

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 23.09.2022 14:27:46  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП



Б.Б.Педько

«28» июня 2022 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

**Экспериментальные и теоретические методы в физике конденсированного  
состояния вещества**

Направление подготовки

03.03.03 Радиофизика

профиль

Физика и технология радиоэлектронных приборов и устройств

Для студентов

3 курса, очной формы обучения

Составитель: д.ф.-м.н., профессор Самсонов В.М.

Тверь, 2022

## **I. Аннотация**

### **1. Наименование дисциплины в соответствии с учебным планом**

Экспериментальные и теоретические методы в физике конденсированного состояния вещества

### **2. Цель и задачи дисциплины**

Целью освоения дисциплины является:

Овладение основами и современным состоянием физики конденсированного состояния (ФКС) вещества. ФКС бурно развивается в последние годы и актуальна как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Эта область науки открывает широкие возможности для применения компьютерных методов, в том числе методов компьютерного моделирования. Наиболее разработанным разделом ФКС является физика твердого тела. Физика жидкого состояния, а также экспериментальные методы, используемые в ФКС, остаются вне поля зрения. Данный спецкурс восполняет в той или иной степени указанный пробел.

Задачами освоения дисциплины являются:

1. знакомство студентов с современными экспериментальными методами, включая рентгеноструктурный анализ и атомно-силовую микроскопию,
2. комплексное изучение основ физики твердого тела и физики жидкого состояния.

### **3. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина относится к дисциплинам по выбору вариативной части учебного плана.

Физика конденсированного состояния, особенно физика твердого тела, очень тесно связана с целым рядом технических приложений. Можно даже сказать, что наша цивилизация является твердотельной, хотя в перспективе возможно изменение акцента в сторону физики жидкого состояния и наносистем. Соответственно, студентам, обучающимся по данной специальности, необходимо владеть основными понятиями ФКС и знать основные методы изучения структурных и иных характеристик конденсированных тел.

Поскольку данный предмет изучается на 3 курсе, он ориентирован на первоначальное знакомство с современными экспериментальными методами

ФКС. Соответственно, данный курс не предполагает, что студенты самостоятельно проводят соответствующие экспериментальные исследования. Знакомство с экспериментальными установками осуществляется в основном в виде экскурсий в лаборатории физико-технического и химического факультетов. В задачу практикума входит изучение основ методов и обработка результатов спектроскопических и иных экспериментов.

#### 4. Объем дисциплины:

5 зачетных единиц, 180 академических часов, **в том числе**

**контактная работа:** лекции 36 часов, практические занятия 36 часов, лабораторные работы 36 часов, **самостоятельная работа:** 72 часа.

#### 5. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

<p><b>Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)</b></p>	<p><b>Планируемые результаты обучения по дисциплине</b></p>
<p>ОПК-2 способность самостоятельно приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии</p>	<p><b>Владеть:</b> теоретическими основами экспериментальных методов, применяющихся в физике конденсированного состояния, в том числе в физико-химических исследованиях, связанных с технологиями микро- и нанoeлектроники.</p> <p><b>Уметь:</b> проводить расчеты термодинамических и иных характеристик конденсированных тел, обрабатывать результаты оптических и иных экспериментов, нацеленных на изучение структуры конденсированных тел;</p> <p><b>Знать:</b> основы физики твердого тела и физики жидкого состояния, а также соответствующие экспериментальные методы.</p>
<p>ПК-1 способность использовать</p>	<p><b>Владеть:</b> основами теоретических методов исследования конденсированного состояния, применяющихся в технологиях</p>

специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	<p>микро- и нанoeлектроники.</p> <p><b>Уметь:</b> проводить расчеты характеристик металлов, полупроводников и диэлектриков.</p> <p><b>Знать:</b> направления и перспективы использования конденсированного состояния вещества в радиофизике и электронике.</p>
---	--

**6. Форма промежуточной аттестации:** экзамен в 5 семестре

**7. Язык преподавания** русский.

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

Наименование тем	Всего	Контактная работа			Самостоятельная работа
		Лекции	Практич. работы	Лабор. работы	
<b>1. Понятие о конденсированном состоянии вещества, особенности твердого и жидкого состояний.</b> Агрегатные состояния вещества. Классификация конденсированных тел по типу химической связи. Особенности движения частиц в кристаллах и жидкостях. Понятие о ближнем и дальнем порядке. Раздельная функция распределения как количественная мера ближнего порядка в жидкостях	16	4	4	4	4
<b>2. Основы кристаллографии.</b> Набор операций симметрии. Примитивные ячейки. Основные типы кристаллографических решеток. Положение и ориентация плоскостей в кристаллах. Простые кристаллические структуры. Реальные кристаллические структуры.	16	4	4	4	4
<b>3. Типы связей в кристаллах.</b> Кристаллы инертных газов. Силы Ван дер Ваальса. Ионные кристаллы. Вычисления постоянной Маделунга. Объемный модуль упругости. Ковалентные кристаллы. Металлические кристаллы. Атомные радиусы.	16	4	4	4	4
<b>4. Фононы и колебания решетки.</b>	16	4	4	4	4

Квантовый характер колебаний решетки. Неупругое рассеяние фотонов на акустических фононах. Локальные фононные колебания					
<b>5. Рассеяние рентгеновского излучения, электронов и нейтронов в жидкостях и твердых телах.</b> Рассеяние рентгеновских лучей свободным электроном и свободным атомом. Рассеяние электронов свободным атомом. Рассеяние медленных нейтронов на свободном ядре. Параметры, определения по кривым интенсивности. Определение парной корреляционной функции. Определение функций распределения электронной плотности для молекулярных жидкостей и аморфных тел.	16	4	4	4	4
<b>6. Исследование структуры жидкостей. Методы дифракции рентгеновских лучей.</b> Общие уравнения дифракции. Аппаратура. Монохроматизация. Системы детектирования. Анализ данных, некоторые экспериментальные результаты.	16	4	4	4	4
<b>7. Метод рассеяния нейтронов.</b> Теория Ван Хофа. Временные корреляционные функции. Традиционные эксперименты. Исследование структуры металлов.	16	4	4	4	4
<b>8. Электронография конденсированного вещества.</b> Методологические особенности электронографии. Информация, получаемая из кривой интенсивности. Строение жидких металлов. Электронография поверхностных слоев.	16	4	4	4	4
<b>9. Другие экспериментальные методы.</b> Изучение конденсированных тел методом рассеяния света. Ультразвуковые методы. Ядерный магнитный резонанс. Электронный парамагнитный резонанс. Инфракрасная спектроскопия.	16	4	4	4	4

Электронный микроскоп. Атомная силовая микроскопия. Туннельная микроскопия.					
<b>ЭКЗАМЕН</b>	<b>36</b>				<b>36</b>
<b>ИТОГО</b>	<b>180</b>	<b>36</b>	<b>36</b>	<b>36</b>	<b>72</b>

### **III. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине**

#### 1. Текущий контроль успеваемости:

- Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины;
- Задачи для проверки умений при освоении дисциплины.

#### 2. Промежуточная аттестация:

- Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины;
- Задачи для проверки умений при освоении дисциплины.

### **IV. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине**

**Форма проведения промежуточного контроля:** студенты, освоившие программу курса «Экспериментальные и теоретические методы в физике конденсированного состояния вещества» могут сдать экзамен по итогам рейтинговой аттестации согласно «Положения о рейтинговой системе обучения и оценки качества учебной работы студентов ТвГУ» (протокол №4 от 25 октября 2017 г.).

Если условия «Положения о рейтинговой системе ...» не выполнены, то экзамен сдается согласно «Положения о промежуточной аттестации (экзаменах и зачетах) студентов ТвГУ» (протокол №4 от 25 октября 2017 г.).

**Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ОПК 2** способность самостоятельно приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии.

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания		
		Высокий уровень	Средний уровень	Низкий уровень
	<i>Задания для проверки сформированности владений:</i>	<i>Высокий уровень</i>	<i>Средний уровень</i>	<i>Низкий уровень</i>

		<i>(3 балла по каждому критерию)</i>	<i>(2 балла по каждому критерию)</i>	<i>(1 балл по каждому критерию)</i>
Методами расшифровки рентгеновских дифрактограмм	Уверенно владеет методами расшифровки рентгеновских дифрактограмм	Удовлетворительно владеет методами расшифровки рентгеновских дифрактограмм	Плохо владеет методами расшифровки рентгеновских дифрактограмм	
Оценки функции радиального распределения атомов на основе метода ББГИ (теоретический подход), компьютерного и лабораторного эксперимента	Знает метод оценки функции радиального распределения атомов на основе метода ББГИ и умеет применять этот метод на практике	Формально знает метод оценки функции радиального распределения атомов на основе метода ББГИ, но неуверенно применяет его на практике	Плохо владеет методом ББГИ и не умеет применять этот метод на практике	
<i>Задания для проверки сформированности умений:</i>	<i>Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)</i>	<i>Средний уровень (2 балла по каждому критерию)</i>	<i>Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)</i>	
Оценить энергию связи и расстояние между ближайшими соседями в кристаллах инертных газов	Адекватно оценивает энергию связи и расстояние между ближайшими соседями в кристаллах инертных газов	Оценивает энергию связи и расстояние между ближайшими соседями в кристаллах инертных газов, но допускает отдельные ошибки	С трудом оценивает энергию связи и расстояние между ближайшими соседями в кристаллах инертных газов с трудом	
Оценить постоянную Маделунга для моделирования одномерных систем, представленных цепочками ионов	Правильно оценивает постоянную Маделунга	Неуверенно оценивает постоянную	Знает определение оценивает постоянной Маделунга,	

	<p>чередующейся полярностью. Сравнить результаты с данными для трёхмерных кристаллов</p>	<p>для одномерной модели ионного кристалла</p>	<p>Маделунга для одномерной модели ионного кристалла</p>	<p>но допускает ошибки при ее оценке</p>
	<p><i>Задания для проверки сформированности знаний:</i></p>	<p><i>Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)</i></p>	<p><i>Средний уровень (2 балла по каждому критерию)</i></p>	<p><i>Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)</i></p>
	<p>Структурные характеристики кристаллов и жидкостей: типы решеток, координационные числа, функция радиального распределения атомов</p>	<p>Хорошо знает структурные характеристики кристаллов и жидкостей: типы решеток, понятия координационные числа и радиальной функции распределения атомов</p>	<p>Удовлетворительно знает структурные характеристики кристаллов и жидкостей: типы решеток, понятия координационные числа и радиальной функции распределения атомов</p>	<p>Плохо знает структурные характеристики кристаллов и жидкостей: типы решеток, понятия координационные числа и радиальной функции распределения атомов</p>
	<p>Отличительные особенности молекулярных, ионных, металлических и ковалентных соединений</p>	<p>Хорошо знает отличительные особенности молекулярных, ионных, металлических и ковалентных соединений</p>	<p>Удовлетворительно знает отличительные особенности молекулярных, ионных, металлических и ковалентных соединений</p>	<p>Плохо знает отличительные особенности молекулярных, ионных, металлических и ковалентных соединений</p>

**2. Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК 1: способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин**

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания		
	<i>Задания для проверки сформированности владений:</i>	<i>Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)</i>	<i>Средний уровень (2 балла по каждому критерию)</i>	<i>Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)</i>
	Подготовить и представить презентацию по одному из экспериментальных методов исследования конденсированных систем	Презентация подготовлена на высоком уровне, ее представление также заслуживает высокой оценки	Презентация подготовлена на высоком уровне, но ее представление не заслуживает высокой оценки	Имеется ряд замечаний как по самой презентации, так и по ее представлению
	Подготовить и представить реферат, посвященный актуальной проблеме ФКС	Тема и содержание реферата полностью соответствуют заданию, реферат подготовлен на высоком уровне	Практическое применение выбранной темы отмечено фрагментарно	Имеется ряд замечаний по реферату
	<i>Задания для проверки сформированности умений:</i>	<i>Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)</i>	<i>Средний уровень (2 балла по каждому критерию)</i>	<i>Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)</i>
	По данным для подвижности носителей заряда оценить максимально возможную частоту кремниевого процессора	Правильно оценивает частоту процессора	Владеет понятием подвижности носителей заряда, но не уверенно использует это понятие	Плохо владеет понятием подвижности носителей заряда и не уверенно применяет его для решения конкретных

			для оценки частоты процессора	задач
	Используя справочную литературу, составить таблицу теплоёмкости простых веществ и сделать мотивированное заключение о степени выполнения закона Дюлонга и Пти	Задание выполнено аккуратно, проанализирована степень выполнения закона Дюлонга и Пти	Задание выполнено формально, отсутствует анализ выбранных табличных данных	Задание выполнено формально и не вполне аккуратно
	<i>Задания для проверки сформированности знаний:</i>	<i>Высокий уровень (3 балла по каждому критерию)</i>	<i>Средний уровень (2 балла по каждому критерию)</i>	<i>Низкий уровень (1 балл по каждому критерию)</i>
	Основы зонной теории. Отличительные особенности металлов, полупроводников и диэлектриков	Знает основы зонной теории, отличительные особенности металлов, полупроводников и диэлектриков	Знает основы зонной теории, но неуверенно формулирует отличительные особенности металлов, полупроводников и диэлектриков	Плохо знает основы зонной теории, неуверенно формулирует отличительные особенности металлов, полупроводников и диэлектриков
	Основные характеристики простых (Ge, Si) и сложных (A <sub>III</sub> B <sub>V</sub> ) полупроводниковых соединений	Знает основные характеристики простых и сложных полупроводниковых соединений, уверенно формулирует преимущества и недостатки	Знает основные характеристики простых и сложных полупроводниковых соединений, но не вполне уверенно формулирует преимущества и недостатки	Плохо знает основные характеристики простых и сложных полупроводниковых соединений, неуверенно формулирует их преимущества и недостатки

## V Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

**а) Основная литература:**

1. Матухин В. Л. Физика твердого тела [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.Л. Матухин, В.Л. Ермаков. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 224 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/262>.
2. Савельев И.В. Курс общей физики. В 5-и тт. Том 5. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц [Электронный ресурс] : учеб. пособие — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 384 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/708>.

**б) Дополнительная литература:**

1. Епифанов Г.И. Физика твердого тела [Электронный ресурс] : учеб. пособие — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 288 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/2023>.
2. Владимиров Г.Г. Физика поверхности твердых тел [Электронный ресурс] : учеб. пособие — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2016. — 352 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/71707>.

**VI. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины**

Для выполнения практических заданий студентам рекомендуется самостоятельно выбрать привычную для них среду разработки программ. В качестве таковых студенты могут использовать среду разработки Delphi или Builder. В этом случае для визуализации вычислений студенты могут использовать пакет математической графики Origin.

С целью экономии времени студентам рекомендуется использовать математические пакеты Maple и Mathcad. Благодаря мощной интеллектуальной среде программирования студенты могут полностью сосредоточиться на разработке и исследовании математических моделей, минуя этап написания вспомогательных подпрограмм по дифференцированию интегрированию и т.д. Для быстрой выработки необходимых навыков использования этих пакетов к

данному методическому комплексу прилагаются электронные учебники по данным пакетам.

### **Перечень программного обеспечения, разработанного на факультете**

1. Программа для молекулярно-динамического моделирования процесса эпитаксиального роста (разработана В.М. Самсоновым и М.Ю. Пушкарем);
2. Программа для молекулярно-динамического моделирования эволюции малых систем (разработанная В.М. Самсоновым и В.В. Дронниковым);

## **VII. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины**

### **1. Текущий контроль успеваемости**

#### **ОПК-2**

#### **Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:**

1. Особенности структуры и движения атомов в жидкостях.
2. Радиальная функция распределения.
3. Разновидности решеточных теорий жидкости.
4. Природа межмолекулярных сил отталкивания.
5. Чем объясняется тепловое расширение кристаллов?
6. В чем заключаются основные отличия квантовой теории теплоемкости Дебая от теории Эйнштейна?
7. Закон Дюлонга и Пти.

#### **Задачи для проверки умений при освоении дисциплины**

#### **Задание 1. Определение вращательной постоянной, момента инерции и межъядерного расстояния для двухатомных молекул**

1. Познакомиться с основными положениями теории вращательных спектров на основе модели жесткого ротатора
2. На основе изученной теории вывести расчетные формулы для получения характеристических постоянных для изучаемого вещества.
3. Используя данные опыта по измерению волновых чисел для конкретного вещества, состоящего из двухатомных молекул, рассчитать вращательную постоянную, момент инерции и межъядерное расстояния.

4. Сравнить полученные результаты с имеющимися справочными данными, если таки существуют. Объяснить возможные расхождения.

Задание 2. Расчет частот первых линий во вращательном спектре поглощения двухатомной молекулы

1. Познакомиться с основными положениями теории вращательных спектров на основе модели жесткого ротатора.
2. На основе изученной теории вывести расчетные формулы для получения частот спектра по имеющимся характеристическим постоянным для изучаемого вещества.
3. По имеющимся характеристическим постоянным, для указанного преподавателем вещества, рассчитать частоты первых трех линий во вращательном спектре поглощения.
4. По полученным результатам сделать вывод о возможности применения той или иной области спектроскопии для изучения данной характеристики указанного вещества.

Задание 3. Изучение колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул

1. Познакомиться с основными положениями теории колебательно-вращательных спектров на основе модели не жесткого ротатора.
2. Вывести основные формулы для расчета термов колебательно вращательных состояний.
3. Определить частоту колебаний и силовую постоянную для двухатомной молекулы, указанного преподавателем вещества, по известной постоянной центробежного растяжения и вращательной постоянной.
4. Оценить полученный результат.

**ПК-1**

**Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:**

1. Классификация твердых тел по проводимости.
2. Основные положения зонной теории.

3. Собственная и примесная проводимости полупроводников. Понятие о дырке.
4. Основные материалы электронной техники: германий, кремний.
5. Полупроводниковые соединения.

### **Задачи для проверки умений при освоении дисциплины**

#### Задание 1. Оценка изотопического эффекта в спектрах двухатомных молекул

1. Ознакомиться с теорией изотопов и влияние изотопозамещенных молекул на вращательный и колебательный спектр.
2. Найти массовое число изотопа, по известным из опыта первым линиям поглощения для указанного преподавателем вещества.
3. Найти смещение первой линии в спектре указанной преподавателем двухатомной молекулы при замещении одной из них более тяжелым изотопом.
4. Оценить влияние изотопического эффекта на молекулярные постоянные различных химических соединений.

#### Задание 2. Определение энергии диссоциации различными экспериментальными методами

1. Познакомится с различными методами оценки энергии диссоциации по экспериментальным данным.
2. Метод оценки по границе наблюдаемого электронно-колебательно-вращательного спектра.
3. Метод графической экстраполяции.
4. Оценить энергию диссоциации по имеющимся колебательным постоянным для указанного вещества.
5. Найти колебательное квантовое число, соответствующее энергии диссоциации молекулы вещества, определенной из опыта, которая ведет себя как гармонический осциллятор с известным коэффициентом жесткости.

### Задание 3. Изучение принципиальной оптической схемы спектральных приборов

Основное назначение спектральных приборов – разложение электромагнитного излучения на его монохроматические составляющие. Спектральные приборы используются для качественного анализа спектрального состава излучения и выделения излучения данной длины волны.

1. Ознакомится с основными положениями теории линейной оптики.
2. Изучить принципиальное влияние элементов оптической схемы спектральных приборов на электромагнитное излучение видимого диапазона.
3. По указанию преподавателя построить оптическую схему необходимую для получения определенного оптического преобразования.

### Задание 4. Изучение основных характеристик спектральных приборов

1. Ознакомится с основными положениями волновой теории.
2. Изучить характеристики спектральных приборов, с помощью которых их можно сравнивать и характеризовать. Спектральный диапазон. Дисперсия. Разрешающая способность. Светосила.

### Задание 5. Рассмотрение основных типов спектральных приборов, их характеристик и применения

1. Изучить основные способы диспергирования света.
2. Сравнить возможности различных приборов: призмные спектральные приборы, дифракционные спектральные приборы, интерференционные спектральные приборы.
3. Рассмотреть основные классические и современные способы регистрации спектров полученных в спектральных приборах.
4. Определение качественного и количественного состава вещества по спектрам испускания, поглощения, отражения или рассеяния света. Изучение различных физико-химических свойств и строения веществ.

## **2. Промежуточная аттестация**

### **ОПК-2**

### Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:

1. Понятие о конденсированном состоянии вещества.
2. Особенности твердого и жидкого состояний. Агрегатные состояния вещества.
3. Классификация конденсированных тел по типу химической связи.
4. Особенности движения частиц в кристаллах и жидкостях. Понятие о ближнем и дальнем порядке.
5. Основы кристаллографии.
6. Типы связей в кристаллах.
7. Фононы и колебания решетки.

### Задачи для проверки умений при освоении дисциплины

Задача 1. Показать, что для потенциала Леннарда Джонса  $d = 1.12a$ .

Задача 2. Показать, что из

$$U = \frac{1}{2} \sum \Phi(r_{ij}) = \frac{1}{2} N(4\varepsilon) \left[ \sum_j \left( \frac{a}{r_j r_1} \right)^{12} - \sum_j \left( \frac{a}{r_j r_1} \right)^6 \right]$$

следует, что  $r_1 < d$  и найти выражение, связывающее  $r_1$  и  $a$ .

Задача 3. С использованием выражения  $d = 1.12a$  для равновесного расстояния между ближайшими соседями, вывести формулу для энергии связи и сравнить результат с приближенной формулой

$$E_{\text{св}} = -U = \frac{1}{2} N(+\varepsilon)12 = 6N\varepsilon$$

Задача 4. Вывести формулу

$$U = -\frac{N\alpha q^2}{R_0} \left( 1 - \frac{\rho}{R_0} \right)$$

для полной энергии кристаллической решетки, где  $R_0$  – равновесное расстояние между ближайшими соседями.

Задача 5. Рассчитать  $\alpha$  для бесконечной цепочки ионов противоположного знака.

Задача 6. Пренебрегая вкладом сил отталкивания, оценить молярную энергию связи в монокристалле KCl. Равновесное расстояние между ближайшими соседями  $R_0 = 3,147 \text{ \AA}$ .

Задача 7. На кубический кристалл падает излучение с  $\lambda = 1,54\text{\AA}$ . Отражение наблюдается при  $\theta_{min} = 11^\circ$ . Найти постоянную решетки  $d$ .

### ПК-1

#### **Вопросы для проверки знаний при освоении дисциплины:**

1. Раздельная функция распределения как количественная мера ближнего порядка в жидкостях.
2. Рассеяние рентгеновского излучения, электронов и нейтронов в жидкостях и твердых телах.
3. Определение радиальной функции распределения из экспериментов по рассеянию рентгеновских лучей.
4. Исследование структуры жидкостей. Метод дифракции рентгеновских лучей.
5. Метод рассеяния нейтронов.
6. Электронография конденсированного вещества.
7. Другие экспериментальные методы.

#### **Задачи для проверки умений при освоении дисциплины**

Задача 1. Из выражения для энергии леннард-джонсовского кристалла

$$U = \frac{1}{2} \sum \Phi(r_{ij}) = \frac{1}{2} N(4\varepsilon) \left[ \sum_j \left( \frac{a}{r_{j1}} \right)^{12} - \sum_j \left( \frac{a}{r_{j1}} \right)^6 \right]$$

получить формулу для энергии связи в допущении, что  $r_1 = d$ , и что учитывается взаимодействие только с ближайшими соседями.

Задача 2. Ионные кристаллы состоят из положительно и отрицательно заряженных ионов. Эти ионы сферически симметричны, а силами взаимодействия между ними являются центральные кулоновские силы и некие силы отталкивания, природа которых не может быть описана в рамках классической теории. Поэтому выражение для энергии взаимодействия  $\varepsilon_{ij}$  между двумя ионами  $i$  и  $j$  в кристалле состава XY, образованном из ионов с зарядами  $+e$  и  $-e$ , содержит два члена и записывается так:

$$\varepsilon_{ij} = \pm \frac{e^2}{r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^n}$$

где  $r_{ij}$  – расстояние между двумя разноименными ионами, а  $b$  и  $n$  – эмпирические константы.

Измеряя  $r_{ij}$  в единицах расстояния  $r$  между ближайшими соседями, т.е. полагая  $r_{ij} = \alpha_{ij}r$ ,

и суммируя по всем ионам при  $j \neq i$ , находи энергию  $\varepsilon_i$   $i$ -го иона в поле всех других ионов:

$$\varepsilon_i = -\frac{Ae^2}{r} + \frac{B}{r^n},$$

где

$$A = \sum_{j \neq i} \pm \alpha_{ij}^{-1}, \quad B = b \sum_{j \neq i} \alpha_{ij}^{-n}.$$

Если рассматриваемый  $i$ -ый ион заряжен отрицательно, то плюсы и минусы в последнем выражении для постоянной Маделунга  $A$  относятся соответственно к положительным и отрицательным ионам.

Из выражения для  $\varepsilon_i$  вытекает, что полная энергия решетки  $U(r)$  кристалла, содержащего  $2N$  ионов равна

$$U(r) = N\varepsilon_i = -N\left(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n}\right)$$

если предположить, что  $N$  достаточно велико, чтобы можно было пренебречь поверхностными эффектами.

Показать, что энергия решетки  $U(r_0)$ , соответствующая равновесному кратчайшему расстоянию между ионами  $r = r_0$ , задается в виде:

$$U(r_0) = -\frac{NAe^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

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

**IX. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Наименование специальных* помещений	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
Учебная аудитория № 202Б (170002 Тверская обл., г. Тверь, Садовый пер., д. 35)	1. Комплект учебной мебели на 25 посадочных мест. 2. Экран настенный 153x203 3. Переносной комплект мультимедийной техники.	Adobe Acrobat Reader DC – бесплатно Microsoft Windows 10 Enterprise - Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017 Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows – Акт на передачу прав №2129 от 25 октября 2016 г. Google Chrome – бесплатно MS Office 365 pro plus - Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017

### Помещения для самостоятельной работы:

Наименование помещений	Оснащенность помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
Помещение для самостоятельной работы, учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, практики, Компьютерный класс физико-технического факультета. Компьютерная	1. Компьютер RAMEC STORM C2D 4600/160Gb/ 256mB/DVD-RW +Монитор LG TFT 17" L1753S-SF – 12 шт 2. Мультимедийный комплект учебного класса (вариант № 2) Проектор Casio XJ-M140, настенный проекц. экран Lumien 180*180. ноутбук Dell N4050. сумка 15,6", мышь 3. Коммутатор D-Link 10/100/1000mbps 16-port DGS-1016D 4. Видеокамера IP-FALCON EYE FE-IPC-BL200P, ОнЛайн Трейд ООО 5. Видеокамера IP-FALCON EYE FE-IPC-BL200P, ОнЛайн Трейд ООО 6. Демонстрационное оборудование комплект «LegoMidstormsEV3» 7. Комплект учебной мебели	Adobe Acrobat Reader DC - бесплатно Cadence SPB/OrCAD 16.6 - Государственный контракт на поставку лицензионных программных продуктов 103 - ГК/09 от 15.06.2009 Google Chrome - бесплатно Java SE Development Kit 8 Update 45 (64-bit) - бесплатно Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows – Акт на передачу прав №2129 от 25 октября 2016 г. Lazarus 1.4.0 - бесплатно Lego MINDSTORM EV3 - бесплатно Mathcad 15 M010 - Акт предоставления прав ИС00000027 от 16.09.2011 MATLAB R2012b - Акт предоставления прав № Us000311 от 25.09.2012 Microsoft Express Studio 4 - бесплатно

<p>лаборатория робототехнических систем №4а (170002 Тверская обл., г. Тверь, Садовый пер., д. 35)</p>		<p>MiKTeX 2.9 - бесплатно MPICH 64-bit – бесплатно MSXML 4.0 SP2 Parser and SDK - бесплатно Microsoft Windows 10 Enterprise - Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017 MS Office 365 pro plus - Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017</p>
---	--	--

## Х. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Дата и протокол заседания кафедры, утвердившего изменения
1.	Раздел IV	Реквизиты «Положения о рейтинговой системе обучения и оценки качества учебной работы студентов ТвГУ» и «Положения о промежуточной аттестации (экзаменах и зачетах) студентов ТвГУ»	Протокол Совета ФТФ №5 от 31 октября 2017 г.
2.	Раздел IX	Оснащенность аудиторного фонда для проведения учебных занятий и самостоятельной работы студентов согласно «Справки МТО ООП ...»	Протокол Совета ФТФ №5 от 31 октября 2017 г