



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»



УТВЕРЖДАЮ
Директор ИЕиС
И.Ю. Мезин
30.01.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ В СПЕКТРОСКОПИИ
ТВЕРДОГО ТЕЛА**

Научная специальность
1.3.8. Физика конденсированного состояния

Уровень высшего образования - подготовка кадров высшей квалификации

Форма обучения
очная

Институт/ факультет	Институт естествознания и стандартизации
Кафедра	Физики
Курс	2
Семестр	4

Магнитогорск
2023 год

Рабочая программа составлена на основе ФГТ (приказ Минобрнауки России от 20.10.2021 г. № 951)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Физики
16.01.2023, протокол № 4

Зав. кафедрой _____ В.В.Мавринский

Рабочая программа одобрена методической комиссией ИЕиС
30.01.2023 г. протокол № 5

Председатель _____ И.Ю. Мезин

Рабочая программа составлена:

доцент кафедры Физики, канд. физ.-мат. наук _____ А.П. Давыдов

Рецензент:

доцент кафедры ПМий, канд. физ.-мат. наук _____ О.А.Торшина

Лист актуализации рабочей программы

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2023 - 2024 учебном году на заседании кафедры Физики

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ М.Б. Аркулис

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2024 - 2025 учебном году на заседании кафедры Физики

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ М.Б. Аркулис

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2025 - 2026 учебном году на заседании кафедры Физики

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ М.Б. Аркулис

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2026 - 2027 учебном году на заседании кафедры Физики

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ М.Б. Аркулис

1 Цели освоения дисциплины (модуля)

Целями освоения дисциплины (модуля) дисциплины «Физические основы моделирования в спектроскопии твердого тела» являются: являются получение знаний о физических основах спектроскопии твердого тела, способах моделирования взаимодействия излучения с поверхностью твердого тела.

2 Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) и планируемые результаты обучения

В результате освоения дисциплины (модуля) «Физические основы моделирования в спектроскопии твердого тела» обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

КНС-2	Способен владеть экспериментальными методами исследования и методами математического моделирования с использованием прикладных математических пакетов и программ
КНС-4	Способен применять на практике навыки составления научно-технической документации, научных отчетов, обзоров, докладов, написания статей по направлению физика конденсированного состояния и смежным направлениям

3. Структура, объём и содержание дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единиц 72 акад. часов, в том числе:

- контактная работа – 51 акад. часов;
- аудиторная – 51 акад. часов;
- внеаудиторная – 0 акад. часов;
- самостоятельная работа – 21 акад. часов;

Форма аттестации - зачет

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	Аудиторная контактная работа (в акад. часах)		Самостоятельная работа студента	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации
		Лек.	практ. зан.		
1. Электронная спектроскопия поверхности твердого тела					
1.1 Классификация методов электронной спектроскопии твердого тела	4	2	5	6	Проверка домашнего задания, устный опрос
1.2 Структура, электронное строение р динамика поверхности твердого		3	8	5	Проверка домашнего задания, устный опрос
Итого по разделу		5	13	11	
2. Методы моделирования рассеяния частиц в веществе					
2.1 Принципы моделирования рассеяния методом Монте-Карло	4	6/2И	9	6	Проверка домашнего задания, устный опрос
2.2 Распределение Ландау. Использование аналитических моделей прохождения электронов через вещество. Комбинирование сечений рассеяния		6/2И	12	4	Проверка домашнего задания, устный опрос
Итого по разделу		12/4И	21	10	
Итого за семестр		17/4И	34	21	зачёт
Итого по дисциплине		17/4И	34	21	зачет

4 Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестации

Представлены в приложении 1.

5 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) Основная литература:

1. Владимиров, Г. Г. Физика поверхности твердых тел : учебное пособие / Г. Г. Владимиров. — Санкт-Петербург : Лань, 2016. — 352 с. — ISBN 978-5-8114-1997-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — <https://e.lanbook.com/reader/book/71707/#1> (дата обращения: 28.10.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Бублик, В. Т. Дифракционные методы изучения материалов и приборных структур : рентгеновская рефлектометрия : учебное пособие / В. Т. Бублик, К. Д. Щербачев, М. И. Воронова. — Москва : МИСИС, 2016. — 84 с. — ISBN 978-5-87623-982-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/reader/book/93596/#1> (дата обращения: 28.10.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

б) Дополнительная литература:

1. Владимиров, Г. Г. Физическая электроника. Эмиссия и взаимодействие частиц с твердым телом : учебное пособие / Г. Г. Владимиров. — Санкт-Петербург : Лань, 2013. — 368 с. — ISBN 978-5-8114-1515-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/38838> (дата обращения: 28.10.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Ягодовский, В. Д. Адсорбция : учебное пособие / В. Д. Ягодовский. — 2-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 219 с. — ISBN 978-5-00101-656-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/135481> (дата обращения: 28.10.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. Зисман, Г. А. Курс общей физики : учебное пособие : в 3 томах / Г. А. Зисман, О. М. Тодес. — 7-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, [б. г.]. — Том 3 : Оптика. Физика атомов и молекул. Физика атомного ядра и микрочастиц — 2019. — 504 с. — ISBN 978-5-8114-4103-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/115202> (дата обращения: 28.10.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

в) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Программное обеспечение

Наименование ПО	№ договора	Срок действия лицензии
MS Office 2007 Professional	№ 135 от 17.09.2007	бессрочно
7Zip	свободно распространяемое ПО	бессрочно
STATISTICA в.6	К-139-08 от 22.12.2008	бессрочно
Maple 14 Classroom License	К-113-11 от 11.04.2011	бессрочно
MathWorks MathLab v.2014 Classroom License	К-89-14 от 08.12.2014	бессрочно

MathCAD v.15 Education University Edition	Д-1662-13 от 22.11.2013	бессрочно
MAXIMA	свободно распространяемое ПО	бессрочно

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Название курса	Ссылка
Электронная база периодических изданий East View Information Services, ООО «ИВИС»	https://dlib.eastview.com/
Национальная информационно-аналитическая система – Российский индекс научного цитирования (РИНЦ)	URL: https://elibrary.ru/project_risc.asp
Информационная система - Единое окно доступа к информационным ресурсам	URL: http://window.edu.ru/
Электронные ресурсы библиотеки МГТУ им. Г.И. Носова	https://magtu.informsystema.ru/Marc.html?locale=ru
Международная реферативная база данных по чистой и прикладной математике zbMATH	http://zbmath.org/
Информационная система - Банк данных угроз безопасности информации ФСТЭК России	https://bdu.fstec.ru/

Примерные аудиторные контрольные работы (АКР):

АКР №1 «Электронная спектроскопия поверхности»

1. Электроны ускоряются в синхротроне до энергии $3 \cdot 10^8$ эВ. Сконструировать прибор для измерения формы спектра γ -квантов, излучаемых тонкой внутренней вольфрамовой мишенью, бомбардируемой электронным пучком.
2. Параллельный пучок электронов с энергией 25 эВ падает на тонкий пликристаллический экран, изготовленный из металла, имеющего кубическую решетку с постоянной решетки равно 5 ангстрем. Когда была сделана фотография дифракционной картины, образованной прошедшими через экран электронами, обнаружилось, что угловой диаметр наименьшего круга равен 120° . Какова глубина потенциальной ямы для данного металла?
3. Узкий пучок электронов с кинетической энергией $T=25$ кэВ проходит сквозь тонкую поликристаллическую пленку и образует на экране на расстоянии $L=200$ мм от пленки систему дифракционных колец. Диаметр первого кольца $D=13.0$ мм. Вычислить постоянную решетки, если известно, что она ГЦК.

АКР №2 «Методы моделирования рассеяния частиц в веществе»

1. Узкий пучок моноэнергетических электронов падает под углом скольжения $\theta = 30^\circ$ на естественную грань монокристалла алюминия. Расстояния между соседними кристаллическими плоскостями, параллельными этой грани монокристалла, $d = 0.20$ нм. При некотором ускоряющем напряжении U_0 наблюдается максимум зеркального отражения. Найти U_0 , если известно, что следующий максимум зеркального отражения возникает при увеличении ускоряющего напряжения в $\eta = 2.25$ раза.
2. Пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов U , падает на поверхность металла, внутренний потенциал которого $U_i = 15$ В. Найти: а) показатель преломления металла для электронов с $U = 150$ В; б) отношение U/U_i , при котором показатель преломления отличается от единицы не более чем на $\eta = 1.0\%$.
3. В электронограмме дебаевского типа от поликристаллической пленки с кубической решеткой отношение диаметров первых двух колец равно 1:1.4. Имея в виду, что диаметры этих колец значительно меньше расстояния между пленкой и экраном, определить, тип решетки (ГЦК или ОЦК).

Внеаудиторная самостоятельная работа обучающихся осуществляется в виде изучения литературы по соответствующему разделу с проработкой материала и выполнения домашних заданий.

Примерные индивидуальные домашние задания (ИДЗ):

ИДЗ №1 «Электронная спектроскопия поверхности»

1. Узкий пучок электронов с кинетической энергией $T = 10$ кэВ проходит поликристаллическую алюминиевую фольгу, образуя на экране систему дифракционных колец. Вычислить межплоскостное расстояние, соответствующее отражению третьего порядка от некоторой системы кристаллических плоскостей, если ему отвечает дифракционное кольцо диаметром $D = 3.20$ см. Расстояние между экраном и фольгой $\ell = 10.0$ см.

2. Определить длину волны излучения, при которой становятся прозрачными металлы, например (а) медь, (б) натрий.

3. Оптические постоянные непрозрачного кубического материала при заданной длине волны λ можно определить, измеряя коэффициенты отражения для угла падения φ линейно поляризованного света при плоскостях поляризации, параллельной и перпендикулярной к плоскости падения. Показать, что этот метод не пригоден для φ_0 , близкого к 0, 45 и 90 градусов.

ИДЗ №2 «Методы моделирования рассеяния частиц в веществе»

1. Температура t° в любой точке (x, y, z) на поверхности однородного единичного шара постоянна и равна

$$t(x, y, z) = 20 \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{2}y\right) \cos\left(\frac{\pi}{2}z\right).$$

Определить методом Монте-Карло температуру в центре шара.

2. Необходимо измерить мельчайшие нормальные смещения поверхности. Опишите три наиболее чувствительных метода и оцените минимальное смещение, которое можно зарегистрировать каждым из предложенных методов.

3. Найти коэффициент отражения для металлов как функцию частоты ω падающего на него излучения на основе теории Друде. Рассмотреть следующие предельные случаи: а) $\tau\omega \ll 1$; б) $1 \ll \tau\omega \ll \tau\omega_p$; в) $\omega \gg \omega_p$.

Приложение 4 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

а) Планируемые результаты обучения и оценочные средства для проведения промежуточной аттестации:

Оценочные средства
<p>КНС-2 Способен владеть экспериментальными методами исследования и методами математического моделирования с использованием прикладных математических пакетов и программ</p> <p>проанализировать анализировать спектры и обработать данные математического моделирования спектров;</p> <p>1. Параллельный пучок электронов с энергией 25 эВ падает на тонкий поликристаллический экран, изготовленный из металла, имеющего кубическую решетку с постоянной решетки равно 5 ангстрем. Когда была сделана фотография дифракционной картины, образованной прошедшими через экран электронами, обнаружилось, что угловой диаметр наименьшего круга равен 120°. Какова глубина потенциальной ямы для данного металла?</p> <p>2. Пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов U, падает на поверхность металла, внутренний потенциал которого $U_i = 15$ В. Найти: а) показатель преломления металла для электронов с $U = 150$ В; б) отношение U/U_i, при котором показатель преломления отличается от единицы не более чем на $\eta = 1.0\%$.</p> <p>в математических пакетах Maple, MathCad, GAUSSIAN, GULP</p> <p>1. Определить длину волны излучения, при которой становятся прозрачными металлы, например (а) медь, (б) натрий.</p> <p>2. Необходимо измерить мельчайшие нормальные смещения поверхности. Опишите три наиболее чувствительных метода и оцените минимальное смещение, которое можно зарегистрировать каждым из предложенных методов.</p>
<p>КНС-4 Способен применять на практике навыки составления научно-технической документации, научных отчетов, обзоров, докладов, написания статей по направлению физика конденсированного состояния и смежным направлениям</p>

Оценочные средства

написание научных докладов, статей, обзоров (в том числе на иностранном языке)

1. Потери энергии заряженными частицами
2. Процессы, происходящие с фотонами в веществе
3. Электромагнитные каскады
4. Зависимость сечения рассеяния от частоты
5. Угловая зависимость коэффициентов рассеяния
6. Влияния различных компонентов на процессы рассеяния
7. Проблема создания «истинного» генератора случайных чисел
8. Отличие случайной последовательности чисел от неслучайной?
9. Генератор псевдослучайных и случайных чисел (ГПСЧ и ГСЧ)
10. Линейный конгруэнтный ГПСЧ

написание научных докладов, статей по решенной задаче

1. Узкий пучок электронов с кинетической энергией $T=25$ кэВ проходит сквозь тонкую поликристаллическую пленку и образует на экране на расстоянии $L=200$ мм от пленки систему дифракционных колец. Диаметр первого кольца $D=13.0$ мм. Вычислить постоянную решетки, если известно, что она ГЦК.

2. В электронограмме дебаевского типа от поликристаллической пленки с кубической решеткой отношение диаметров первых двух колец равно 1:1.4. Имея в виду, что диаметры этих колец значительно меньше расстояния между пленкой и экраном, определить, тип решетки (ГЦК или ОЦК).

1. Оптические постоянные непрозрачного кубического материала при заданной длине волны λ можно определить, измеряя коэффициенты отражения для угла падения φ линейно поляризованного света при плоскостях поляризации, параллельной и перпендикулярной к плоскости падения. Показать, что этот метод не пригоден для φ_0 , близкого к 0, 45 и 90 градусов.

2. Найти коэффициент отражения для металлов как функцию частоты ω падающего на него излучения на основе теории Друде. Рассмотреть следующие предельные случаи: а) $\tau\omega \ll 1$; б)

1 $\ll \tau\omega \ll \tau\omega_p$; в) $\omega \gg \omega_p$.

б) Порядок проведения промежуточной аттестации, показатели и критерии оценивания:

Промежуточная аттестация по дисциплине включает теоретический вопрос, позволяющий оценить уровень усвоения обучающимися знаний, и одно практическое задание, выявляющее степень сформированности умений и владений.

Зачет по данной дисциплине проводится в устной форме по билетам, каждый из которых включает 1 теоретический вопрос и одно практическое задание.

Показатели и критерии оценивания теоретического вопроса и практического задания:

– на оценку «зачтено» – обучающийся демонстрирует высокий уровень сформированности компетенций, всестороннее, систематическое и глубокое знание учебного материала, свободно выполняет практическое задание, свободно оперирует знаниями, умениями, применяет их в ситуациях повышенной сложности.

– на оценку «не зачтено» – обучающийся демонстрирует знания не более 20% теоретического материала, допускает существенные ошибки, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.