

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

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:
Декан физического факультета



С.Н. Филимонов

«15» апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины

Квантовая теория твердого тела

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
«Фундаментальная физика»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2021

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.ДВ.01.01.11

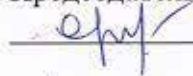
СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП



О.Н. Чайковская

Председатель УМК



О.М. Сюсина

Томск – 2021

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК 2 – Способен 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;

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

2. Задачи освоения дисциплины

- Освоить понятийный аппарат и методы квантовой теории твердого тела.
- Научиться применять понятийный аппарат и методы квантовой теории твердого тела для решения практических задач профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 7, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Математический анализ, Линейная алгебра и аналитическая геометрия, Дифференциальные уравнения, Теория вероятностей, Теория функций комплексного переменного, Общая физика, Классическая механика, Квантовая механика, Методы математической физики, Программирование, Практикум по численным методам.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часа, из которых:

- лекции: 16 ч.;
- практические занятия: 16 ч.;
- в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Основы зонной теории твердых тел.

Основы зонной теории твердых тел. Теорема Блоха. Граничные условия Борна-Кармана. Свойства электронного газа в основном состоянии. Энергетические зоны в одномерном случае. Схема расширенной и приведенной зон. Энергетическая щель.

Тема 2. Теория металлов.

Основные предположения модели Друде и Зоммерфельда. Статическая электропроводность металла. Теплопроводность металла. Закон Видемана-Франца. Недостатки теории свободных электронов.

Тема 3. Уравнение Шредингера.

Адиабатическое и одноэлектронное приближение. Вариационный метод Ритца. Метод самосогласованного поля Хартри. Уравнение Хартри-Фока.

Тема 4. Энергетические зоны и классификация кристаллов по характеру зонного спектра.

Схема расширенной и приведенной зон. Энергетическая щель. Теория энергетических зон. Классификация кристаллов по характеру зонного спектра. Свойства симметрии и законов дисперсии. Таблицы характеров. Соотношения совместности. Зоны Бриллюэна. Поверхность Ферми. Плотность состояний. Метод Харрисона для построения поверхности Ферми.

Тема 5. Уровни электрона в периодическом потенциале.

Общий подход к решению уравнения Шредингера в случае слабого потенциала. Теория возмущения и слабые периодические потенциалы. Уровни энергии вблизи Брэгговской плоскости. Метод сильной связи (общая формулировка). Общие свойства электронного спектра в приближении сильной связи. Применение метода для расчета электронных уровней ГЦК кристалла.

Тема 6. Методы зонной структуры.

Метод ортогонализированных плоских волн (ОПВ) и присоединенных плоских волн (ППВ). Метод функции Грина или Корринги, Кона и Ростокера. Метод псевдопотенциала. Линейные и полно-потенциальные методы расчета (ЛППВ и ЛМТО).

Тема 7. Взаимодействие между электронами.

Экранирование статического поля и поля примеси. Теория экранировки Томаса-Ферми и Линдхарта. Эффект Кона. Диэлектрическая проницаемость в полупроводниках и диэлектриках. Плазменные колебания. Приближение Хартри-Фока с учетом экранировки.

Тема 8. Оптические свойства твердых тел.

Макроскопическая и микроскопическая теория оптических свойств. Соотношения Крамерса-Кронига. Дисперсия и поглощение. Поглощение решеткой. Многофононные процессы. Внутризонные и междузонные переходы. Взаимодействие с электронами проводимости.

Тема 9. Магнитные явления в кристаллах.

Диамагнетизм и парамагнетизм. Взаимодействие твердых тел с магнитным полем. Орбитальная магнитная восприимчивость. Восприимчивость диэлектриков с полностью и частично заполненными атомными оболочками. Ларморовский диамагнетизм. Правила Хунда. Закон Кюри Вейса. Восприимчивость металлов. Электростатическая природа магнитного взаимодействия. Магнитные свойства двухэлектронной системы (синглетные и триплетные состояния).

Тема 10. Спиновые гамильтонианы и модель Гейзенберга.

Типы обменного взаимодействия: прямой обмен, сверхобмен, косвенный обмен. Локализованные моменты в сплавах. Магнитное упорядочение. Основное состояние Гейзенберговских ферро-антиферромагнетиков. Спиновые волны. Поправки к закону Кюри. Теория молекулярного поля.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты выполнения контрольных работ, заданий и тестов по материалам курса, и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом): посещаемость – максимальный балл 10, выполнение контрольных заданий – 40, тестов – 10. Контрольная точка проводится не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в 7 семестре проводится в письменной форме по экзаменационным билетам.

Результаты зачета определяются оценкой «зачтено» исходя из результатов ответов на зачете (40%) и текущей аттестации в течение семестра (60%) в соответствии с балльной шкалой оценивания: количество набранных баллов более 59 — «зачтено», менее 59 баллов — «не зачтено».

Экзаменационный билет состоит из двух частей.

Первая часть представляет собой тест из 2-х основных вопросов, проверяющих сформированность компетенции ОПК 2 в соответствии с индикатором ИОПК 2.2.

Ответы даются в развернутой форме.

Вторая часть содержит 2 дополнительных вопроса из списка контрольных вопросов по курсу (приведен в разделе 11), проверяющих сформированность компетенции ПК 1.1 и соответствие индикатору достижения компетенции ИПК 1.1. Ответ на вопрос второй части дается в краткой форме, включающей краткую интерпретацию полученных результатов.

Примерный перечень теоретических вопросов

Вопрос 1. Дайте определение первой и n-ой зоне Бриллюэна. Нарисуйте электронный спектр в приближении свободных электронов в приведенной и расширенной зонной схеме.

Вопрос 2. В случае свободных электронов плотность уровней при энергии Ферми может быть записана в виде $g(E_F) = mk_F / \hbar^2 \pi^2$. Покажите, что общее выражение

$g_n(E) = \int_{S_n(E)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla E_n(k)|}$ принимает такой вид, если $E_n(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ и (сферическая)

поверхность Ферми целиком лежит в пределах одной элементарной ячейки.

Дополнительные вопросы.

Вопрос 1. Сформулируйте граничные условия Борна-Кармана для кристаллов разной размерности.

Вопрос 2. Сформулируйте правила Хунда и их применение к твердому телу.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=21883>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Перечень вопросов, выносимых на зачет.

1. Электроны в твердом теле, адиабатическое и одноэлектронное приближение.
2. Уравнение Хартри и Хартри-Фока.
3. Граничные условия Борна-Кармана для кристаллов разной размерности.
4. Теорема Блоха и ее доказательство.
5. Зоны Бриллюэна. Схема приведенных и расширенных зон.
6. Поверхность Ферми и ее качественное представление с помощью подхода Харрисона.

7. Классификация кристаллов по характеру зонного спектра.
8. Эффекты обмена и корреляции в теории функционала электронной плотности.
9. Общий подход к решению уравнения Шредингера в случае слабого потенциала.
10. Энергетические уровни вблизи Брэгговской плоскости.
11. Приближения сильной связи для электронов в периодическом кристалле.
12. Методы расчета зонной структуры из первых принципов.
13. Метод МТ-орбиталей и его варианты.
14. Метод псевдопотенциала. Ультрамягкие псевдопотенциалы.
15. Основные положения теории металлов Друде.
16. Описание теплопроводности и электропроводности металла в рамках теории Друде.
17. Недостатки теории свободного электронного газа. Электрон-электронное взаимодействие.
18. Экранировка статического поля и примеси.
19. Теория экранировки Томаса-Ферми и Линдхарта.
20. Макроскопическая теория оптических свойств. Соотношения Крамерса-Кронига.
21. Дисперсия и поглощение. Мнимая и действительная часть диэлектрической проницаемости. Плазменные частоты.
22. Поглощение решеткой. Многофононные процессы. Межзонные переходы
23. Взаимодействие твердых тел с магнитным полем. Намагниченность. Диамагнетизм и парамагнетизм.
24. Правила Хунда и их применение к твердому телу.
25. Закон Кюри-Вейса. Восприимчивость металлов. Парамагнетизм Паули и диамагнетизм электронов проводимости.
26. Магнитные свойства двухэлектронной системы (синглетные и триплетные состояния).
27. Спиновый гамильтониан и модель Гейзенберга.
28. Типы обменного взаимодействия.
29. Спиновые волны.
30. Основное состояние Гейзенберговского антиферромагнетика.
31. Основное состояние Гейзенберговского ферромагнетика. Магноны.

в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.

1. Зонная теория твердых тел. Свойства электронного газа в основном состоянии. Энергетические зоны.
2. Теория свободных электронов в металле. Модель Друде и Зоммерфельда. Теплопроводность металла. Закон Видемана-Франца.
3. Адиабатическое и одноэлектронное приближение. Вариационный метод Ритца. Метод самосогласованного поля Хартри. Уравнение Хартри-Фока.
4. Теория энергетических зон. Схема расширенной и приведенной зон. Энергетическая щель. Теория энергетических зон. Классификация кристаллов по характеру зонного спектра. Свойства симметрии и законов дисперсии.
5. Уравнение Шредингера в случае слабого потенциала. Теория возмущений и слабые периодические потенциалы. Уровни энергии вблизи Брэгговской плоскости. Метод сильной связи.
6. Метод функции Грина или Корринги, Кона и Ростокера. Метод псевдопотенциала. Линейные и полно-потенциальные методы расчета.
7. Экранирование статического поля и поля примеси. Теория экранировки Томаса-Ферми и Линдхарта. Эффект Кона. Диэлектрическая проницаемость в полупроводниках и диэлектриках. Плазменные колебания. Приближение Хартри -Фока с учетом экранировки.
8. Макроскопическая и микроскопическая теория оптических свойств. Соотношения Крамерса-Кронига. Дисперсия и поглощение. Поглощение решеткой. Многофононные

процессы. Внутризонные и междузонные переходы. Взаимодействие с электронами проводимости.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Самостоятельная работа студента включает:

- углубленное теоретическое изучение разделов курса при подготовке к лекционным и практическим занятиям;
- подготовку к обсуждению материала, в том числе самостоятельный поиск необходимых источников информации, включая научно-образовательные ресурсы сети Интернет;
- подготовку к зачету.

Вопросы, вынесенные на самостоятельное изучение.

1. Описание эффекта Холла и магнетосопротивления в рамках теории Друде и Зоммерфельда.

2. МТ-приближение для кристаллического потенциала. Современные подходы для улучшения МТ-приближения.

3. За пределами приближения независимых электронов. Дальнейшие возможности улучшения эффектов обмена и корреляций.

4. Полно-потенциальные методы расчета зонной структуры.

5. Экспериментальные методы исследования зонных структур и поверхности.

6. Учет дальнедействующего вклада в потенциал методом парциальных волн. Сингулярность экранирования и эффект Кона.

7. Метод псевдопотенциала: современное представление и его эволюция.

8. Современные программные комплексы для расчетов электронного спектра (Wien 2k, VASP)

9. Методы интерполяции и интегрирования в пространстве волнового вектора. Линейный метод интерполяции. Квадратичный метод интерполяции. Метод тетраэдронов.

10. Уравнения движения электронов в представлении Ванье. Примесные уровни. Представление экситонов. Рассеяние электронов примесями.

11. Правила Хунда и их применение к твердому телу.

12. Парамагнетизм Паули и диамагнетизм электронов проводимости.

13. Модель Изинга для описания магнитного поведения кристаллов.

Темы для рефератов и учебно-методическая литература для самостоятельной работы по разделам дисциплины «Квантовая теория твердого тела»:

Тема 1. Современные представления о зонной теории кристаллов.

Литература:

1. Достижения электронной теории металлов/ под ред. П. Цише, Г. Леменна.– М.: Мир, 1984. Т.1, 2.
2. Немошкаленко В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела/ В.В. Немошкаленко, В.И. Антонов. – Киев: Наукова Думка. 1985. – 408 с.
3. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. – М.: Мир, 1978. – 658 с.
4. Кулькова С.Е. Линейные методы расчета зонной структуры твердых тел (учебное пособие). – Томск: Изд-во ТГУ, 2001. – 56 с.
5. Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры. – М.: Мир, 1969. – 360 с.
6. Джонс Г. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристалле. – М.: Мир, 1968, – 264 с.
7. Крэкнелл А. Поверхность ферми/ А. Крэкнелл, К. Уонг. – М.: Атомиздат, 1978. – 352 с.
8. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела/ Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М.: Мир, 1979. Т. 1, 2.

9. Bechstedt F., Fuchs F., Kresse G. Ab-initio theory of semiconductor band structures: New developments and progress // Phys. Status Solidi B. – 2009. – V. 246. – P. 1877-1892. DOI: 10.1002/pssb.200945074 (в свободном доступе)
10. Hafner J. Ab-initio simulation of materials using VASP: density-functional theory and beyond // J. Comput. Chem. – 2008. – V. 29. – P. 2044-2078

Тема 2. Квантовый эффект Холла.

Литература:

1. фон Клитцинг К. Квантовый эффект Холла: Нобелевские лекции по физике – 1985. УФН 150, 107 (1986).
2. Ландау Л.Д. Теоретическая физика, в 10 т, т. 3 Квантовая механика (нерелятивистская теория)/Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2002, 808 с.
3. Бурмистров И.С. Введение в теорию целочисленного квантового эффекта Холла. – М.: ИПХФ РАН, 2015, 96 с.
4. Кейдж М. Квантовый эффект Холла/ М. Кейдж, А. Чэнг, С. Гирвин. –М.: Мир , 1989. – 404 с.
5. Аплеснин С.С. Основы спинтроники. – Санкт-Петербург: Лань, 2010. – 287 с.
6. Гантмахер В.Ф. Электроны в неупорядоченных средах. –М.: Физматлит, 2013. – 288 с.
7. Симунин М.М. Учебно-методическое пособие для самостоятельной работы студентов по дисциплине "Физика низкоразмерных структур". –М.: МИЭТ., 2011. – 127 с.
8. Уайт Р. Квантовая теория магнетизма. – М.: Мир, 1985. – 303 с.

Тема 3. Открытие и свойства графена.

Литература:

1. Губин С.П. Графен и родственные наноформы углерода/ С.П. Губин, С.В. Ткачев. – М.: Ленанд, 2014. – 101 с.
2. Katsnelson M.I. Graphene. Carbon in Two Dimensions. – Cambridge: Cambridge University Press, 2007. – 363 p.
3. Fialkovsky I.V., Marachevsky V.N., Vassilevich D.V. Finite temperature Casimir effect for grapheme// Phys. Rev. B. 2011. V.84. 035446.
4. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. etc. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme// Nature. 2005. V. 438. P. 197.
5. Peres N.M.R., Guinea F., Castro Neto A.H.. Electronic Properties of Disordered Two-Dimensional Carbon// Phys. Rev. B. 2006. V.73. 125411.
6. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of grapheme// Nature Materials. 2007. V.6. 183.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела : [учебное руководство] / Ч. Киттель; [пер. под общ. ред. А. А. Гусева]. – М: Альянс, 2013. – 790 с.
2. Матухин В.Л. Физика твердого тела (учебное пособие [для студентов технических специальностей])/ В.Л. Матухин, В.Л. Ермаков.–Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2016. –218 с.
3. Оура К. Введение в физику поверхности/ К. Оура [и др.]. – М.: Наука, 2006. – 490 с.
4. Дорфман Я.Г. Магнитные свойства и строение вещества. – М: Изд-во ЛКИ, 2010. – 376 с.

б) дополнительная литература:

1. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела/ Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М.: Мир, 1979. Т. 1, 2.
2. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М.: Наука, 1967. – 492 с.

3. Блекмор Дж. Физика твердого тела. М.: Мир, 1988. – 608 с.
4. Займан Дж. Принципы физики твердого тела. М.: Мир, 1974. – 416 с.
5. Харрисон У. Теория твердого тела. М.: Мир, 1972. – 616 с.
6. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. М.: Мир, 1978. – 639 с.
7. Теория ферромагнетизма металлов и сплавов. Под ред. С.В. Вонсовского. 1963, – 536 с.
8. Немошкаленко В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела/ В.В. Немошкаленко, В.И. Антонов. – Киев: Наукова Думка. 1985. – 408 с.
9. Вонсовский С.В. Квантовая физика твердого тела/ С.В. Вонсовский, М.И. Кацнельсон. –М.: Наука, 1983. – 336 с.
10. Займан Дж.. Принципы физики твердого тела. – М.: Мир, 1974. – 416 с.
11. Крэкнелл А. Поверхность Ферми/ А. Крэкнелл, К. Уонг. – М.: Атомиздат, 1978. – 352 с.
12. Нокс Р. Симметрия в твердом теле/ Р. Нокс, А. Голд. – М.: Наука, 1979. – 424 с.
13. Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры. М.: Мир, 1969. – 360 с.
14. Джонс Г. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристалле. – М.: Мир, 1968. – 264 с.
15. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. – М.: Мир, 1978. –658 с.
16. Маделунг О. Теория твердого тела. – М.: Наука, 1980. – 416 с.
17. Достижения электронной теории металлов. Под редакцией П. Цише, Г. Леммана. – М.: Мир, 1984, Т.1,2.
18. Матиас Л.Ф., Вуд Дж., Свитендик А.С. Расчет электронных энергетических зон с помощью симметризованных плоских волн. – В кн.: Вычислительные методы в теории твердого тела/ под. Ред. А.А. Овчинникова. – М.: Мир, 1975. – 75-163 с..
19. Кулькова С.Е. Линейные методы расчета зонной структуры твердых тел (учебное пособие). – Томск: Изд-во ТГУ, 2001. – 56 с.
20. Хейне В., Коен М., Уейер Д.. Теория псевдопотенциала/ В. Хейне, М. Коен, Д. Уейер. – М.: Мир, 1973. – 557 с.
21. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. – М.: Мир, 1968. – 366 с.

в) ресурсы сети Интернет:

Введение в зонную теорию твердых тел <https://infopedia.su/3xeb6.html>

Примеры зон Бриллюэна <http://lampx.tugraz.at/~hadley/ss1/bzones>

Квантовая механика и квантовая теория поля, в том числе современные квантово-механические методы теории твердого тела

<http://www.theoretical-physics.net/dev/quantum/main.html>

Теория функционала электронной плотности

https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory

Physics Word поисковая система: <http://physicsweb.org/article/world/11/9/3/1/>

<https://physicsworld.com/>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook); системы компьютерной вёрстки LaTeX;

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате, оснащенные системой («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Кулькова Светлана Евгеньевна, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра теоретической физики физического факультета ТГУ, профессор.