

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики**

**В.В. Иванов**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Квантово-химическое моделирование структуры и свойств твердых тел
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики и химии наноструктур
<b>курс:</b>	4
<b>квалификация:</b>	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 15 час.

Всего часов: 45, всего зач. ед.: 1

Программу составил: П.Б. Сорокин, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физики и химии наноструктур 29.05.2020

## Аннотация

Курс "Квантово-химическое моделирование структуры и свойств твердых тел" предназначен для расширения знаний студентов об основах курса «Физика твердого тела» с помощью современных методов квантово-химического расчёта, а также для того, что бы дать возможность студентам применить свои знания для описания реальных физических результатов, полученных в «реальном времени».

Задачи курса:

- формирование базовых знаний в области физики твердого тела как дисциплины, интегрирующей общефизическую и общетеоретическую подготовку физиков и обеспечивающей технологические основы современных инновационных сфер деятельности;
- формирование представления о свойствах твердых тел с учетом их структуры, симметрии и электронного строения;
- приобретение практических умений и навыков в организации экспериментального и теоретического моделирования физических процессов в твердых телах.

По результатам освоения курса студент должен:

Знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- современные проблемы физики, химии, математики;
- теоретические модели фундаментальных процессов и явлений в физике и ее приложениях;
- принципы симметрии и законы сохранения;
- новейшие открытия естествознания;
- постановку проблем физико-химического моделирования;

Основное содержание курса представлено в следующих разделах:

1. Дефекты в кристаллах
2. Обзор методов моделирования для решения задач твёрдого тела
3. Полупроводники
4. Типы связей в кристаллах.
5. Упругие свойства кристаллов
6. Фононы в кристаллах

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

- увеличить глубину знаний студентов об основах курса «Физика твердого тела» с помощью современных методов квантово-химического расчёта, а также дать возможность студентам применить свои знания для описания реальных физических результатов, полученных в «реальном времени».

### Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний в области физики твердого тела как дисциплины, интегрирующей общефизическую и общетеоретическую подготовку физиков и обеспечивающей технологические основы современных инновационных сфер деятельности;
- формирование представления о свойствах твердых тел с учетом их структуры, симметрии и электронного строения;
- приобретение практических умений и навыков в организации экспериментального и теоретического моделирования физических процессов в твердых телах.

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
--------------------------------	-----------------------------------

УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.2 Имеет глубокое знание и понимание базовых математических дисциплин

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;  
современные проблемы физики, химии, математики;  
теоретические модели фундаментальных процессов и явлений в физике и ее приложениях;  
принципы симметрии и законы сохранения;  
новейшие открытия естествознания;  
постановку проблем физико-химического моделирования;  
о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

уметь:

эффективно использовать на практике теоретические компоненты науки: понятия, суждения, умозаключения, законы;  
представить панораму универсальных методов и законов современного естествознания;  
работать на современном экспериментальном оборудовании;  
абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;  
планировать оптимальное проведение эксперимента.

владеть:

планированием, постановкой и обработкой результатов физического эксперимента;  
научной картиной мира;  
навыками самостоятельной работы в лаборатории на современном экспериментальном оборудовании;  
математическим моделированием физических задач.

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

#### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Дефекты в кристаллах	2	2		5
2	Обзор методов моделирования для решения задач твёрдого тела	2	2		5
3	Полупроводники	2	2		1
4	Типы связей в кристаллах	2	2		2
5	Упругие свойства кристаллов	3	3		1
6	Фононы в кристаллах	4	4		1
Итого часов		15	15		15

Подготовка к экзамену	0 час.
Общая трудоёмкость	45 час., 1 зач.ед.

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 8 (Весенний)

##### 1. Дефекты в кристаллах

Типы дефектов в кристаллах: нульмерные (точечные), одномерные (линейные), двумерные, трехмерные. Дефекты по Шоттки. Дефекты по Френкелю. Расчет числа дефектов при температуре. Примесные атомы. Доноры и акцепторы. Эффект нейтрализации заряда при возникновении дефекта.

Проведение расчета точечных дефектов с использованием метода сверхячейки. Построение зонной структуры кристалла, содержащего дефекты. Расчет энергии дефекта в кристалле.

Расчет энергии дефекта при внесении примесного атома с постепенным увеличением концентрации. Построение диаграммы состояний.

##### 2. Обзор методов моделирования для решения задач твёрдого тела

Понятие структуры (макроструктура, микроструктура и субструктура, атомно-кристаллическая структура, электронная структура).

Классификация твердых тел, имеющие кристаллическое и некристаллическое строение. Основные свойства кристаллов. Симметрия. Точечные группы. Операции и классы точечной симметрии. Трансляционная симметрия. Решетка Бравэ. Пространственные группы. Основные типы кристаллических решеток. Ячейка Вигнера-Зейтца. Понятие обратной решетки. Характеристики кристаллических структур, определяемые в обратном пространстве. Визуализация кристаллических структур и изучение их симметрии и структуры обратной решетки с использованием программного пакета XCrySDen.

##### 3. Полупроводники

Электронные свойства кристаллов. Диэлектрики, металлы, полупроводники. Зависимость проводимости от различных факторов (температура, примесь и пр.). Применение металлов, диэлектриков, полупроводников в технике. Зонная структура кристаллов. Эффект собственной проводимости и ширина запрещенной зоны. Электронно-дырочная проводимость.

Водородоподобная модель простых донорных и акцепторных центров. Полупроводники n- и p-типа.

Поглощение света в полупроводниках. Причины поглощения энергии падающего излучения. Фонон-фононное взаимодействие. Примесные центры окраски. Внутренний фотоэффект. Экситон. Прямые и непрямые оптические переходы.

Проведение расчета электронных свойств кристалла с примесными атомами.

##### 4. Типы связей в кристаллах

Типы межатомного взаимодействия: межмолекулярное, ионное, ковалентное, металлическое. Классификация твердых тел по типу связи между атомами. Основные свойства, характеризующие данные типы взаимодействия. Энергетика каждого типа взаимодействия в кристаллах. Оценка характера связи с помощью распределения электронной плотности. Понятие когезионной энергии твердого тела.

Изучение пакета Siesta для проведения квантово-химических расчетов: оптимизация геометрии, анализ электронной заселенности по Маликену.

Визуализация результатов с использованием программного пакета XCrySDen.

##### 5. Упругие свойства кристаллов

Силы упругости, возникающие при деформации кристалла. Нормальные и сдвиговые (тангенциальные) напряжения. Закон Гука и упругие постоянные кристаллов. Граничные условия постоянства деформаций. Упругие постоянные и упругий модуль всестороннего сжатия кубических кристаллов. Соотношение Коши. Упругие волны в кубических кристаллах. Уравнения Кристоффеля. Взаимосвязь упругих констант и скоростей упругих волн.

Проведение полной оптимизации геометрии недеформированного кристалла с использованием ПО Siesta. Проведение расчета констант упругой деформации кристалла, построение зависимости упругой энергии от деформации.

## 6. Фононы в кристаллах

Колебательное движение в твердых телах. Модели колебательного движения: модель Эйнштейна и модель Дебая. Акустическая и оптическая ветви колебаний. Значение квантовой природы колебаний для объяснения свойств твёрдых тел. Фононы.

Выражение для энергии колебаний кристалла. Связь колебаний решетки с различными свойствами твердых тел.

Построение суперячейки для расчёта колебаний. Получение исходных координат исследуемой структуры. Вычисление матрицы атомных силовых констант. Вывод частот фононов и закона их дисперсии в графический формат. Визуализация полученных данных и их анализ.

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

учебная аудитория, персональные компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

## 6.Перечень рекомендуемой литературы

### Основная литература

1. Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8-е издание, Издательство: John Wiley & Sons, Inc., NJ, USA, 2004, p.704.
2. Richard M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, UK, Cambridge University Press, 2004.
3. А.А.Абрикосов. Основы теории металлов. Изд. 2-ое, ФИЗМАТЛИТ. 2009.
4. Зиненко В. И., Сорокин Б. П., Турчин П. П. Основы физики твердого тела. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2001.

### Дополнительная литература

- 1.Маделунг. Теория твердого тела. Наука. 1980.
2. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир. 1979.

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

Доступные через Internet научные и научно-технические журналы, электронные конспекты лекций, учебные пособия и сборники задач, разработанные для данного курса.

Обеспечение самостоятельной работы - базы данных по журналам Physica Status Solidi b, Physical Review

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

- 1) Vienna Ab initio Simulation Package (VASP).
- 2) Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms (SIESTA).

3) opEn-Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation, and Optimization (Quantum ESPRESSO) opEn-Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation, and Optimization (Quantum ESPRESSO).

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

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики и химии наноструктур
<b>курс:</b>	<u>4</u>
<b>квалификация:</b>	бакалавр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 8 (весенний) - Дифференцированный зачет	
<b>Разработчик:</b>	П.Б. Сорокин, канд. физ.-мат. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.2 Имеет глубокое знание и понимание базовых математических дисциплин

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Квантово-химическое моделирование структуры и свойств твердых тел» обучающийся должен:

### знать:

место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;  
современные проблемы физики, химии, математики;  
теоретические модели фундаментальных процессов и явлений в физике и ее приложениях;  
принципы симметрии и законы сохранения;  
новейшие открытия естествознания;  
постановку проблем физико-химического моделирования;  
о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

### уметь:

эффективно использовать на практике теоретические компоненты науки: понятия, суждения, умозаключения, законы;  
представить панораму универсальных методов и законов современного естествознания;  
работать на современном экспериментальном оборудовании;  
абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;  
планировать оптимальное проведение эксперимента.

### владеть:

планированием, постановкой и обработкой результатов физического эксперимента;  
научной картиной мира;  
навыками самостоятельной работы в лаборатории на современном экспериментальном оборудовании;  
математическим моделированием физических задач.

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

## 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1. Что такое метод моделирования из первых принципов (ab initio)?
2. Объясните модель Томаса — Ферми.
3. Что такое теория функционала электронной плотности?
4. Какие существуют ограничения в применении теории функционала электронной плотности?
5. Докажите теорему Хоэнберга — Кона.



6. Что такое уравнения Кона-Шэма? Выведите эти уравнения.
7. Объясните приближение локальной электронной плотности в теории функционала электронной плотности.
8. Объясните приближение обобщённого градиента в теории функционала электронной плотности.
9. Начертите и объясните алгоритм расчёта с помощью теории функционала электронной плотности.
10. Что такое метод псевдопотенциалов?
11. Какие существуют виды псевдопотенциалов?
12. Какие существуют критерии выбора псевдопотенциала сохраняющего нормировку?
13. Что такое псевдопотенциал Вандербильта? В чём его отличие от псевдопотенциала сохраняющего нормировку?
14. Определите симметрию и элементы симметрии предложенного кристалла или молекулы. Используя программное обеспечение постройте первую зону Бриллюэна для выбранного кристалла.
15. Постройте дебаеграмму предложенного кристалла. Сравните её с экспериментальными данными.
16. Используя программное обеспечение, определите степень ионности кристалла.
17. Проведите расчёт фононов предложенного кристалла. Постройте дисперсионную картину. Сравните с известными экспериментальными данными.
18. Что такое энергия связи кристалла? Чем отличаются различные типы связей в кристаллах? Рассчитайте энергию связи предложенного кристалла. Оцените температуру его плавления.
19. Что такое упругие постоянные кристалла? Объясните их физическую природу. Рассчитайте упругие постоянные и скорости акустических волн предложенного кристалла. Объясните полученные данные.
20. Что такое зонная дисперсия в кристаллах? Рассчитайте зонную дисперсию предложенного полупроводникового или диэлектрического кристалла. Определите запрещённую зону кристалла. Сравните с известными экспериментальными данными.
21. Какие существуют виды дефектов в кристалле? Рассчитайте энергию образования вакансии. Сравните с экспериментальными данными. Рассчитайте концентрацию вакансий при температуре 300 К и 1000 К.
22. Какие существуют виды дефектов в кристалле? Рассчитайте энергию образования дефекта по Френкелю. Сравните с экспериментальными данными. Рассчитайте концентрацию дефектов при температуре 300 К и 1000 К.
23. Что такое релаксация поверхности кристалла? Какие существуют типы релаксации поверхности?
24. Что такое реконструкция поверхности кристалла? Какие существуют типы реконструкции поверхности?
25. Что такое квантово-размерный эффект? Объясните его физическую природу. Рассчитайте квантово-размерный эффект для выбранных нанокластеров.

#### Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочётами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

## **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.