

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 28.08.2023 12:50:31

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Динамика решетки и электрон-фононное взаимодействие в твердых телах

Закреплена за подразделением

Кафедра теоретической физики и квантовых технологий

Направление подготовки

03.04.02 ФИЗИКА

Профиль

Физика конденсированного состояния

Квалификация

Магистр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

3 ЗЕТ

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 2

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

74

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	2 (1.2)		Итого	
Неделя	17			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	17	17	17	17
Итого ауд.	34	34	34	34
Контактная работа	34	34	34	34
Сам. работа	74	74	74	74
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

д.ф.-м.н., Профессор, Векилов Юрий Хоренович

Рабочая программа

Динамика решетки и электрон-фононное взаимодействие в твердых телах

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - магистратура Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 03.04.02 ФИЗИКА (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

03.04.02 ФИЗИКА, 03.04.02-МФЗ-23-1.plx Физика конденсированного состояния, утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

03.04.02 ФИЗИКА, Физика конденсированного состояния, утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.06.2023, протокол № 5-23

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра теоретической физики и квантовых технологий

Протокол от 22.06.2021 г., №11/21

Руководитель подразделения д.ф.-м.н. профессор Мухин С.И.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	Цель дисциплины –ознакомить студентов с основными понятиями, законами и современными численными методами теории динамики решетки кристаллов. Научить рассчитывать фононные частоты в простых моделях динамики решётки с использованием аналитических моделей, а также вычислять фононные частоты реальных кристаллов численными методами. Научить оценивать матричные элементы электрон-фононного взаимодействия в различных приближениях.
-----	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.03
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Атомно-кристаллическая структура твердых фаз	
2.1.2	Компьютерное моделирование в физическом материаловедении	
2.1.3	Магнитные материалы	
2.1.4	Методы теории электронной структуры твердых тел	
2.1.5	Неравновесные конденсированные системы часть 1	
2.1.6	Специальный физический практикум	
2.1.7	Фазовое равновесие в многокомпонентных системах	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Инженерия поверхности	
2.2.2	История и методология физики	
2.2.3	Наночастицы и наноматериалы	
2.2.4	Радиационная обработка поверхности	
2.2.5	Термодинамическое моделирование химических процессов в многокомпонентных гетерогенных системах	
2.2.6	Тонкопленочные материалы	
2.2.7	Физика дифракции	
2.2.8	Экспериментальные методы в физике магнетизма	
2.2.9	Электронные свойства неравновесных материалов	
2.2.10	Научно-педагогическая практика	
2.2.11	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.12	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области физики конденсированных состояний	
Знать:	
ПК-1-31 современные численные методы расчета и анализа динамики решетки реальных кристаллов;	
ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности	
Знать:	
ОПК-1-31 основные свойства и законы движения атомов в кристаллах;	
ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области физики конденсированных состояний	
Уметь:	
ПК-1-У1 обосновывать правомерность допущений и приближений, используемых при решении задач;	
ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности	
Уметь:	
ОПК-1-У1 анализировать фононные дисперсионные соотношения реальных кристаллов;	

ПК-1: Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов научных исследований в области физики конденсированных состояний

Владеть:

ПК-1-В1 навыками использования программных пакетов для первопринципного моделирования для анализа динамики решетки твердых тел

ОПК-1: Способен применять фундаментальные знания в области физики, знания в междисциплинарных областях для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности

Владеть:

ОПК-1-В1 навыками качественного и количественного анализа динамики решетки реальных кристаллов;

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	Раздел 1. Динамика решётки в гармоническом приближении							
1.1	Динамика решётки в гармоническом приближении. /Лек/	2	2	ОПК-1-31 ПК-1-31	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.3Л3.1			
1.2	Особенности фононного спектра и расчет спектра частот кристаллической решетки в гармоническом приближении /Пр/	2	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л2.2			
1.3	Освоение теоретического материала раздела 1 /Ср/	2	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л3.1			
	Раздел 2. Методы исследования фононного спектра							
2.1	Теория возмущений для расчета спектров. Бесфононное, однофононное и двухфононное рассеяние. /Лек/	2	2	ОПК-1-31 ПК-1-31	Л1.1Л3.1			
2.2	Простые модели динамики решётки в металлах: ОЦК, ГЦК решетки. /Лек/	2	2	ОПК-1-31 ПК-1-31	Л1.1			
2.3	Особенности ван Хофа фононного спектра; /Пр/	2	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.2 Л2.3Л3.1			
2.4	Расчет спектра частот кристаллической решетки NiAl в гармоническом приближении. /Пр/	2	4	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Э1 Э2 Э3 Э4			
2.5	Освоение теоретического материала раздела 2 /Ср/	2	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л3.1			
	Раздел 3. Ангармонизм колебаний решётки							
3.1	Ангармонизм колебаний атомов и тепловое расширение /Лек/	2	2	ОПК-1-31 ПК-1-31	Л1.1Л3.1			

3.2	Температурная зависимость теплопроводности решетки. Параметр Грюнайзена. Фононный механизм /Пр/	2	4	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4			
3.3	Фонон-фононные взаимодействия /Лек/	2	2	ОПК-1-31 ПК-1-31	Л1.1Л3.1			
3.4	Освоение теоретического материала раздела 3 /Ср/	2	14	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л3.1			
	Раздел 4. Макроскопическая теория динамики решётки. Фононы в полупроводниках и диэлектриках							
4.1	Фононы в полупроводниках и диэлектриках: акустические и оптические ветви. /Лек/	2	2	ОПК-1-31 ПК-1-31	Л3.1			
4.2	Расчет спектра частот кристаллической решетки полупроводников и диэлектриков, LO-ТО расщепление /Пр/	2	4	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.2 Л2.3Л3.1			
4.3	Освоение теоретического материала раздела 4 /Ср/	2	16	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л3.1			
	Раздел 5. Электрон-фононное взаимодействие							
5.1	Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия и операторы вторичного квантования фононов /Лек/	2	3	ОПК-1-31 ПК-1-31	Л2.1Л3.1			
5.2	Гамильтониан Фрелиха. /Лек/	2	2	ОПК-1-31 ПК-1-31	Л2.1Л3.1			
5.3	Освоение теоретического материала раздела 5 /Ср/	2	12	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л3.1			
5.4	Подготовка домашнего задания /Ср/	2	8	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1			P1
5.5	Коллоквиум по разделам 1-5 /Пр/	2	1	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1		КМ1	

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
--------	-------------------------	------------------------------------	------------------------

КМ1	Коллоквиум	ОПК-1-31;ПК-1-31;ОПК-1-У1;ПК-1-У1;ПК-1-В1;ОПК-1-В1	<p>Вопросы к коллоквиуму</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Квантовый характер колебаний решетки 2. Импульс фонона 3. Неупругое рассеяние фотонов на акустических фононах 4. Неупругое рассеяние рентгеновских лучей на фононах 5. Неупругое рассеяние нейтронов на фононах 6. Дискретная упругая цепочка 7. Квантовая теория непрерывной упругой струны 8. Акустические колебания с большой длиной волны. Фононы в изотропном кристалле. Связь с упругими постоянными. 9. Нормальные моды и фононы 10. Общее выражение для теплоемкости решетки 11. Теплоемкость при высоких температурах 12. Теплоемкость при низких температурах 13. Теплоемкость при промежуточных температурах. Модели Дебая и Эйнштейна 14. Метод малых смещений 15. Ангармонические эффекты в кристаллах. 16. Уравнение состояния и тепловое расширение кристалла 17. Тепловое расширение. Параметр Грюнайзена 18. Электрон-фононное взаимодействие 19. Локальные колебания 20. Квазигармоническое приближение 21. Общая теория функционала плотности и теорема Геллмана-Фейнмана 22. Теория возмущений и линейный отклик 23. Замороженные фононы
-----	------------	----------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)

Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
P1	Домашнее задание	ПК-1-В1;ПК-1-У1;ОПК-1-В1;ОПК-1-У1;ОПК-1-31;ПК-1-31	<p>В курсе предусмотрено выполнение домашнего задания в виде реферата</p> <p>Возможные темы домашнего задания</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Реализация метода TDEP 2. Численные методы расчета фононных спектров. Металлы и диэлектрики. 3. Фононный спектр и плотность фононных уровней. Особенности. Динамическая стабильность.

5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)

Экзамен не предусмотрен

5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)

«Отлично»	Обучающийся глубоко и содержательно раскрывает ответ на каждый теоретический вопрос, не допустив ошибок. Ответ носит развернутый и исчерпывающий характер
«Хорошо»	Обучающийся в целом раскрывает теоретические вопросы, однако ответ хотя бы на один из них не носит развернутого и исчерпывающего характера
«Удовлетворительно»	Обучающийся фрагментарно раскрывает содержание теоретических вопросов, допускает значительные неточности
«Неудовлетворительно»	Обучающийся не знает ответов на поставленные теоретические вопросы

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Ашкрофт Н., Мермин Н.	Физика твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1978
Л1.2	Киттель Ч., Гусев А. А.	Введение в физику твердого тела: учеб. руководство	Библиотека МИСиС	М.: МедиаСтар, 2006

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Займан Д. М., Бонч-Бруевич В. Д.	Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах: монография	Электронная библиотека	Москва: Изд-во иностр. лит., 1962
Л2.2	Борн М., Хуан Кунь, Лифшиц И. М.	Динамическая теория кристаллических решеток	Электронная библиотека	Москва: Издательство иностранной литературы, 1958
Л2.3	Займан Д.	Принципы теории твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Мир, 1974

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Векилов Ю. Х., Кузьмин Ю. М.	Дифракционные и резонансные методы исследования структуры металлов и сплавов: Разд.: Динамика кристаллической решетки и электрон-фононное взаимодействие: курс лекций для студентов спец. 11.05	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1989

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	VASP Vienna ab initio packet Пакет программ первопринципного моделирования	https://www.vasp.at/wiki/index.php/The_VASP_Manual		
Э2	ABINIT Пакет программ первопринципного моделирования	https://docs.abinit.org/tutorial/		
Э3	QUANTUM ESPRESSO Пакет программ первопринципного моделирования	https://www.quantum-espresso.org/resources/tutorials		
Э4	PHONOPY пакет для расчета фононных спектров	https://phonopy.github.io/phonopy/ PHONOPY		

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Microsoft Office
П.2	LMS Canvas
П.3	Python
П.4	Putty
П.5	ОС Linux (Ubuntu) / Windows
П.6	Xming server
П.7	VASP
П.8	ABINIT
П.9	QUANTUM ESPRESSO
П.10	PHONOPY

6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

И.1	Полнотекстовые российские научные журналы и статьи:
И.2	— Научная электронная библиотека eLIBRARY https://elibrary.ru/
И.3	Иностранные базы данных (доступ с IP адресов МИСиС):
И.4	— аналитическая база (индексы цитирования) Web of Science https://apps.webofknowledge.com
И.5	— аналитическая база (индексы цитирования) Scopus https://www.scopus.com/
И.6	— наукометрическая система InCites https://apps.webofknowledge.com
И.7	— научные журналы издательства Elsevier https://www.sciencedirect.com/

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
------	------------	-----------

Любой корпус Мультимедийная	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	комплект учебной мебели до 36 мест для обучающихся, мультимедийное оборудование, магнитно-маркерная доска, рабочее место преподавателя, ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus
Б-1003	Учебная аудитория:	доска аудиторная меловая, экран проекционный, проектор, документ камера, панель плазменная Panasonic, стационарные компьютеры 16 шт., пакет лицензионных программ MS Office, комплект учебной мебели
Читальный зал №3 (Б)		комплект учебной мебели на 44 места для обучающихся, МФУ Xerox VersaLink B7025 с функцией масштабирования текстов и изображений, 8 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus.

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Дисциплина относится к естественным наукам и требует значительного объема самостоятельной работы. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе.