

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Оценочные материалы по дисциплине

Электронная структура твердых тел

по направлению подготовки
03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
С.Н. Филимонов

Председатель УМК
О.М. Сюсина

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК-2 – способность проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные;
- ПК-1 Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-2.2 Анализирует и интерпретирует экспериментальные и теоретические данные, полученные в ходе научного исследования, обобщает полученные результаты, формулирует научно обоснованные выводы по результатам исследования;

ИПК-1.1 Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования, обобщает научные данные в соответствии с задачами исследования.

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля.

I. По дисциплине «Электронная структура твердых тел» вводится бально-рейтинговая система оценки знаний. Текущая успеваемость включает оценку активности студента на лекционных занятиях: в течение семестра проводится 24 лекционных занятий, на которых каждый студент оценивается от 0 до 5 баллов. Вопросы для повторения материалов каждой лекции размещены в системе LMS Moodle ТГУ (Learning Management System Modular Object-Oriented Dynamic Learning Environment) по ссылке: <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22063>.

Пример тестовых вопросов к вводному разделу курса:

- 1) Перечислите основные приближения зонной теории твердого тела.
- 2) Чему равна длина свободного пробега электронов в модели Зоммерфельда?
- 3) Что такое зона Бриллюэна?

Критерии оценивания: Промежуточная аттестация проводится в форме устного опроса, после которого студент может получить от 1 до 5 баллов. Набранные баллы вычисляются системой.

II. По теме 6 «Метода расчета зонного спектра» в курсе предусмотрены практические задания (ИПК 1.1, ИОПК 2.1).

Пример Задания по Теме 6.

Пример заданий по теме «Электронная структура твердых тел»

1) Даны рассчитанные в рамках метода псевдопотенциала зонные спектры ряда соединений и твердых растворов (NaCl, SiO₂, TiNb, и т.д.). Необходимо определить тип проводимости (проводник, диэлектрик, полупроводник) данного материала и величину запрещенной зоны.

Критерии оценивания: Дается полный и развернутый ответ в устной форме с объяснением особенностей зонного спектра вблизи уровня Ферми. Ответ студента оценивается по шкале от 1 до 5 баллов.

2) Задача: необходимо определить электронную концентрацию в кластере, представляющем собой тетраэдр с четырьмя атомами кремния в вершинах, пользуясь формулами для расчета кинетических коэффициентов из модели Зоммерфельда.

Критерии оценивания: результаты решенной задачи определяются оценками «зачтено» и «не зачтено». Оценка «зачтено» выставляется, если студент предъявляет правильное

письменное решение задачи и способен обосновать метод решения, понимает используемые формулы. При невыполнении указанных критериев оценки «зачтено» выставляется оценка «не зачтено».

III. Для углубленного изучения курса по основным разделам курса студентам предлагаются темы для рефератов по методам исследований электронной структуры (ОПК-2, ПК-1).

Темы для рефератов и учебно-методическая литература для самостоятельной работы по разделам дисциплины «Электронная структура твердых тел»:

Тема 1. Описание электронных свойств полупроводниковых материалов на основе кремния.

Задача реферата – сформировать базовые представления о спектре электронов в терминах зонной теории твердых тел, описать количественные характеристики спектров и привести экспериментальные данные о количестве зарядоносителей (электронов и дырок), энергии Ферми и ширине запрещенной зоны.

Предлагаемая литература:

1. Киреев П.С. Физика полупроводников. - М.: Высшая школа, 1975. - Гл. 2
2. Кудрявцева Н.В. Основы теории твердого тела. - Томск: Изд-во Том. ун-та, 1972. - Т. 1,2. - Гл. 1-4.
3. Брандт Н.Б., Чудинов С.М. Электронная структура металлов. - М.: Изд. Моск. ун-та, 1973. - Гл. 2.
4. Дж. Слэтер. Диэлектрики, полупроводники, металлы (М., Мир, 1969) с. 336–355.
5. К.В. Шалимова Физика полупроводников, М.: Энергоатомиздат, 1985.

Тема 2. Возможности и перспективы метода псевдопотенциала для расчета зонной структуры тонких полупроводниковых пленок на основе оксидов переходных металлов.

Задача реферата – сформировать компетенции и базовые знания об особенностях расчета спектров в рамках метода псевдопотенциала применительно к низкоразмерным системам.

Предлагаемая литература:

1. Алфёров, Ж.И. Двойные гетероструктуры: концепция и применения в физике, электронике и технологии / Ж.И. Алфёров // Успехи физических наук. Нобелевские лекции по физике. – 2002. – Т. 172, вып. 9. – С. 1068–1086.
2. Хартри, Д. Расчеты атомных структур / Д. Хартри – М.: ИИЛ, 1960. – 256 с.
3. Hamann, D.R. Semiconductor charge densities with hard-core and soft-core pseudopotentials / D.R. Hamann // Phys. Rev. Lett. – 1979. – Vol. 42. – P. 662 – 665.
4. Kerker, G.P. Non-singular atomic pseudopotentials for solid state applications / G.P. Kerker // J. Phys. C. – 1980. – Vol. 13. – P. L189 – L194.
5. Vanderbilt, D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism / D. Vanderbilt // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 41. – P. 7892 – 7895.
6. Laasonen, K. Car-Parrinello molecular dynamics with Vanderbilt ultrasoft pseudopotentials / K. Laasonen, A. Pasquarello, R. Car, C. Lee, D. Vanderbilt // Phys. Rev. B – 1992. – Vol. 47. – P. 10142 – 10153.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Экзамен в 8 семестре проводится в устной и письменной форме по экзаменационным билетам, которая предусматривает оценивание ответов (0-60 баллов). Каждый экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов, проверяющих

компетенции ИПК 1.1, ИОПК 2.2. К экзамену допускаются только студенты, успешно прошедшие текущую аттестацию. Примерный перечень теоретических вопросов:

Вопрос 1. Сформулируйте основные предположения модели Друде. Выведите формулу для расчета дифференциальной термо э.д.с.

Вопрос 2. Приведите доказательство теоремы Блоха.

В курсе «Электронная структура твердых тел» максимальная сумма баллов по дисциплине составляет 100 баллов и формируется следующим образом: 40 баллов по результатам текущей аттестации и 60 баллов по результатам промежуточной аттестации (экзамен). Итоговая оценка по дисциплине складывается из суммы баллов, полученной по итогам текущего контроля и промежуточной аттестации (устного экзамена). Итоговая оценка за экзамен ставится в соответствии с рейтинговой шкалой:

0-50 балла – «неудовлетворительно»;

51-70 баллов – «удовлетворительно»;

71-80 баллов – «хорошо»;

81-100 баллов – «отлично».

Перечень вопросов, выносимых на экзамен:

1. Основные предположения модели Друде.
2. Схема расширенных зон Бриллюэна для линейной цепочки и для плоской квадратной решетки.
3. Статическая электропроводность в модели Друде.
4. Первая зона Бриллюэна для решеток кубической сингонии.
5. Эффект Холла и магнетосопротивление.
6. Энергетический спектр в модели Кронига-Пенни.
7. Коэффициент теплопроводности металлов. Закон Видемана-Франца.
8. Закон дисперсии в модели Кронига-Пенни.
9. Дифференциальная термо э.д.с.
10. Заполнение энергетических зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники
11. Энергетический спектр электронов в основном состоянии в модели Зоммерфельда.
12. Симметрия волновых функций в точке Γ зоны Бриллюэна плоской квадратной решетки.
13. Способы описания энергетического спектра свободных электронов в основном состоянии.
14. Суть проблемы классификации электронных состояний в кристалле. Точечная группа симметрии плоской квадратной решетки.
15. Способы описания энергетического спектра свободных электронов в основном состоянии.
16. Суть проблемы классификации электронных состояний в кристалле. Точечная группа симметрии плоской квадратной решетки.
17. Свойства электронного газа в основном состоянии.
18. Классы группы C_{4v} . Линейные векторные пространства и операторы. Представления группы. Матричные представления. Векторное представление группы C_{4v} .
19. Расчет фермиевского интеграла общего типа. Температурная зависимость термодинамической энергии Ферми μ .
20. Симметрия энергетических зон. Группа волнового вектора.
21. Расчет вклада электронов в теплоемкость твердого тела.
22. Вырождение энергетических зон. Некоторые теоремы теории неприводимых представлений.
23. Расчет вклада электронов в теплоемкость твердого тела.

24. Вырождение энергетических зон. Некоторые теоремы теории неприводимых представлений.
25. Недостатки модели свободных электронов.
26. Метод псевдопотенциала
27. Уравнение Шредингера для кристалла.
28. Модель пустой решетки.
29. Первое адиабатическое приближение.
30. Структура спектра для направления Δ плоской квадратной решетки.
31. Приближение самосогласованного поля.
32. Группа волнового вектора точек Γ , X и направления Δ плоской квадратной решетки.
33. Решетка Браве
34. Симметрия волновых функций в различных энергетических зонах в направлении Δ .
35. Примитивная и условная ячейки решетки Браве. Ячейка Вигнера-Зейтца.
36. Модель почти свободных электронов. Закон дисперсии в этой модели.
37. Кристаллическая структура, решетка с базисом.
38. Поправка к энергии на границе зоны Бриллюэна в модели почти свободных электронов.
39. Теорема Блоха. Доказать теорему Блоха.
40. Изоэнергетические поверхности вблизи границы зоны Бриллюэна
41. Зона Бриллюэна. Уравнение поверхности зоны Бриллюэна
42. Метод ортогонализированных плоских волн.
43. Характер изменения \vec{k} в зоне Бриллюэна. Число разрешенных значений \vec{k} в зоне.
44. Модель кристалла и волновая функция в методе сильной связи.
45. Схема приведенных, расширенных и повторяющихся зон Бриллюэна.
46. Закон дисперсии в методе сильной связи.

Критерии оценивания.

В курсе «Электронная структура твердых тел» используется бально-рейтинговая система оценки знаний. Максимальная сумма баллов по дисциплине составляет 100 баллов, из которых 40 баллов – результаты текущей аттестации, а 60 баллов – результаты промежуточной аттестации (экзамен). Итоговая оценка по дисциплине складывается из суммы баллов, полученной по итогам текущего контроля и промежуточной аттестации (устного экзамена).

Критерии формирования оценки при промежуточной аттестации (экзамен)

Количество баллов	Результат, продемонстрированный студентом на экзамене
50-60	Выставляется студенту, твердо знающему материал, грамотно и по существу излагающему его, умеющему применять полученные знания на практике, способному самостоятельно принимать и обосновывать решения, оценивать их эффективность.
40-49	Выставляется студенту, твердо знающему материал, грамотно и по существу излагающему его, умеющему применять полученные знания на практике, но допускающему некритичные неточности в ответе
29-39	Выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно точно формулирующему базовые понятия.
>29	Выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных понятий дисциплины

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Основные теоретические вопросы (ИПК 1.1, ИОПК 2.2) по разделам дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Вопросы
1.	Классическая электронная теория металлов Друде.	Изложите основные предположения модели Друде. Как определяется статическая электропроводность металлов? Что такое эффект Холла и магнитосопротивление. Чему равна теплопроводность металлов. Сформулируйте закон Видеман-Франца. Выведите формулу для расчета дифференциальной термо э.д.с.
2.	Теория металлов Зоммерфельда.	Назовите основные отличия модели Зоммерфельда от модели Друде. Что из себя представляет энергетический спектр в модели свободных электронов в основном состоянии? Какие имеются способы описания энергетического спектра электронов? Назовите свойства электронного газа в основном состоянии. Выведите формулу распределения Ферми-Дирака. Чему соответствует вклад электронов в теплоемкость твердого тела? Сформулируйте основные положения Зоммерфельдовской теории проводимости металлов и её недостатки.
3.	Основные приближения зонной теории твердого тела.	Что из себя представляет уравнение Шредингера для кристалла. Когда применимо первое и второе адиабатическое приближение? Для каких материалов справедливо одноэлектронное приближение? Приближение Хартри и Хартри-Фока. Какие имеются подходы к решению одноэлектронного уравнения?
4.	Уровни энергии электрона в периодическом потенциале. Общие свойства.	Приведите примеры решеток Браве кристаллической структуры. Чем отличаются примитивная и условная ячейка решетки Браве? Что такое ячейка Вигнера-Зейтца? Приведите примеры кристаллических структур и решеток с базисом. Как построить обратную решетку? Сформулируйте и докажите теорему Блоха. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Дайте определение зоны Бриллюэна. Характер изменения \vec{k} в зоне Бриллюэна. Схема приведенных, расширенных и повторяющихся зон Бриллюэна. Схема расширенных зон Бриллюэна плоской квадратичной решетки. Первая зона Бриллюэна решеток кубической сингонии. Энергетический спектр электронов в модели Кронига-Пенни. Закон дисперсии в модели. Заполнение энергетических зон, металлы, диэлектрики, полупроводники. Плотность состояний. Особенности Ван-Хова.
5.	Классификация электронных уровней по типу симметрии в зоне Бриллюэна.	В чем суть проблемы классификации электронных уровней в кристалле. Точечная группа симметрии плоской квадратной решетки. Классы группы C_{4v} . Представление групп, матричные представления, Приводимые и неприводимые представления. Классификация собственных функций оператора Гамильтона в кристалле. Симметрия энергетических зон. Группа волнового вектора. Вырождение энергетических зон. Теоремы о неприводимых представлениях группы. Модель пустой решетки. Структура спектра для направления Δ плоской квадратной решетки. Группы волнового вектора точек Γ , X и направления Δ . Сим-

		метрия волновых функций в различных энергетических зонах в направлении Δ и точках Γ , X плоской квадратной решетки.
6.	Методы расчета энергетического спектра электронов в кристаллах.	Метод почти свободных электронов. Энергетическая щель. Метод ортогонализированных плоских волн. Метод псевдопотенциала. Геометрический структурный фактор решеток с базисом. Метод сильной связи, модель кристалла, закон дисперсии. Общие замечания по методу сильной связи. Метод присоединенных плоских волн.

Информация о разработчиках

Гриняев Сергей Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент кафедры физики металлов ФФ НИ ТГУ.