

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. Д.А. Таюрский

ДЕПАРТАМЕНТ
ОБРАЗОВАНИЯ
(ДО КФУ)

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Теория кристаллического поля Б1.В.ДВ.17

Направление подготовки: 03.03.03 - Радиофизика

Профиль подготовки: Физика магнитных явлений

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Еремин М.В.

Рецензент(ы):

Тагиров М.С.

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 6137718

Казань

2018

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 Б3.В.8 "Теория кристаллического поля" являются овладение 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 " Б1.В.ДВ.17 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 03.03.03 Радиофизика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина Б3.В.8 "Теория кристаллического поля" входит в профессиональный цикл (блок Б3) 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": Б3.Б.5 "Атомная и ядерная физика", Б2.Б.4 "Квантовая механика".

Дисциплина является базовой для последующего изучения дисциплин по профилю "Радиоспектроскопия". Она предшествует курсам (Б3.В.9 "Спинтроника", В3.ДВ2 "Основы магнитного резонанса", Б3.ДВ6 "Физические основы ОКГ", для выполнения лабораторных работ в рамках занятий по дисциплине Б3.ДВ3 "Лаборатория по спектроскопии", а также изучения дисциплин Б3.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
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью адаптироваться к изменению научного профиля своей профессиональной деятельности, социокультурных и социальных условий деятельности
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

современные методы расчета энергетических схем уровней энергии ионов переходных групп в кристаллах

2. должен уметь:

современные методы расчета энергетических схем уровней энергии ионов переходных групп в кристаллах

3. должен владеть:

- навыками расчетов в схемах сильного, среднего и слабого кристаллических полей

4. 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 экзамен 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. Приближение центрального поля.	7	1	2	0	0	Отчет
3.	Тема 3. Остаточное электростатическое взаимодействие электронов. Термы электронных конфигураций.	7	2	2	0	2	Письменное домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Волновые функции термов. Классификация повторяющихся термов по родонаначальному числу.	7	3	2	0	2	Письменное домашнее задание
6.	Тема 6. Расчет матричных элементов остаточного электростатического взаимодействия. Метод диагональных сумм. Пример расчета для конфигурации из двух d -электронов.	7	4	2	0	4	Письменное домашнее задание
7.	Тема 7. Оператор энергии спин-орбитального взаимодействия. Схема квантования по полному моменту количества движения. Прямые и обращенные мультиплеты. Правило интервалов.	7	5	2	0	4	Письменное домашнее задание
8.	Тема 8. Оператор энергии кристаллического поля. Модели точечных зарядов и независимых валентных связей. координаций переходных ионов.	7	6	2	0	0	Письменное домашнее задание
9.	Тема 9. Схема сильного кристаллического поля. Пространственное распределение электронных облаков. Определение основных состояний ионов. Низкоспиновые состояния комплексов.	7	7	2	0	2	Письменное домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
10.	Тема 10. Схема промежуточного кристаллического поля. Диаграммы Сугано-Танабе.	7	8	2	0	2	Письменное домашнее задание
11.	Тема 11. Схема слабого кристаллического поля. Основные методики расчета матричных элементов. Техника неприводимых тензорных операторов и метод операторов эквивалентов.	7	9	2	0	4	Контрольная работа
12.	Тема 12. Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле. Статический эффект Яна-Теллера..	7	10-13	0	0	6	Отчет
13.	Тема 13. Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле. Теоретические оценки для компонент g - тензора.	7	14-18	0	0	10	Письменное домашнее задание
.	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	Экзамен
	Итого			18	0	36	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Теория свободного атома. Приближение центрального поля.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Электронные конфигурации. Слетеровские детерминанты.

Тема 3. Остаточное электростатическое взаимодействие электронов. Термы электронных конфигураций.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Волновые функции термов. Классификация повторяющихся термов по родонаначальному числу.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Построение волновых функций основных термов.

Тема 5. Волновые функции термов. Классификация повторяющихся термов по родонаначальному числу.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Классификация повторяющихся термов по родонаначальному числу.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Построение волновых функций

Тема 6. Расчет матричных элементов остаточного электростатического взаимодействия. Метод диагональных сумм. Пример расчета для конфигурации из двух d -электронов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Метод диагональных сумм.

лабораторная работа (4 часа(ов)):

Расчет энергий термов

Тема 7. Оператор энергии спин-орбитального взаимодействия. Схема квантования по полному моменту количества движения. Прямые и обращенные мультиплеты. Правило интервалов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

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

лабораторная работа (4 часа(ов)):

Построение волновых функций

Тема 8. Оператор энергии кристаллического поля. Модели точечных зарядов и независимых валентных связей. координаций переходных ионов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

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

Тема 9. Схема сильного кристаллического поля. Пространственное распределение электронных облаков. Определение основных состояний ионов. Низкоспиновые состояния комплексов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Схема сильного кристаллического поля.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Расчет параметров кристаллического поля

Тема 10. Схема промежуточного кристаллического поля. Диаграммы Сугано-Танабе.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Схема промежуточного кристаллического поля.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Диаграммы Сугано-Танабе.

Тема 11. Схема слабого кристаллического поля. Основные методики расчета матричных элементов. Техника неприводимых тензорных операторов и метод операторов эквивалентов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Схема слабого кристаллического поля. Основные методики расчета матричных элементов.

лабораторная работа (4 часа(ов)):

Расчет эквивалентных операторов

Тема 12. Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле. Статический эффект Яна-Теллера..

лабораторная работа (6 часа(ов)):

Расчет волновых функций.

Тема 13. Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле. Теоретические оценки для компонент g - тензора.

лабораторная работа (10 часа(ов)):

Расчет компонент g -тензора.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

№	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоёмкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. Теория свободного атома. Приближение центрального поля.	7	1			
3.	Тема 3. Остаточное электростатическое взаимодействие электронов. Термы электронных конфигураций.	7	2	определение возможных термов	2	домашнее задание
5.	Тема 5. Волновые функции термов. Классификация повторяющихся термов по родонаначальному числу.	7	3	построение волновых функций	2	домашнее задание
6.	Тема 6. Расчет матричных элементов остаточного электростатического взаимодействия. Метод диагональных сумм. Пример расчета для конфигурации из двух d -электронов.	7	4	расчет энергий термов	2	домашнее задание
7.	Тема 7. Оператор энергии спин-орбитального взаимодействия. Схема квантования по полному моменту количества движения. Прямые и обращенные мультиплеты. Правило интервалов.	7	5	Построение волновых функций	2	домашнее задание
8.	Тема 8. Оператор энергии кристаллического поля. Модели точечных зарядов и независимых валентных связей. координаций переходных ионов.	7	6	Сопоставление с экспериментальными данными	2	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
9.	Тема 9. Схема сильного кристаллического поля. Пространственное распределение электронных облаков. Определение основных состояний ионов. Низкоспиновые состояния комплексов.	7	7	Определение параметров энергетической схемы уровней	2	домашнее задание
10.	Тема 10. Схема промежуточного кристаллического поля. Диаграммы Сугано-Танабе.	7	8	Расчет параметров кристаллического поля	2	домашнее задание
11.	Тема 11. Схема слабого кристаллического поля. Основные методики расчета матричных элементов. Техника неприводимых тензорных операторов и метод операторов эквивалентов.	7	9	Расчет волновых функций	2	контрольная работа
12.	Тема 12. Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле. Статический эффект Яна-Теллера..	7	10-13			
13.	Тема 13. Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле. Теоретические оценки для компонент g - тензора.	7	14-18	Расчет компонент g -тензора	2	домашнее задание
	Итого				18	

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. Приближение центрального поля.
экзамен

Тема 3. Остаточное электростатическое взаимодействие электронов. Термы электронных конфигураций.

домашнее задание , примерные вопросы:

Возможные термы электронных конфигураций

Тема 5. Волновые функции термов. Классификация повторяющихся термов по родонаначальному числу.

домашнее задание , примерные вопросы:

Построение волновых функций

Тема 6. Расчет матричных элементов остаточного электростатического взаимодействия . Метод диагональных сумм. Пример расчета для конфигурации из двух d -электронов.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет энергий термов

Тема 7. Оператор энергии спин-орбитального взаимодействия. Схема квантования по полному моменту количества движения. Прямые и обращенные мультиплеты. Правило интервалов.

домашнее задание , примерные вопросы:

Построение волновых функций

Тема 8. Оператор энергии кристаллического поля. Модели точечных зарядов и независимых валентных связей. координаций переходных ионов.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет параметров кристаллического поля

Тема 9. Схема сильного кристаллического поля. Пространственное распределение электронных облаков. Определение основных состояний ионов. Низкоспиновые состояния комплексов.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет расщеплений

Тема 10. Схема промежуточного кристаллического поля. Диаграммы Сугано-Танабе.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет волновых функций

Тема 11. Схема слабого кристаллического поля. Основные методики расчета матричных элементов. Техника неприводимых тензорных операторов и метод операторов эквивалентов.

контрольная работа , примерные вопросы:

Расчет матричных элементов

Тема 12. Расчет энергетической схемы уровней для иона меди в тетрагональном кристаллическом поле. Статический эффект Яна-Теллера..

экзамен

Тема 13. Расчет энергетической схемы уровней для иона иттербия в тетрагональном кристаллическом поле. Теоретические оценки для компонент g - тензора.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет компонент g-тензора

Итоговая форма контроля

экзамен

Примерные вопросы к экзамену:

Вопросы

1. Слетеровские детерминанты
2. Возможные термы электронных конфигураций
3. Построение волновых функций в представлении момента количества движения.
4. Расчет энергий термов.
5. Определение параметров по экспериментальным данным
6. Расчет расщеплений обусловленных кристаллическим полем
7. Расчет компонент g-тензора

Вопросы способствуют развитию компетенций; ОПК-1, ОПК-2, ОПК-4, ПК-1, ПК-2

7.1. Основная литература:

1. Теоретическая физика, т. 3 . Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М. Наука, 2009
2. Теория оптических спектров, часть 1. Классические методы/ А.М.Леушин- Казань , Казанский университет. - 2007. - 107 с.
Скачать: http://kpfu.ru/portal/docs/F1651974492/tos_p1.pdf
3. ДИНАМИКА И КИНЕТИКА электронных и спиновых возбуждений в парамагнитных кристаллах/ Аминов Л. К., Малкин Б.З.// Казань 2008, Из-во К(П)ФУ 2008 скачать : http://kpfu.ru/portal/docs/F1917339624/DynamicsSpinParamagnets_Aminov_Malkin.pdf

7.2. Дополнительная литература:

1. Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных групп, Абрагам А. Блини Б.. М.: Мир. 1973.
2. Теория оптических спектров ионов с недостроенными электронными оболочками, Смирнов А.И. Свиридов Д.Т.. М.: Наука, 1982.
3. Квантовая теория парамагнетизма. Конспект лекций. Малкин Б.З. Из-во КФУ, 2006, 83 с.
Скачать: http://kpfu.ru/portal/docs/F800871619/quant_theory_param.pdf

7.3. Интернет-ресурсы:

А. М. Леушин. Теория оптических спектров. Часть 1 - http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8205
архив публикаций по физике - <http://xxx.lanl.gov/find/cond-mat>
Данные о структуре кристаллов в базе данных "Crystallography Open Database - <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>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

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

учебные пособия

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 03.03.03 "Радиофизика" и профилю подготовки Физика магнитных явлений .

Автор(ы):

Еремин М.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Тагиров М.С. _____

"__" _____ 201__ г.