

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



подписано электронно-цифровой подписью

**Программа дисциплины**  
**Теория кристаллического поля БЗ.В.8**

Направление подготовки: 011800.62 - Радиофизика

Профиль подготовки: Физика магнитных явлений

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Еремин М.В.

**Рецензент(ы):**

Никитин С.И.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Тагиров М. С.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_г

Регистрационный No 6128914

Казань

2014

## **Содержание**

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Еремин М.В. Кафедра квантовой электроники и радиоспектроскопии Отделение радиофизики и информационных систем , Mikhail.Eremin@kpfu.ru

## 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины БЗ.В.8 "Теория кристаллического поля" являются овладеть знаниями накопленным в мировой литературе об энергетической структуре ионов переходных металлов в кристаллах, о пространственном распределении электронных облаков, определяющих разнообразие физических свойств веществ, об основных микроскопических моделях теории кристаллического поля.

## 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " БЗ.В.8 Профессиональный" основной образовательной программы 011800.62 Радиофизика и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина БЗ.В.8 "Теория кристаллического поля" входит в профессиональный цикл (блок БЗ) бакалавров по направлению 011200.62 - "Физика" и является обязательной для изучения.

Изучение данной дисциплины базируется на подготовке по физике и математике в рамках Государственного стандарта общего образования, дисциплин подготовки бакалавров по направлению 011200.62 - "Физика": БЗ.Б.5 "Атомная и ядерная физика", БЗ.Б.4 "Квантовая механика".

Дисциплина является базовой для последующего изучения дисциплин по профилю "Радиоспектроскопия". Она предшествует курсам (БЗ.В.9 "Спинтроника", ВЗ.ДВ2 "Основы магнитного резонанса", БЗ.ДВ6 "Физические основы ОКГ", для выполнения лабораторных работ в рамках занятий по дисциплине БЗ.ДВ3 "Лаборатория по спектроскопии ", а также изучения дисциплин БЗ.Б.14 "Квантовая радиофизика ".

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

| Шифр компетенции                       | Расшифровка приобретаемой компетенции  |
|--|--|
| ОК-1<br>(общекультурные компетенции)   | способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук                      |
| ПК-1<br>(профессиональные компетенции) | способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач   |
| ПК-2<br>(профессиональные компетенции) | способность применять на практике базовые профессиональные навыки  |
| ПК-4<br>(профессиональные компетенции) | способностью эксплуатировать современную физическую аппаратуру и оборудование  |
| ПК-5<br>(профессиональные компетенции) | способностью применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов физических исследований (в соответствии с профилем подготовки) |

| Шифр компетенции                      | Расшифровка приобретаемой компетенции   |
|---------------------------------------|---|
| ОК-10<br>(общекультурные компетенции) | способностью самостоятельно приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии |

В результате освоения дисциплины студент:

- должен знать:  
современные методы расчета энергетических схем уровней энергии ионов переходных групп в кристаллах
- должен уметь:  
современные методы расчета энергетических схем уровней энергии ионов переходных групп в кристаллах
- должен владеть:  
- навыками расчетов в схемах сильного, среднего и слабого кристаллических полей
- должен демонстрировать способность и готовность:  
-проводить расчеты энергетической схемы уровней и волновых функций примесных ионов в кристаллах

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

| N  | Раздел Дисциплины/ Модуля  | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) |                      |                     | Текущие формы контроля |
|----|--|---------|-----------------|--|----------------------|---------------------|------------------------|
|    |  |         |                 | Лекции   | Практические занятия | Лабораторные работы |                        |
| 1. | Тема 1. Введение. Теория свободного атома.                       | 7       | 1               | 2  | 0                    | 0                   |                        |
| 3. | Тема 3. Остаточное электростатическое взаимодействие электронов. | 7       | 2               | 2  | 0                    | 2                   | домашнее задание       |
| 5. | Тема 5. Волновые функции термов.                                 | 7       | 4               | 4  | 0                    | 2                   | контрольная работа     |

| N   | Раздел<br>Дисциплины/<br>Модуля   | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды и часы<br>аудиторной работы,<br>их трудоемкость<br>(в часах) |                         |                        | Текущие формы<br>контроля |
|-----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
|     |   |         |                    | Лекции  | Практические<br>занятия | Лабораторные<br>работы |                           |
| 6.  | Тема 6. Расчет матричных элементов остаточного электростатического взаимодействия .                   | 7       | 6                  | 4   | 0                       | 2                      | домашнее задание          |
| 7.  | Тема 7. Оператор энергии спин-орбитального взаимодействия.  | 7       | 7                  | 4   | 0                       | 2                      | домашнее задание          |
| 8.  | Тема 8. Оператор энергии кристаллического поля.   | 7       | 8                  | 4   | 0                       | 2                      |                           |
| 9.  | Тема 9. Схема сильного кристаллического поля.   | 7       | 9                  | 2   | 0                       | 2                      |                           |
| 10. | Тема 10. Схема промежуточного кристаллического поля.  | 7       | 10                 | 2   | 0                       | 0                      | домашнее задание          |
| 11. | Тема 11. Схема слабого кристаллического поля.   | 7       | 11                 | 4   | 0                       | 2                      | контрольная работа        |
| 12. | Тема 12. Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле.     | 7       | 12                 | 4   | 0                       | 2                      | домашнее задание          |
| 13. | Тема 13. Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле. | 7       | 13                 | 4   | 0                       | 2                      | домашнее задание          |
| .   | Тема . Итоговая форма контроля  | 7       |                    | 0   | 0                       | 0                      | зачет                     |
|     | Итого   |         |                    | 36  | 0                       | 18                     |                           |

## 4.2 Содержание дисциплины

### Тема 1. Введение. Теория свободного атома.

#### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Приближение центрального поля. Электронные конфигурации. Слетеровские детерминанты.

### Тема 3. Остаточное электростатическое взаимодействие электронов.

#### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Волновые функции термов. Классификация повторяющихся термов по родонаначальному числу.

**лабораторная работа (2 часа(ов)):**

Термы электронных конфигураций. Пример построения волновых функций.

**Тема 5. Волновые функции термов.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Классификация повторяющихся термов по родонаначальному числу.

**лабораторная работа (2 часа(ов)):**

Построение волновых функций

**Тема 6. Расчет матричных элементов остаточного электростатического взаимодействия .**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Метод диагональных сумм. Пример расчета для конфигурации из двух d -электронов.

**лабораторная работа (2 часа(ов)):**

Пример расчета для конфигурации из трех d -электронов.

**Тема 7. Оператор энергии спин-орбитального взаимодействия.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Схема квантования по полному моменту количества движения. Прямые и обращенные мультиплеты. Правило интервалов Ланде .

**лабораторная работа (2 часа(ов)):**

Построение волновых функций мультиплетов.

**Тема 8. Оператор энергии кристаллического поля.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Модели точечных зарядов и независимых валентных связей в теории кристаллического поля.

**лабораторная работа (2 часа(ов)):**

Оценки значений параметров кристаллического поля для октаэдрической, тетраэдрической и кубической координаций переходных ионов.

**Тема 9. Схема сильного кристаллического поля.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Пространственное распределение электронных облаков. Определение основных состояний ионов. Низкоспиновые состояния комплексов.

**лабораторная работа (2 часа(ов)):**

Волновые функции Низкоспиновых комплексов.

**Тема 10. Схема промежуточного кристаллического поля.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Схема промежуточного кристаллического поля. Диаграммы Сугано-Танабе.

**Тема 11. Схема слабого кристаллического поля.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Схема слабого кристаллического поля. Основные методики расчета матричных элементов. Техника неприводимых тензорных операторов и метод операторов эквивалентов.

**лабораторная работа (2 часа(ов)):**

Эффекты смешивания состояний различных термов.

**Тема 12. Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле. Статический эффект Яна-Теллера..

**лабораторная работа (2 часа(ов)):**

Расчет компонент g -тензора.

### Тема 13. Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле.

#### лекционное занятие (4 часа(ов)):

Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле.

#### лабораторная работа (2 часа(ов)):

Расчет компонент  $g$  - тензора в схеме квантования SLJM .

### 4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

| N     | Раздел Дисциплины   | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|-------|---|---------|-----------------|---------------------------------------|------------------------|---------------------------------------|
| 3.    | Тема 3. Остаточное электростатическое взаимодействие электронов.                                      | 7       | 2               | подготовка домашнего задания          | 2                      | домашнее задание                      |
| 5.    | Тема 5. Волновые функции термов.  | 7       | 4               | подготовка домашнего задания          | 6                      | домашнее задание                      |
| 6.    | Тема 6. Расчет матричных элементов остаточного электростатического взаимодействия .                   | 7       | 6               | подготовка домашнего задания          | 10                     | домашнее задание                      |
| 7.    | Тема 7. Оператор энергии спин-орбитального взаимодействия.  | 7       | 7               | подготовка домашнего задания          | 8                      | домашнее задание                      |
| 10.   | Тема 10. Схема промежуточного кристаллического поля.  | 7       | 10              | подготовка домашнего задания          | 8                      | домашнее задание                      |
| 11.   | Тема 11. Схема слабого кристаллического поля.   | 7       | 11              | подготовка к контрольной работе       | 8                      | контрольная работа                    |
| 12.   | Тема 12. Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле.     | 7       | 12              | подготовка домашнего задания          | 6                      | домашнее задание                      |
| 13.   | Тема 13. Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле. | 7       | 13              | подготовка домашнего задания          | 6                      | домашнее задание                      |
| Итого |   |         |                 |                                       | 54                     |                                       |



## **5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения**

Используются следующие форм учебной работы: лекции, конкретные примеры практических расчетов , самостоятельная работа студента (выполнение индивидуальных домашних заданий), консультации.

## **6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

### **Тема 1. Введение. Теория свободного атома.**

### **Тема 3. Остаточное электростатическое взаимодействие электронов.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Определение возможных термов у конфигураций из эквивалентных электронов

### **Тема 5. Волновые функции термов.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Матричные элементы операторов момента количества движения

### **Тема 6. Расчет матричных элементов остаточного электростатического взаимодействия .**

домашнее задание , примерные вопросы:

Определение волновых функций основных термов в схеме квантования  $L, S, M_S, M_L$

### **Тема 7. Оператор энергии спин-орбитального взаимодействия.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Определение волновых функций мультиплетов в схеме квантования  $SLJM$

### **Тема 8. Оператор энергии кристаллического поля.**

### **Тема 9. Схема сильного кристаллического поля.**

### **Тема 10. Схема промежуточного кристаллического поля.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет энергий термов. Определение параметров Слетера по экспериментальным данным

### **Тема 11. Схема слабого кристаллического поля.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Построение волновых функций в различных схемах квантования

### **Тема 12. Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет расщеплений термов в кристаллическом поле с кубической симметрией

### **Тема 13. Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет компонент  $g$ -тензора для основного состояния

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету

1. Приближение центрального поля
2. Термы и волновые функции
3. Тонкая структура термов. Построение волновых функций мультиплетов
4. Оператор кристаллического поля. Параметры кристаллического поля.
5. Расщепления кристаллическим полем . Схемы слабого и сильного кристаллических полей.
6. Методы Рака и метод эквивалентных операторов



7. Теорема Крамерса. Расчет компонент g-тензора
  8. Теоретико-групповая классификация состояний в кристаллическом поле.
- Вопросы способствуя развитию компетенций; ОК-1,10, ПК-1,2,3,5.

### 7.1. Основная литература:

1. Леушин, А. М. Теория оптических спектров, часть 1 Классические методы/ А.М.Леушин- Казань , Казанский университет. - 2007. - 107 с.
2. Леушин, А. М. Теория оптических спектров, часть 2 Операторная техника/ А.М.Леушин - Казань , Казанский университет. - 2008. - 190 с.
3. Еремин, М.В. Микроскопические модели в конденсированных средах / М.В.Еремин - Казань, Казанский университет. - 2011. - 111 с.

### 7.2. Дополнительная литература:

1. Альтшулер С. А., Козырев Б.М. Электронный парамагнитный резонанс, М.: Наука, 1972.
2. Абрагам А. Блيني Б. Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных групп, М.: Мир. 1973

### 7.3. Интернет-ресурсы:

архив публикаций по физике - <http://xxx.lanl.gov/find/cond-mat>  
Данные о структуре кристаллов в базе данных - <http://www.crystallography.net>  
Программа для расчета 3-j , 6-j и 9-j символов - <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/369j.html>  
Таблицы 3-j символов - <http://www.svengato.com/threej.html>  
Теория оптических спектров - [http://www.kpfu.ru/main\\_page?p\\_sub=8205](http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8205)

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Теория кристаллического поля" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "БиблиоРоссика", доступ к которой предоставлен студентам. В ЭБС "БиблиоРоссика" представлены коллекции актуальной научной и учебной литературы по гуманитарным наукам, включающие в себя публикации ведущих российских издательств гуманитарной литературы, издания на английском языке ведущих американских и европейских издательств, а также редкие и малотиражные издания российских региональных вузов. ЭБС "БиблиоРоссика" обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. 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.

Доска, мел. интернет

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011800.62 "Радиофизика" и профилю подготовки Физика магнитных явлений .

Автор(ы):

Еремин М.В. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Никитин С.И. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.