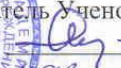


**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ УГЛЕХИМИИ И ХИМИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИУХМ СО РАН)**

УТВЕРЖДЕНА

Ученым советом ИУХМ СО РАН
протокол № от «19» 05 2015 г.

Председатель Ученого совета,
директор  Исмагилов З.Р.
«19» мая 2015 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

учебной дисциплины

Физическая химия твердого тела

Направление подготовки: 04.06.01 - химические науки

Направленность: 02.00.04 – физическая химия

Квалификация выпускника: Исследователь. Преподаватель исследователь

Форма обучения: очная, заочная

Кемерово, 2015

ЛИСТ
согласования рабочей программы дисциплины (модуля)

Рабочая программа учебной дисциплины «Физическая химия твердого тела» составлена с учетом ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 - химические науки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30 июля 2014 г. N 869, зарегистрировано в Минюсте Российской Федерации 18 августа 2014 года № 33718.

Рабочая программа рекомендована лабораторией энергетических соединений и нанокompозитов ИУХМ СО РАН

Зав. лабораторией д.ф-м.н. профессор Б.П. Адуев

Составители:

Б.П. Адуев, зав. лабораторией энергетических соединений и нанокompозитов ИУХМ СО РАН, д.ф-м.н. профессор

СОДЕРЖАНИЕ

1.	Цели и задачи освоения учебной дисциплины.....	4
2.	Место учебной дисциплины в структуре образовательной программы.....	4
3.	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине.....	4
4.	Содержание и структура учебной дисциплины	5
4.1.	Содержание разделов учебной дисциплины	5
4.2.	Распределение часов по семестрам и видам занятий	6
4.3.	Темы, выносимые на лекционные занятия	7
4.4.	Лабораторные работы	9
4.5.	Практические занятия (семинары)	9
4.6.	Самостоятельная работа	9
5.	Образовательные технологии	10
6.	Материально-техническое обеспечение дисциплины	11
7.	Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля и промежуточных аттестаций.....	11
7.1.	Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине.....	11
7.2.	Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточных аттестаций обучающихся	11
7.2.1.	Типовые контрольные задания или иные материалы.....	11
7.3.	Шкала академических оценок освоения дисциплины.....	12
7.4.	Система оценки достижений обучающегося по дисциплине	12
8.	Учебно-методическое обеспечение дисциплины.....	12
8.1.	Основная литература	12
8.2.	Дополнительная литература.....	13
8.3.	Интернет-ресурсы	13
8.4.	Методические указания к видам самостоятельной работы	13

1. Цели и задачи освоения учебной дисциплины

Целью освоения дисциплины «Физическая химия твердого тела» является углубленное изучение теоретических и прикладных основ физической химии твердого тела, необходимых для самостоятельной научно-исследовательской деятельности аспиранта, требующей широкой фундаментальной подготовки в современных направлениях техники и технологии.

Задачами дисциплины являются:

- подробное рассмотрение на классическом и квантово-механическом уровне природы химической связи в твердых телах, позволяющем прогнозировать по свойства веществ по их составу.

- анализ особенностей дефектной и электронной структуры твердых тел и механизмов их взаимодействия на уровне, дающем возможность рассматривать химические процессы в объеме и на поверхности твердых тел.

- изучение основных физико-химических процессов, вызываемых внешними воздействиями в твердых телах и их приложения к исследованию их электронной и дефектной структуры.

2. Место учебной дисциплины в структуре образовательной программы

Учебная дисциплина относится к дисциплинам Блока 1 Дисциплины (модули).

Физическая химия твердого тела является разделом физической химии, изучает природу взаимодействий в твердых телах, их строение, свойства и реакционную способность. Объектами изучения являются твердые тела, в частности энергетические материалы, дефекты и электронные возбуждения кристаллической решетки.

Для успешного освоения учебной дисциплины необходимо:

- знать фундаментальные законы физики и химии, в том числе относящиеся к квантовой механике, термодинамике, статистической физике, теоретические основы неорганической и аналитической химии;

- уметь использовать основные химические законы, справочные данные и количественные соотношения для решения физических и химических задач; использовать программное обеспечение компьютеров для математических расчетов, построения графиков, решения алгебраических и дифференциальных уравнений и численного интегрирования;

- владеть приемами расчета химических равновесий, оценки физических величин.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

Коды компетенции	Результаты освоения дисциплины ООП Содержание компетенций*	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
УК-1	способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Уметь: избегать автоматического применения стандартных формул и приемов при решении задач Владеть: навыками выбора методов и средств решения задач исследования
ОПК-1	способностью самостоятельно осуществлять научную исследовательскую	Знать: -способы анализа имеющейся информации Уметь: - методологию, конкретные методы и приемы научно-

	деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	исследовательской работы с использованием современных компьютерных технологий Владеть методами оценки: - методами самостоятельного анализа имеющейся информации
ПК-1	владение теорией и математическим аппаратом физической химии	Знать: 1. Волновые свойства микрочастиц, способы описания микросистем. 2. Вид, характерные особенности и свойства решения уравнения Шредингера. 3. Типы химической связи в твердых телах 4. Классификацию твердых тел, основанную на их зонной структуре 5. Основные оптические свойства твердых тел Уметь: 1. Рассчитывать плотность вероятности нахождения частицы в точке с заданной координатой. 2. Рассчитывать заселенности состояний в вырожденных и невырожденных системах в состоянии равновесия. 3. Выделять элементарную ячейку кристалла. 4. Рассчитывать концентрации электронов при различных температурах для собственных полупроводников 5. Использовать закон Дюлонга-Пти для оценки теплоемкости 6. Записывать уравнения диффузии и дрейфа носителей заряда 7. Использовать правила отбора для оптических переходов Владеть: методами оценки энергии кристаллических решеток

4. Содержание и структура учебной дисциплины

4.1. Содержание разделов учебной дисциплины

Тема 1. Элементы квантовой механики и статистической физики

- 1.1. Волновые свойства микрочастиц. Уравнение Шредингера. Одномерное движение.
- 1.2. Частица в потенциальной яме. Прохождение сквозь потенциальный барьер.
- 1.3. Статистики Больцмана, Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна.

Тема 2. Связь и кристаллическая решетка

- 2.1. Типы химической связи
- 2.2. Идеальная кристаллическая решетка
- 2.3. Дефекты кристаллической решетки

Тема 3. Зонная теория твердого тела

- 3.1. Электроны в периодической решетке
- 3.2. Диэлектрики, проводники, полупроводники
- 3.3. Статистика электронов в твердых телах

Тема 4. Свойства твердых тел

- 4.1. Тепловые свойства твердых тел
- 4.2. Электропроводность твердых тел
- 4.3. Механизмы рассеяния носителей заряда
- 4.4. Свойства диэлектриков
- 4.5. Оптические свойства твердых тел

Тема 5. Нестационарные процессы в твердых телах

5.1. Генерация и рекомбинация носителей заряда

5.2. Фотопроводимость твердых тел

5.3. Люминесценция

4.2. Распределение часов по семестрам и видам занятий

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы (108 академических часов), в том числе:

№ п.п	Наименование тем	Всего	Контактная работа с преподавателем		Самостоятельная работа аспиранта	Форма текущего контроля
			Лекционные	Практические /семинарские		
1	2	3	4	5	6	7
1	Элементы квантовой механики и статистической физики	18	8	-	10	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
2	Связь и кристаллическая решетка	16	6	-	10	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
3	Зонная теория твердого тела	21	8	-	13	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
4	Свойства твердых тел	25	10	-	15	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
5	Нестационарные процессы в твердых телах	19	4	-	15	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
	Всего: 108 (3 з.е.)		36	-	63	9 зачет

Заочная форма

№ п.п	Наименование тем	Всего	Контактная работа с преподавателем		Самостоятельная работа аспиранта	Форма текущего контроля
			Лекционные	Практические /семинарские		
1	2	3	4	5	6	7
1	Элементы квантовой механики и статистической физики	18	8	-	10	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
2	Связь и кристаллическая решетка	26	6	-	20	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
3	Зонная теория твердого тела	28	8	-	20	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
4	Свойства твердых тел	30	10	-	20	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
5	Тема 5 Нестационарные процессы в твердых телах	24	4	-	20	оценка участия обучающихся в дискуссиях, разборе конкретных ситуаций
	Всего: 108 (3 з.е.)		9	-	90	9 зачет

4.3. Темы, выносимые на лекционные занятия

№№ темы	№№ разделов тем дисциплины, выносимых на лекции	Содержание	Литература
1	1	Волновые свойства микрочастиц. Уравнение Шредингера. Свободная частица.	[1,6]
	2	Частица в потенциальной яме. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер (туннельный эффект). Линейный гармонический осциллятор.	[1, 5]
	3	Понятие фазового и импульсного пространства.	[1 ,5]

№№ темы	№№ разделов тем дисциплины, выносимых на лекции	Содержание	Литература
		Плотность числа состояний. Вырожденные и невырожденные коллективы. Фермионы и бозоны. Статистика Максвелла-Больцмана. Квантовые статистики Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна.	
2	1	Силы притяжения и силы отталкивания между атомами. Ковалентная связь, ионная связь, металлическая связь, водородная связь.	[1-2]
	2	Трансляционная симметрия, вектор трансляции. Элементарная ячейка. Решетка Браве, решетка с базисом	[1-3]
	3	Классификация дефектов решетки. Точечные дефекты, дефекты Френкеля, дефекты Шоттки, нахождение равновесной концентрации точечных дефектов. Диффузия точечных дефектов, законы Фика, коэффициент диффузии. Дислокации. Краевые дислокации, вектор Бюргерса. Винтовые дислокации. Взаимодействие дислокаций.	[1, 5]
3	1	Электронный газ в периодическом потенциальном поле. Модель Кронига – Пенни. Образование энергетических зон, приближение сильной связи, приближение слабой связи. Зоны Бриллюэна, число состояний в зоне Бриллюэна и разрешенной энергетической зоне. Приведенная зона Бриллюэна.	[5]
	2	Заполнение зоны электронами. Проводники, диэлектрики и полупроводники. Понятие о дырках. Локальные состояния.	[5]
	3	Собственные полупроводники, зависимость концентрации электронов от температуры. Примесные полупроводники, зависимость концентрации носителей заряда от температуры.	[1,2]
4	1	Нормальные колебания кристаллической решетки. Спектр нормальных колебаний, плотность числа состояний, акустические и оптические колебания. Фононы. Теплоемкость твердых тел. Решеточная теплоемкость, закон Дебая, закон Дюлонга-Пти, электронная теплоемкость тел	[1]
	2	Дрейф электронов под действием внешних сил, подвижность носителей заряда. Время релаксации и длина свободного пробега, удельная электропроводимость вырожденных и невырожденных полупроводников.	[1-2]
	3	Зависимость подвижности носителей заряда от температуры: рассеяние на фотонах, рассеяние на заря-	[1,5]

№№ темы	№№ разделов тем дисциплины, выносимых на лекции	Содержание	Литература
		женных и нейтральных примесях.	
	4	Ионная электропроводность, частота перескоков, подвижность междоузельных ионов, температурная зависимость ионной проводимости.	[2]
	5	Спектры отражения и спектры поглощения. Оптические спектры молекул. Вероятности перехода и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Прямые и не прямые переходы в твердых телах. Правила отбора.	[4]
5	1	Понятие о неравновесных носителях заряда: генерация, рассеяния энергии и термализация. Виды рекомбинации: межзонная излучательная рекомбинация, межзонная фотонная рекомбинация, межзонная ударная рекомбинация, рекомбинация через локальные центры.	[2]
	2	Понятие о фотопроводимости. Фотоэффект внешний и внутренний. Спектральная зависимость фотопроводимости, квантовый выход.	[2,4]
	3	Флюоресценция и фосфоресценция. Мономолекулярное (центровое) свечение твердых тел. Стоксов сдвиг, конфигурационные координаты и сдвиг Франка – Кондона. Виды люминесценции: внутризонная, рекомбинационная межзонная, экситонная. Рекомбинационное излучение между зоной и примесью	[1]

4.4. Лабораторные работы

Учебным планом не предусмотрено

4.5. Практические занятия (семинары)

Учебным планом не предусмотрено

4.6. Самостоятельная работа

№ п/п	Наименование видов самостоятельной работы	Трудоемкость (в академических часах)	Методические материалы
1	Самостоятельное изучение следующих тем:	30/57	
	1.1.1. Операторы физических величин и принцип суперпозиции.		[1,5]
	1.2.1. Вероятность квантовых переходов.		[1, 5]
	2.1.1. Методика расчета равновесных состояний в кристаллах и молекулах с преимущественно ионной связью.		[1, 5]
	2.3.1. Физико-химические методы исследования дефектной структуры.		[2, 3]
3.2.1. Локальные энергетические уровни электро-		[1, 4]	

№ п/п	Наименование видов самостоятельной работы	Трудоемкость (в академических часах)	Методические материалы
	нов. 3.2.1. Зависимость уровня Ферми от температуры в собственных и примесных полупроводниках. 4.1.1. Тепловое расширение твердых тел. 4.2.1. Изменение концентрации носителей заряда в сильном электрическом поле и электрической пробой. 4.3.1. Поляризуемость диэлектриков, уравнение Клаузиуса — Массоти. Пьезоэлектричество и сегнетоэлектричество. 5.1.1. Биполярная генерация носителей заряда, кинетическое уравнение, время жизни носителей заряда, Максвелловское время релаксации. 5.2.1. Кинетика фотопроводимости. 5.3.1. Релаксация люминесценции. Тушение люминесценции.		[1, 2] [1] [1, 4] [1] [1, 2] [2, 5] [5]
2	Освоение лекционного материала с привлечением учебной, научной и справочной литературы.	24/24	[1-5]
3	Подготовка к зачёту	9/9	[1-5]
Итого		63/90	

5. Образовательные технологии

Для наиболее эффективной реализации компетентностного подхода в рамках учебной дисциплины *Физическая химия твердого тела* предусматривается широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (компьютерных симуляций, разборов конкретных ситуаций, тренингов) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков аспирантов.

Разбор конкретных ситуаций (метод кейс-стади) – это интерактивный метод организации обучения на основе описания и решения конкретных проблемных ситуаций (от английского «case» – случай). Аспирантам предлагают осмыслить реальную жизненную ситуацию, описание которой одновременно отражает не только какую-либо практическую проблему, но и актуализирует определенный комплекс знаний, который необходимо усвоить при разрешении данной проблемы. При этом сама проблема не имеет однозначных решений. Этот метод дает возможность проявить инициативу, почувствовать самостоятельность в освоении теоретических положений и овладении практическими навыками. Не менее важно и то, что анализ ситуаций довольно сильно воздействует на профессионализацию аспирантов, способствует их взрослению, формирует интерес и позитивную мотивацию к учебе.

Групповая дискуссия – это совместное обсуждение и анализ проблемной ситуации, вопроса или задачи. Групповая дискуссия может быть структурированной (то есть управляемой педагогом с помощью поставленных вопросов или тем для обсуждения) или неструктурированной (ее течение зависит от участников группового обсуждения).

Интерактивная лекция – выступление ведущего обучающего перед большой аудиторией с применением следующих активных форм обучения: беседа, демонстрация слайдов или учебных фильмов, мозговой штурм

Интерактивные образовательные технологии, используемые в аудиторных занятиях

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, СМ)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество аудиторных часов
	Л	Групповая дискуссия	4
	Л	Разбор конкретных ситуаций	10
Итого			14

6. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения занятий по дисциплине Физическая химия твердого тела требуется аудитория, оснащенная проектором, компьютером и магнитной доской с маркерами.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля и промежуточных аттестаций

7.1. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

№№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины (результаты по разделам)	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
1	Элементы квантовой механики и статистической физики	УК-1: владеть. ОПК-1: знать, владеть. ПК-1: знать – 1,2; уметь – 1,2.	зачёт
2	Связь и кристаллическая решетка	УК-1: уметь, владеть. ПК-1: знать – 2, 3; уметь – 3,5 владеть.	зачёт
3	Зонная теория твердого тела	УК-1: уметь; владеть. ОПК-1: знать, владеть. ПК-1; знать – 4; уметь -4.	зачёт
4	Свойства твердых тел	ОПК-1: знать, уметь, владеть ПК-1: знать – 5; уметь – 6, 7.	зачёт
5	Тема 5 Нестационарные процессы в твердых телах	ОПК-1: уметь; владеть. ПК-1: владеть – 8.	зачёт

7.2. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточных аттестаций обучающихся

7.2.1. Типовые контрольные задания или иные материалы

Вопросы к зачету

1. Волновые свойства микрочастиц.
2. Уравнение Шредингера.
3. Частица в прямоугольной потенциальной яме.
4. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер.
5. Линейный гармонический осциллятор.
6. Вырожденные и невырожденные коллективы. Функция распределения.
7. Фазовое пространство. Число состояний для микрочастицы.
8. Функции распределения для невырожденного газа.
9. Функции распределения для вырожденного газа фермионов.
10. Функции распределения для вырожденного газа бозонов.
11. Силы притяжения и силы отталкивания.
12. Молекулярная связь.
13. Ионная связь.
14. Ковалентная связь.
15. Металлическая связь.
16. Водородная связь.
17. Точечные дефекты, диффузия точечных дефектов.
18. Дислокации. Движение дислокаций.

19. Понятие о нормальных колебаниях решетки.
20. Спектр нормальных колебаний решетки.
21. Понятие о фононах.
22. Решеточная теплоемкость.
23. Теплоемкость электронного газа.
24. Электронный газ в периодическом потенциальном поле: приближение сильной связи.
25. Электронный газ в периодическом потенциальном поле: приближение слабой связи.
26. Зоны Бриллюэна. Периодичность энергии. Приведенная зона Бриллюэна.
27. Эффективная масса. Графическое изображение эффективной массы.
28. Заполнение зон электронами. Проводники, диэлектрики и полупроводники.
29. Понятие о дырках.
30. Локальные энергетические уровни электронов.
31. Концентрация электронов в зоне проводимости полупроводников: собственные полупроводники, примесные полупроводники.
33. Дрейф электронов под действием внешнего поля.
34. Время релаксации, длина свободного пробега, удельная проводимость.
35. Зависимость подвижности носителей заряда от температуры.
36. Температурная зависимость проводимости.
37. Равновесные и неравновесные носители заряда.
38. Биполярная генерация носителей заряда.
39. Монополярная генерация. Максвелловское время релаксации.
40. Виды рекомбинации.
41. Спектры отражения и поглощения света полупроводниками и диэлектриками.
42. Собственное поглощение света.
43. Поглощение света свободными носителями заряда.
44. Экситонное поглощение света.
45. Примесное поглощение света.
46. Решеточное поглощение света.
47. Типы люминесценции.
48. Мономолекулярное (центровое) свечение твердых тел.
49. Виды фундаментальной люминесценции.
50. Рекомбинационное излучение при переходах между зоной и примесными центрами.
51. Релаксация люминесценции.
52. Тушение люминесценции.

7.3. Шкала академических оценок освоения дисциплины

Виды оценок	Оценки	
Академическая оценка по 2-балльной шкале (зачет)	Не зачтено	Зачтено

7.4. Система оценки достижений обучающегося по дисциплине

Оценка зачета	Требования к знаниям и критерии выставления оценок
<i>Зачтено</i>	Аспирант при ответе демонстрирует твердые знания в объеме учебной программы дисциплины и свободное владение терминологией.
<i>не зачтено</i>	Аспирант при ответе демонстрирует плохое знание значительной части учебного материала дисциплины; ошибки в определении понятий и терминов.

8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

8.1. Основная литература

1. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. Изд.4. М.: ЛЕНАНД, 2015 – 494 с.
2. Кригер В.Г., Каленский А.В., Ананьева М.В. Избранные главы химии твердого тела. Кемерово: Издательство КемГУ, 2014 - 139 с.

8.2. Дополнительная литература

3. Ярославцев А.Б. Химия твердого тела. М.: Научный мир, 2009. - 328 с.
4. Рывкин С.М. Фотоэлектрические явления в полупроводниках. М.: Физматгиз, 1963. – 496 с.
5. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. - М.: Мир, 1966. – 416 с.

8.3. Интернет-ресурсы

1. Научная Электронная Библиотека eLibrary – библиотека электронной периодики, режим доступа: <http://elibrary.ru/>, по паролю. – Загл. с экрана.

8.4. Методические указания к видам самостоятельной работы

Рабочей программой дисциплины «Физическая химия твердого тела» предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа предполагает: освоению лекционного материала, чтение аспирантами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; работу с Интернет-источниками; подготовку к сдаче зачёта.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Для записи конспектов лекций у обучающегося должна быть тетрадь желательного большого формата, так как в конспектах по дисциплине обязательно присутствуют рисунки, графики и чертежи. Эти элементы должны быть выполнены так, чтобы все детали были хорошо видны. Обычно лекция - это самое краткое изложение материала по данному вопросу. Если при записи конспекта вы что-то не успели записать – оставьте место, чтобы дописать потом.

Конспект лекций необходимо проработать перед следующей лекцией, поставив вопросы там, где встречаются непонятные места. Ответы на эти вопросы следует найти в рекомендованной литературе или выяснить на консультации у преподавателя. Конспект лекций необходимо дополнять вставками, особенно по вопросам, вынесенным на самостоятельное изучение.

По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и, при необходимости, составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.