

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Тагировский Да



20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Теория примесных центров в кристаллах М2.ДВ.4

Направление подготовки: 011200.68 - Физика

Профиль подготовки: Физика конденсированного состояния

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Еремин М.В.

Рецензент(ы):

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Тагиров М. С.

Протокол заседания кафедры № ____ от "____" ____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК № ____ от "____" ____ 201__ г

Регистрационный № 610316

Казань

2016

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 "Теория примесных центров в кристаллах" являются изучение современных представлений о природе и электронном строении примесных центров в кристаллах, получение навыков в построении энергетической схемы уровней, знакомство с современными методами описания их спектроскопических и динамических свойств, ознакомление с основами экспериментальных методик по применению таких систем в технических приложениях.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.ДВ.4 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.68 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Дисциплина "Теория примесных центров в кристаллах" входит в блок "Вариативная часть" профессионального цикла подготовки магистров по направлению 011800.68 - "Радиофизика" и является необходимой для изучения в рамках магистерской программы "Физика магнитных явлений" (блок М2).

Изучение данной дисциплины базируется на бакалаврской подготовке по направлению 011800.62 - "Радиофизика" по курсам высшей математики из цикла "Математический и естественнонаучный цикл", по курсам общей физики (разделы: "Молекулярная физика", "Электричество и магнетизм", "Атомная физика", "Физика атомного ядра и элементарных частиц"), по курсам теоретической физики (разделы: "Электродинамика", "Квантовая механика", "Термодинамика. Статистическая физика. Физическая кинетика"), по курсу "Физика магнитных явлений".

Основные положения дисциплины должны быть использованы студентами в дальнейшем при прохождении научно-исследовательской практики (М.3) и в научно-исследовательской работе в рамках магистерской программы "Физика магнитных явлений".

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук
ОК-5 (общекультурные компетенции)	способность порождать новые идеи (креативность)
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способность применять на практике базовые профессиональные навыки

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-7 (профессиональные компетенции)	способность свободно владеть профессиональными знаниями для анализа и синтеза физической информации (в соответствии с профилем подготовки)

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- современный теоретический уровень описания энергетической схемы уровней примесных центров с незаполненными 3d- и 4f- оболочками;
- теоретические основы современных экспериментальных методов исследования тонкой и сверхтонкой структуры магнитных центров;
- современные экспериментальные результаты по магнитным свойствам твердых тел.

2. должен уметь:

применять современные методы анализа магнитных свойств, включая особенности электронно-ядерных и электронно-колебательных взаимодействий.

3. должен владеть:

навыками системного научного анализа проблем (как природных, так и профессиональных) различного уровня сложности;

- навыками работы с основными теоретическими методами описания, такими как метод эффективных спиновых операторов и метод молекулярных орбиталей.

Знать:

- современный теоретический уровень описания энергетической схемы уровней примесных центров с незаполненными 3d- и 4f- оболочками;

- теоретические основы современных экспериментальных методов исследования тонкой и сверхтонкой структуры магнитных центров;

- современные экспериментальные результаты по магнитным свойствам твердых тел.

Уметь:

- применять современные методы анализа магнитных свойств, включая особенности электронно-ядерных и электронно-колебательных взаимодействий.

Владеть:

- навыками системного научного анализа проблем (как природных, так и профессиональных) различного уровня сложности;

- навыками работы с основными теоретическими методами описания, такими как метод эффективных спиновых операторов и метод молекулярных орбиталей.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

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

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 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. Взаимодействие Ван-дер-Ваальса.	2	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Обменное взаимодействие. Ортогонализация волновых функций по Боголюбову- Левдину. Эффективный оператор.	2	2-5	4	4	0	письменное домашнее задание
3.	Тема 3. Ковалентная связь. Метод молекулярных орбиталей	2	6-8	2	4	0	письменное домашнее задание
4.	Тема 4. Лигандная сверхтонкая структура	2	9-11	2	4	0	презентация
5.	Тема 5. Редукция параметров Слэтера в примесных центрах	2	12	2	2	0	коллоквиум
6.	Тема 6. Эффект Яна-Теллера	2	13-15	4	2	0	письменное домашнее задание
	Итого			16	16	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Взаимодействие Ван-дер-Ваальса.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Взаимодействие Ван-дер-Ваальса. Поляризуемость атомов.

Тема 2. Обменное взаимодействие. Ортогонализация волновых функций по Боголюбову- Левдину. Эффективный оператор.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Ионные кристаллы. Потенциалы Борна _Майера. Квантовое описание. Оператор обменной антисимметризации и его свойства. Ортогонализация волновых функций по Боголюбову-Левдину. Эффективный оператор прямого обменного взаимодействия.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Представление оператора перестановок через спиновые операторы. Техника расчета интегралов перекрывания. Модель обменных каналов

Тема 3. Ковалентная связь. Метод молекулярных орбиталей

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Ион молекулы водорода. Ковалентная связь. Метод молекулярных орбиталей.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Получение молекулярных орбиталей для октаэдрических комплексов. Редукция орбитального момента в примесных центрах.

Тема 4. Лигандная сверхтонкая структура**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Механизмы формирования лигандной сверхтонкой структуры. Параметры перенесенной плотности.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Расчет параметров спиновой плотности ионов в октаэдрических комплексах.

Тема 5. Редукция параметров Слэтера в примесных центрах**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Метод наложения конфигураций в теории примесных центров. Редукция параметров Слэтера при внедрении ионов в вещество.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Модель обменных зарядов в теории кристаллического поля

Тема 6. Эффект Яна-Теллера**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Электронно-колебательное взаимодействие . Адиабатические потенциалы. Вибронные состояния. Статический и динамический случаи.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Туннельные расщепления. Факторы вибронной редукции.

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
1.	Тема 1. Введение. Взаимодействие Ван-дер-Ваальса.	2	1	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
2.	Тема 2. Обменное взаимодействие. Ортогонализация волновых функций по Боголюбову- Левдину. Эффективный оператор.	2	2-5	подготовка домашнего задания	12	домашнее задание
3.	Тема 3. Ковалентная связь. Метод молекулярных орбиталей	2	6-8	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
4.	Тема 4. Лигандная сверхтонкая структура	2	9-11	подготовка к презентации	6	презентация
5.	Тема 5. Редукция параметров Слэтера в примесных центрах	2	12	подготовка к коллоквиуму	10	коллоквиум
6.	Тема 6. Эффект Яна-Теллера	2	13-15	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
Итого					40	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

лекции, практические занятия, 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. Взаимодействие Ван-дер-Ваальса.

домашнее задание, примерные вопросы:

Методы экспериментального определения потенциалов Борна-Майера.

Тема 2. Обменное взаимодействие. Ортогонализация волновых функций по Боголюбову-Левдину. Эффективный оператор.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет интегралов перекрывания по различным типам связи.

Тема 3. Ковалентная связь. Метод молекулярных орбиталей

домашнее задание , примерные вопросы:

Построение молекулярных орбит для заданных конфигураций комплексов.

Тема 4. Лигандная сверхтонкая структура

презентация , примерные вопросы:

Вывод формул для параметров перенесенных спиновых плотностей. Расчет матричных элементов оператора электронно-ядерного взаимодействия на молекулярных орбиталах.

Тема 5. Редукция параметров Слэтера в примесных центрах

коллоквиум , примерные вопросы:

Сравнение методов МОЛКАО и метода наложения конфигураций.

Тема 6. Эффект Яна-Теллера

домашнее задание , примерные вопросы:

Фонноные сателлиты в оптических спектрах примесных центров

Примерные вопросы к зачету:

Контрольная работа 1. Расчет схемы уровней энергии.

Контрольная работа 2. Расчет компонент г-тензора.

Вопросы

1. Изотропное обменное взаимодействие.
2. Анизотропное обменное взаимодействие.
3. Двойной обмен.
4. Модель обменных зарядов в теории кристаллического поля.
5. Лигандное сверхтонкое взаимодействие .
6. Метод молекулярных орбиталей.
7. Электронно-колебательное взаимодействие. Эффект Яна-Теллера.
8. Вероятности переходов в примесных центрах.

7.1. Основная литература:

1. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А. И. Гусев .? Издание 2-е, исправленное .? Москва : Физматлит, 2009 .? 416 с. : ил. ; 22 см. ? Библиогр. в конце гл. ? Имен. указ.: с. 406-407 .? Предм. указ.: с. 408-414.

2. Микроскопические модели в конденсированных средах. М. В. Еремин, Учебное пособие КГУ, 2011, 112с.
http://kpfu.ru/docs/F1043614157/Eremin_Posobie_2011.doc
3. Ткаченко Ф. А.Электронные приборы и устройства: Учебник / Ф.А. Ткаченко. - М.: ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2011. - 682 с.: ил.; 60x90 1/16. - (Высшее образование). (переплет) ISBN 978-5-16-004658-7, 2000 экз.
<http://www.znaniun.com/bookread.php?book=209952>

7.2. Дополнительная литература:

1. Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных групп . Том. 2 / Абрагам А. Блини
Б./, М.: Мир. Том. 2, 1973
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

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>

Информационный бюллетень "ПЕРСТ". Перспективные технологии. - <http://perst.issp.ras.ru>

Методические пособия - http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8205

Программа для расчета 3-й , 6-й и 9-й символов - <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/369j.html>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Теория примесных центров в кристаллах" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

Лекционная аудитория, книги по специальности , методические пособия, интернет

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.68 "Физика" и магистерской программе Физика конденсированного состояния .

Автор(ы):

Еремин М.В. _____
"___" ____ 201 ____ г.

Рецензент(ы):

"___" ____ 201 ____ г.