

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет

Кафедра фізики металів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ¹

Квантова теорія твердого тіла

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність 104 Фізика та астрономія
освітній ступінь Бакалавр
освітня програма Фізика
спеціалізований
вибірковий блок Фізика наноструктур в металах та кераміках
вид дисципліни Вибіркова **ВК7**

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2021/2022</u>
Семестр	<u>7</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>4</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>залік</u>

Викладачі: доцент Плющай Інна Вячеславівна

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 2021/2022 н.р.  (підпис, ПІБ, дата) «10» 07 2021 р.

на 20__/20__ н.р. (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2021

Розробники²: Плющай Інна Вячеславівна, кандидат фіз.-мат. наук, доцент, доцент кафедри фізики металів (вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізики металів


— (підпис) —


(Курилюк В.В.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 11 від «10» червня 2021 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії


(підпис)

(Оліх О.Я.)
(прізвище та ініціали)

² Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри (циклової комісії – для коледжів), науково-методичної комісії факультету/інституту (радї навчального закладу - коледжу), підписується завідувачем кафедри (головою циклової комісії), головою науково-методичної комісії факультету/інституту (головою ради) і затверджується заступником декана/директора інституту з навчальної роботи (заступником директора коледжу).

ВСТУП

1. Мета дисципліни – отримання глибоких та систематичних знань у галузі фізики твердого тіла (електронної теорії, кінетичних, коливних, магнітних та оптичних властивостей кристалів), ознайомлення з основними методами теорії твердого тіла (насамперед квазічастинковим підходом).

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи загальної фізики, електродинаміки, статистичної фізики та квантової механіки, а також особливості кристалічної будови твердих тіл.
2. Вміти застосовувати попередні знання з курсів математичного аналізу, диференціальних та інтегральних рівнянь, загальної фізики, електродинаміки, статистичної фізики та квантової механіки, а також спеціального курсу «Кристалографія»;
3. Володіти елементарними навичками математичних перетворень, опису кристалічної будови твердих тіл, аналізу результатів експериментальних досліджень структури та властивостей твердих тіл.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

В рамках курсу «Квантова теорія твердого тіла» розглядаються: загальний гамільтоніан кристалу та адіабатичне наближення; методи розрахунку електронної підсистеми кристалів; теоретичні основи кінетичних процесів та термоелектричних явищ; коливальні властивості кристалів; теоретичні основи магнітних та оптичних властивостей твердих тіл; квазічастинковий підхід в теорії твердого тіла: електрони, фонони, магнони, ексітони тощо.

4. Завдання (навчальні цілі) – оволодіння методами і принципами квантової теорії твердого тіла необхідними в майбутній практичній діяльності фахівця, вміннями застосовувати закони і принципи теорії твердого тіла для пояснення експериментальних результатів, отриманих при виконанні кваліфікаційних робіт та при подальшій роботі за фахом.

Згідно вимог Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія», ОПП "Фізика", спеціалізований вибіркового блоку «Фізика наноструктур в металах та кераміках»), дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних компетентностей:

Інтегральної:

- Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та/або астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та/або астрономії і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

Загальних:

- ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- ЗК3. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.
- ЗК7. Навички здійснення безпечної діяльності.

спеціальних (фахових, предметних):

- ФК1. Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії.
- ФК2. Здатність використовувати на практиці базові знання з математики як математичного апарату фізики і астрономії при вивченні та дослідженні фізичних та астрономічних явищ і процесів.
- ФК7. Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту.

5. Результати навчання за дисципліною: (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1	Знати та розуміти основні поняття електронної теорії твердого тіла: поверхня Фермі, самоузгоджене поле, теорема Блоха, квазіхвильовий вектор, зонна структура, густина електронних станів, ефективна маса тощо; методи розрахунку електронної структури починаючи від наближення майже вільних та сильнозв'язаних електронів та закінчуючи переліком сучасних методів електронних розрахунків; теоретичні основи кінетичної теорії твердого тіла: рівняння Больцмана та його наближений розв'язок у випадку електропровідності та теплопровідності; теоретичне підґрунтя термоелектричних явищ;	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік</i>	20
1.2	знати та розуміти основні поняття розділу динаміка твердого тіла: силова матриця, температура Дебая, фонони та фононний спектр тощо; основні положення та відмінності наближень Дебая та Ейнштейна для розрахунку теплоємності твердих тіл; основи теорії атомного магнетизму, діамагнетизм та парамагнетизм діелектриків. Особливості магнітних властивостей електронів провідності; теоретичні основи ферромагнетизму: обмінний інтеграл, гамільтоніан Гейзенберга, спінові хвилі, магнони, модель Ізінга; основні процеси, що зумовлюють оптичні властивості твердих тіл, особливості оптичних властивостей металів; квазічастинковий підхід в теорії твердого тіла: електрони, фонони, магнони, екситони тощо.	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік</i>	20
2.1	Вміти: вільно володіти загально вживаними термінами теорії твердого тіла: поверхня Фермі, обмінний інтеграл, зонна структура, ефективна маса, силова матриця, температура Дебая, фонони, магнони, екситони, плазмони тощо;	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік</i>	20
2.2	Вміти знаходити у довідниковій літературі відповідні параметри, що характеризують властивості твердих тіл, наприклад: енергія та поверхня Фермі, хвильовий вектор Фермі для електронних	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм</i>	10

* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

	процесів, температура Дебая для опису коливних властивостей, обмінний інтеграл для аналізу магнітних властивостей тощо;		самостійної роботи, залік	
2.3	Вміти знаходити та використовувати відповідний теоретичний матеріал для пояснення експериментальних результатів, отриманих при виконанні кваліфікаційних робіт;	Лекції Самостійна робота	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	10
2.4	Вміти виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв'язування фізичних задач і моделювання фізичних систем;	Лекції Самостійна робота	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	10
3.1	Демонструвати спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією, ведення професійної наукової дискусії;	Лекції Самостійна робота	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	5
3.2	Письмово відображувати та презентувати результати своїх досліджень українською мовою.	Лекції Самостійна робота	Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	5

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	3.2
Програмні результати навчання								
ПРН1. Знати, розуміти та вміти застосовувати основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних 8 фізичних явищ і процесів для розв'язування	+	+	+					

складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та/або астрономії.								
ПРНЗ. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій.				+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1: РН 1.1, 2.1-3.1 - 25 балів / 10 балів
2. Захист реферату 1: РН 1.1, 2.1-2.4, 3.2 - 10 балів / 5 балів
3. Модульна контрольна робота 2: РН 1.2, 2.1-3.1- 25 балів / 10 балів
4. Захист звітів реферату 2: РН 1.2, 2.1-2.4, 3.2 - 10 балів / 5 балів
5. Підсумкова модульна контрольна робота: РН 1.1-3.2 - 30 балів / 10 балів

- підсумкове оцінювання у формі заліку

- підсумкове оцінювання у формі заліку

Підсумкова оцінка з освітнього компонента, підсумковою формою контролю за яким встановлено залік, визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання. Оцінки нижче мінімального порогового рівня до підсумкової оцінки не додаються.

Обов'язковим для отримання позитивної підсумкової оцінки (60 балів і вище та «зараховано») є здача двох рефератів та написання модульних контрольних робіт.

Перескладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.

7.2. Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні тематичних лекцій з Розділів 1-2 відповідно.

Захист рефератів 1-2 проводиться упродовж семестру.

Підсумкова модульна контрольна робота проводиться наприкінці семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	Самостійна робота
Розділ 1. Електронні стани ідеального кристалу та кінетичні явища.				
1	<p>ТЕМА 1. Електронні стани ідеального кристалу. Місце та роль фізики твердого тіла серед фізичних наук. Загальний гамільтоніан кристалу. Адіабатичне наближення. Електронна та іонна підсистеми. Електронні стани. Наближення самоузгодженого поля. Рівняння Хартрі та рівняння Хартрі-Фока. Обмінний інтеграл. χ-наближення. Кристалічний потенціал. Граничні умови Борна-Кармана. Теорема Блоха. Загальні властивості електрона в періодичному полі. Наближення майже вільних електронів. Зони Брілюена, поведінка хвильової функції електронів на границях зон Брілюена та умови дифракції рентгенівських променів в кристалі. Розширена та зведена зонна схема. Зонна структура та типи кристалів. Симетрія енергетичних зон. Наближення сильно зв'язаних електронів. Кристалічний потенціал. Незвідна частина зони Брілюена. Дисперсія електронів кубічних кристалічних ґраток в наближенні найближчих сусідів. Інтеграл перекриття та ширина зони. Ефективна маса. Електронні стани нанорозмірних об'єктів. Динаміка електронів. Рух електрона у зовнішньому полі. Дирка в майже заповненій зоні. Огляд сучасних методів розрахунку електронної структури матеріалів та відповідні сучасні програмні пакети: https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_quantum_chemistry_and_solid-state_physics_software Загальні властивості хвильових функцій електронів в металах. Сучасні методи розрахунку енергетичних зон: метод комірок, метод ортогональних плоских хвиль, елементи теорії псевдопотенціалу. Статистика електронів в кристалах: статистика Фермі-Дірака, рівень Фермі, сфера Фермі, хвильовий вектор Фермі. Розподіл Фермі-Дірака при нульовій та ненульовій температурах. Хімічний потенціал. Густина електронних станів. Густина електронних станів в 1D, 2D та 3D випадках. Поверхня Фермі. Електронна теплоємність. Квазікласичне рівняння руху електрона в кристалі. Рівняння для квазіімпульсу та швидкості. Тензор узагальненої оберненої ефективної маси. с.р.с. Вивчення матеріалу лекцій. Застосування теорії груп до трансляційної симетрії кристалу. Електронні стани неідеального кристалу. Теорема Вань'є. Рівняння для хвильової функції електрона в полі домішки.</p>	16		25

2	<p>ТЕМА 2. Кінетичні явища</p> <p>Кінетичні явища. Кінетичне рівняння Больцмана. Нерівноважна функція розподілу електронів. Інтеграл розсіяння електронів.</p> <p>Кінетичні явища. Електропровідність. Наближення часу релаксації. Тензор електропровідності та довжина вільного пробігу. “Зміщення” поверхні Фермі та дрейфова швидкість. Розрахунок часу релаксації.</p> <p>Розрахунок електричного струму та потоку тепла в кристали. Кінетичні коефіцієнти. Зв’язок між кінетичними коефіцієнтами. Електронна теплопровідність. Закон Відемана-Франца.</p> <p>Термоелектричні явища: ефект Зеебека, ефект Пельтьє та ефект Томсона. Співвідношення Кельвіна. Ефект Хола. Постійна Хола. Двохзонна модель та магнетоопір.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Циклотронний резонанс. Ефект Де-Гааза-Ван Альфена. Експериментальні методи дослідження форми поверхні Фермі.</p> <p>Розрахунок часу релаксації при розсіянні електронів на заряджених домішках.</p>	8		15
	<i>Підсумкова модульна контрольна робота 1</i>	1		2
Розділ 2. Коливальні, магнітні та оптичні властивості кристалів. Надпровідність.				
3	<p>ТЕМА 3. Динаміка кристалічної ґратки. (22 год.)</p> <p>Динаміка ґратки. Коливання ідеальної кристалічної ґратки. Природа сил взаємодії атомів у кристалі, рівняння руху кристалічної ґратки. Силова матриця.</p> <p>Коливання простої одноатомної та складної - двоатомної одномірних ґраток. Залежність частоти коливань атомів від квазіхвильового вектора. Оптичні та акустичні гілки.</p> <p>Коливання трьохмірної ґратки. Поперечні та повздовжні коливання. Динамічна матриця. Акустичні та оптичні коливання. Анізотропія. Експериментальні дослідження фононних спектрів. Нормальні координати коливань кристалічної ґратки. Квантовомеханічна теорія коливань кристалічної ґратки. Фонони. Статистика фононів. Анггармонізм та теплове розширення.</p> <p>Теплоємність ґратки. Випадок низьких та високих температур. Наближення Дебая та Ейнштейна. Температура Дебая. Порівняння з експериментом.</p> <p>Розсіяння електронів на коливаннях ґратки. Нормальні процеси та процеси перескоку (U-процеси). Температурна поведінка електроопору.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Локальні та квазілокальні коливання. Функція розподілу частот коливань.</p> <p>Розсіяння електронів на коливаннях ґратки. Полярони.</p>	10		15
4	<p>ТЕМА 4. Магнітні властивості твердих тіл. (18 год.)</p> <p>Гамільтоніан атома у магнітному полі. Атомний магнетизм – загальна формула. Ларморівський діаманетизм діелектриків з повністю заповненими атомними оболонками.</p> <p>Парамагнетизм діелектриків, що містять іони з частково заповненими електронними оболонками. Основний стан іонів з частково заповненими оболонками. Правило Хунда. Парамагнетизм Ван-Флека та Ланжевена. Закон</p>	6		10

	<p>Кюрі.</p> <p>Парамагнетизм електронів провідності у металах та напівпровідниках. Діамагнетизм електронів провідності.</p> <p>Гамільтоніан феромагнетику та антиферомагнетику. Модель Гейзенберга. Спінові хвилі. Магнони. Намагніченість феромагнетику та магнонна теплоємність.</p> <p>Модель Ізінга. Теорія молекулярного поля Вейса. Намагніченість: поведінка поблизу критичної точки.</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Магнонна теплоємність феромагнетику та антиферомагнетику.</p>			
5	<p>ТЕМА 5. Оптичні властивості твердих тіл. (16 год.).</p> <p>Макроскопічна теорія – оптичні властивості речовини. Комплексний показник заломлення. Коефіцієнти відбивання та поглинання. Співвідношення Крамерса—Кроніга.</p> <p>Дисперсія та поглинання системи невзаємодіючих атомів. Дійсна та уявна частина діелектричної проникності.</p> <p>Поглинання ґраткою. Вертикальні процеси. Багатофонові процеси. Різницеві та сумарні процеси.</p> <p>Оптичні властивості кристалів. Міжзонні оптичні переходи. Прямі “дозволені” переходи і прямі “недозволені” переходи. екситон Френкеля. екситон Ваньє-Мотта.</p> <p>Оптичні властивості металів: плазмова частота, плазмони, ультрафіолетова прозорість металів. Коефіцієнт відбивання та співвідношення Хагена-Рубенса. Теорія Друде, залежність коефіцієнту відбивання та поглинання від частоти (три області).</p> <p>с.р.с. Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Взаємодія між електронами. Діелектрична проникність кристалу.</p>	3		6
	Підсумкова модульна контрольна робота	1		2
	ВСЬОГО	45		75

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

Загальний обсяг 120 год.³, в тому числі:

Лекцій – **45 год.**

Семінари – **0 год.**

Практичні заняття – **0 год.**

Лабораторні заняття – **0 год.**

Тренінги – **0 год.**

Консультації - **0 год.**

Самостійна робота - **75 год.**

³ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА⁴:

Основна: (Базова)

1. Martin R. Electronic Structure. Basic theory and practical methods. Cambridge 2004
2. Physics of Solids I (MIT open courses) <https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-231-physics-of-solids-i-fall-2006/index.htm>
3. Theory of Solids I (MIT open courses) <https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-511-theory-of-solids-i-fall-2004/>
4. Theory of Solids II (MIT open courses) <https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-512-theory-of-solids-ii-spring-2009/>
5. Займан Дж. Принципы теории твердого тела, М.Мир, 1966.
6. Маделунг О. Теория твердого тела. М. Наука, 1980.
7. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М. Мир, 1979.
8. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука , 1978.- 792 с.
9. Поплавко Ю. М Фізика твердого тіла : підручник. В 2-х томах. / Ю. М. Поплавко. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017. – Том 1: Структура, квазічастинки, метали, магнетика. – 415 с
10. Стройтелова Н.І., Кісельов Є.М. Фізика твердого тіла. Навчальний посібник – ЗДІА, Запоріжжя, 2018. – 145 с.
11. Пінкевич І.П., Сугаков В.І. Теорія твердого тіла. Навчальний посібник для студентів фізичних спеціальностей університетів. – К.: ВПЦ “Київський університет”, 2006. – 334 с.
9. Martin, Joseph D. (2015). "What's in a Name Change? Solid State Physics, Condensed Matter Physics, and Materials Science" (PDF). Physics in Perspective. 17 (1): 3–32. doi:10.1007/s00016-014-0151-7

Додаткова:

1. Репецкий С.П. Теория твердого тіла. Невпорядковані середовища. – К.: Наукова думка, 2008. – 308 с.
2. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М. Наука, 1967.
3. Физика твердого тела/Энциклопедический словарь под ред. В.Г.Барьяхтара. - Киев: Наукова думка, 1966. - 452 с.
4. Репецкий с.п. Теорія твердого тіла. Електронні стани кристалів. Навчальний посібник. Київ, 2004.-102 с.
5. Верещагин И.К. Физика твердого тела. М. Высш.школа, 2001, 237 стр.
6. Гуревич А.Г. Физика твердого тела. ВНУ-Санкт-Петербург, 2004, 320 стр.
7. Т.Жданов, А.Худина. Лекции по физике твердого тела. М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1988.
8. Ципенюк Ю.М. Физические основы сверхпроводимости. - М.: Изд-во МФТИ, 1996. – 96с.

⁴ В тому числі Інтернет ресурси