивление. Сильные и слабые магнитные поля. Влияние топологии поверхности Ферми на электропроводность металлов в магнитном поле. Поперечное магнетосопротивление. Влияние магнитного поля на переход диэлектрика в металлическое состояние. Модели экситонной сверхпроводимости Литтла и Гинзбурга. Квазиодномерные кристаллы. Особенности одномерного состояния. Переход Пайерлса. Особенности спектра фононов. Солитоны в квазиодномерных кристаллах. Органические сверхпроводники. История обнаружения сверхпроводимости в органических соединениях. Явление «химического» сжатия.

1. Построить первую зону Бриллюэна для:
 - а) линейной одномерной решетки, с параметром a ;
 - б) двумерной квадратной решетки с параметром a ;
 - в) двумерной косоугольной решетки с основными векторами $\mathbf{a}=(2, 0)$, $\mathbf{b}=(1, 2)$.
2. Показать, что вектор обратной решетки \mathbf{g} перпендикулярен некоторому множеству плоскостей прямой решетки. Определить расстояние между этими плоскостями.
 1. Найти векторы обратной решетки кристалла кальцита CaCO_3 , имеющего параметры $a = 0.636 \text{ нм}$, $\alpha = 46^\circ$.
3. Построить поверхность Ферми металла с валентностью 2. Проанализировать топологию полученной поверхности
4. Проанализировать температурную зависимость электропроводности металла с точки зрения механизмов рассеяния носителей заряда.

8.3.6. Ресурсы АПИМ УрФУ, СКУД УрФУ для проведения тестового контроля в рамках текущей и промежуточной аттестации

Не используются

8.3.7. Ресурсы ФЭПО для проведения независимого тестового контроля

Не используются

8.3.8. Интернет-тренажеры

Не используются