

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор по образовательной деятельности КФУ  
проф. Таюрский Д.А.

"\_\_" \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

## **Программа дисциплины**

Теория примесных центров в кристаллах

Направление подготовки: 03.04.03 - Радиофизика

Профиль подготовки: Физика магнитных явлений

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

## Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
  - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
  - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) главный научный сотрудник, д.н. (профессор) Еремин М.В. (НИЛ магнитной радиоспектроскопии и квантовой электроники им. С.А. Альтшулера, Кафедра квантовой электроники и радиоспектроскопии), Mikhail.Eremin@kpfu.ru

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-3	Способность к свободному владению знаниями фундаментальных разделов физики и радиофизики, необходимых для решения научно-исследовательских задач
ПК-2	Способность самостоятельно ставить научные задачи в области физики и радиофизики (в соответствии с профилем подготовки) и решать их с использованием современного оборудования и новейшего отечественного и зарубежного опыта

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

современные представления об электронном строении примесных центров в кристаллах

Должен уметь:

навыки в построении энергетической схемы уровней и уметь рассчитывать магнитные и спектроскопические свойства различных примесных центров

Должен владеть:

владеть современными методами анализа спектроскопических и динамических свойств и информацией об актуальных направлениях исследований.

Должен демонстрировать способность и готовность:

Способность решать задачи современных исследований и быть готовым к построению новых микроскопических моделей.

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ОД.7 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 03.04.03 "Радиофизика (Физика магнитных явлений)" и относится к обязательным дисциплинам.

Осваивается на 1 курсе в 2 семестре.

## 3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 28 часа(ов), в том числе лекции - 14 часа(ов), практические занятия - 14 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 44 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет во 2 семестре.

## 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

**4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)**

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Взаимодействие Ван-дер-Ваальса.	2	0	0	0	4
2.	Тема 2. Ионные кристаллы. Обменное взаимодействие.	2	4	4	0	10
3.	Тема 3. Ковалентная связь. Метод молекулярных орбиталей	2	2	2	0	8
4.	Тема 4. Лигандная сверхтоная структура	2	2	2	0	6
5.	Тема 5. Редукция параметров Слэтера в примесных центрах	2	2	2	0	6
6.	Тема 6. Эффект Яна-Теллера	2	4	4	0	10
Итого			14	14	0	44

**4.2 Содержание дисциплины (модуля)****Тема 1. Введение. Взаимодействие Ван-дер-Ваальса.**

Уравнение Ван-дер-Ваальса для газов. Параметры, учитывающие размер молекул и их взаимодействие между собой. Поярзуемость атомов. Уравнение Клаузиуса-Моссоти. Квантовая теория взаимодействия. Приближение, позволяющее вычислить ряд теории возмущений. Соотношение между параметром взаимодействия и потенциалами ионизации.

**Тема 2. Ионные кристаллы. Обменное взаимодействие.**

Прямое обменное взаимодействие. Ортогонализация функций по методу Боголюбова Левдина. Эффективный оператор взаимодействия спинов. Задача Дирака. Модель обменных зарядов в теории кристаллического поля. Построение эффективного оператора обменного взаимодействия для многоэлектронных атомов. Его свойства.

**Тема 3. Ковалентная связь. Метод молекулярных орбиталей**

Ион водорода. Ковалентная связь как следствие прескоков электрона с одного центра на другой. Физическая картина причины устойчивости иона водорода. Связывающие и антисвязывающие состояния в методе молекулярных орбиталей. Параметры ковалентности. Методы расчета двухцентровых интегралов. Молекулярные орбитали октаэдрических комплексов.

**Тема 4. Лигандная сверхтоная структура**

Влияние ковалентной связи на параметры лигандной сверхтонкой структуры ионов группы железа. Расчет параметров перенесенной спиновой плотности в октаэдрических центрах ионов хрома, марганца и никеля. Редкоземельные соединения. Механизмы переноса спиновой плотности на ядра соседних ионов. Суперперенесенные сверхтонкие взаимодействия.

**Тема 5. Редукция параметров Слэтера в примесных центрах**

Теория возмущений на неортогональных функциях. Ортогонализация функций. Основы метода приближенного вторичного квантования в методе наложения конфигураций с переносом заряда от лигандов в незаполненные оболочки ионов редкоземельных элементов. Метод валентных связей. Квантовая теория редукции параметров Слэтера в примесных центрах с незаполненными 3d-оболочками.

**Тема 6. Эффект Яна-Теллера**

Электронно колебательное взаимодействие. Вид оператора в случае двухкратного орбитального вырождения. Роль ангармонических поправок к упругой энергии. Статический эффект Яна-Теллера. Параметры электронно колебательной связи. Адиабатические потенциалы. Динамический эффект Яна-Теллера. Модель центра с двойным обменом.

**5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)**

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

архив публикаций по физике - <http://xxx.lanl.gov/find/cond-mat>

база данных о структуре кристаллов - <http://www.crystallography.net>

методические пособия - [http://www.kpfu.ru/main\\_page?p\\_sub=8205](http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8205)

## **6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)**

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модуля).

## **7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы.

Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

## **8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

Информационный бюллетень - <http://perst.issp.ras.ru>

методические пособия - <http://kpfu.ru/physics/struktura/kafedry/kafedra-teoreticheskoy-fiziki/metodicheskie-materialy>

Электронный архив публикаций - <http://xxx.lanl.gov/find/cond-mat>

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	Обратить внимание на важную роль квантово-механических эффектов в формировании спектроскопических свойств примесных центров. Овладеть приемами учета ковалентных эффектов в расчетах уровней энергии и волновых функций примесных центров. Изучить основные механизмы обменного взаимодействия в парах магнитных ионов и знать способы их измерений.
практические занятия	овладеть методом расчета параметров перенесенного сверхтонкого взаимодействия на ядра соседних с магнитным ионом лигандов ( фторов ) . Примесные центры ионов ванадия, никеля или марганца в октаэдрических комплексах. Вывести формулы для спиновых плотностей через параметры ковалентностей связей металл-лиганд .
самостоятельная работа	Освоить методы построения волновых функций в схеме сильного кристаллического поля и с последующим учетом эффектов химической связи по методу молекулярных орбиталей. Овладеть методами расчета двуцентровых интегралов с использованием гауссовского типа орбиталей. Вывести формулы для расчета заданного типа интеграла.
зачет	Подготовиться к ответу на следующие вопросы 1. Взаимодействие Ван дер Ваальса 2. Обменное взаимодействие. Модель двух центров и двух электронов. 3. Модель обменных зарядов в теории кристаллического поля 4. Суперобменное взаимодействие . Механизм Андерсона. 5. Анизотропное обменное взаимодействие симметричного типа. 6. Антисимметричное обменное взаимодействие Дзялошинского -Мория 7. Метод молекулярных орбиталей 8. Лигандная сверхтонкая ( суперсверхтонкая ) структура 9. Статический эффект Яна -Теллера 10. Динамический эффект Яна -Теллера.Вибронные состояния 11. Факторы вибронной редукции.

#### **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

#### **11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Специализированная лаборатория.

#### **12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья**

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;

- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 03.04.03 "Радиофизика" и магистерской программе "Физика магнитных явлений".



Приложение 2  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.В.ОД.7 Теория примесных центров в кристаллах

**Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Направление подготовки: 03.04.03 - Радиофизика

Профиль подготовки: Физика магнитных явлений

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

**Основная литература:**

1. Давыдов А.С. Квантовая механика: учебное пособие. [Электронный ресурс] - СПб: БХВ Петербург, 2011. - 704 с. Режим доступа: - <http://znanium.com/bookread.php?book=351130>
2. Кочелаев, Б.И. Квантовая теория: конспект лекций / Б. И. Кочелаев; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, [2-е изд., перераб., доп. и испр.].-Казань: [Казанский университет], 2013.-222 с.
3. Микроскопические модели в конденсированных средах. М. В. Еремин, Учебное пособие КГУ, 2011, 112 с. [http://kpfu.ru/docs/F1043614157/Eremin\\_Posobie\\_2011.doc](http://kpfu.ru/docs/F1043614157/Eremin_Posobie_2011.doc)

**Дополнительная литература:**

1. Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных групп, Том. II / А. Абрагам, Б. Блيني, Том. II, Мир, Москва, 1973, 349с
  2. Малкин Б.З. Квантовая теория парамагнетизма. Конспект лекций. Из-во КФУ, 2006, 83 с.
- Скачать: [http://kpfu.ru/portal/docs/F800871619/quant\\_theory\\_param.pdf](http://kpfu.ru/portal/docs/F800871619/quant_theory_param.pdf)



Приложение 3  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.В.ОД.7 Теория примесных центров в кристаллах

**Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

Направление подготовки: 03.04.03 - Радиофизика

Профиль подготовки: Физика магнитных явлений

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.