

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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

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

Томск – 2025

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

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. Задачи освоения дисциплины

- Ознакомиться с основными представлениями об электронном спектре твердых тел, методах его расчета и анализа, изучить теоретические основы расчета зонной структуры.
- Научиться применять аппарат квантовой механики для анализа электронных свойств твердых тел и решать практические задачи в профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

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 8, экзамен.

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:

общая физика, основы физики твердого тела, кристаллография, квантовая механика.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

- лекции: 24 ч.;
- практические занятия: 24 ч.;

в том числе практическая подготовка: 24 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Классическая электронная теория металлов Друде.

Основные предположения модели Друде. Статическая электропроводность металлов. Эффект Холла и магнитосопротивление. Теплопроводность металлов. Закон Видеман-Франца. Дифференциальная термо э.д.с.

Тема 2. Теория металлов Зоммерфельда.

Отличие модели Зоммерфельда от модели Друде. Энергетический спектр в модели свободных электронов в основном состоянии. Способы описания энергетического спектра электронов. Плотность электронных состояний. Свойства электронного газа в основном состоянии. Распределение Ферми-Дирака. Вклад электронов в теплоемкость твердого тела. Зоммерфельдовская теория проводимости металлов. Недостатки модели свободных электронов.

Тема 3. Основные приближения зонной теории твердого тела.

Уравнение Шредингера для кристалла. Первое и второе адиабатическое приближение. Одноэлектронное приближение. Приближение Хартри и Хартри-Фока. Анализ подходов к решению одноэлектронного уравнения.

Тема 4. Уровни энергии электрона в периодическом потенциале. Общие свойства.

Решетка Браве кристаллической структуры. Примитивная и условная ячейка решетки Браве. Ячейка Вигнера-Зейтца. Кристаллическая структура, решетка с базисом. Обратная решетка. Теорема Блоха. Доказательство теоремы Блоха. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Зона 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.

Тема 5. Классификация электронных уровней по типу симметрии в зоне Бриллюэна.

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 . Симметрия волновых функций в различных энергетических зонах в направлении Δ и точках Γ , X плоской квадратной решетки.

Тема 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.

9. Текущий контроль по дисциплине

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

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в восьмом семестре проводится в устной и письменной форме по билетам. Продолжительность экзамена 1.5 часа.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22063>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=81>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

Перечень вопросов, выносимых на экзамен:

1. Основные предположения модели Друде.
2. Статическая электропроводность в модели Друде. Закон Ома и проводимость.
3. Эффект Холла и магнетосопротивление. Константа Холла.
4. Коэффициент теплопроводности металлов. Закон Видемана-Франца.
5. Дифференциальная термо э.д.с.
6. Энергетический спектр электронов в основном состоянии в модели Зоммерфельда.
7. Способы описания энергетического спектра свободных электронов в основном состоянии.
8. Свойства электронного газа в основном состоянии.
9. Функция распределения Ферми-Дирака.
10. Задача о теплоемкости твердого тела в квантовой теории: Фермиевские интегралы общего типа, температурная зависимость термодинамической энергии Ферми.
11. Расчет вклада электронов в теплоемкость твердого тела. Удельная электронная и полная теплоемкость.
12. Оценка кинетических коэффициентов в модели Зоммерфельда. Недостатки модели свободных электронов.
13. Уравнение Шредингера для кристалла.
14. Первое и второе адиабатическое приближение.
15. Приближение самосогласованного поля. Одноэлектронное приближение.
16. Метод Хартри-Фока.
17. Решетка Браве кристаллической структуры.
18. Примитивная и условная ячейки решетки Браве. Ячейка Вигнера-Зейтца.
19. Кристаллическая структура, решетка с базисом. Обратная решетка.
20. Теорема Блоха (с доказательством).
21. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Зона Бриллюэна.
22. Уравнение поверхности зоны Бриллюэна.
23. Схема приведенных, расширенных и повторяющихся зон Бриллюэна. Схема расширенных зон Бриллюэна для линейной цепочки атомов.
24. Схема расширенных зон Бриллюэна для плоской квадратной решетки.
25. Первая зона Бриллюэна решеток кубической сингонии.
26. Характер изменения \vec{k} в зоне Бриллюэна. Число разрешенных значений \vec{k} в зоне.
27. Энергетический спектр в модели Кронига-Пенни.
28. Закон дисперсии в модели Кронига-Пенни.
29. Физический смысл появления запрещенных зон. Заполнение энергетических зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники.
30. Суть проблемы классификации электронных состояний в кристалле. Определение группы. Точечная группа симметрии плоской квадратной решетки.

31. Классы группы C_{4v} . Линейные векторные пространства и операторы. Представления группы. Матричные представления.

32. Приводимые и неприводимые представления. Классификация собственных функций оператора Гамильтона в кристалле. Теоремы теории неприводимых представлений.

33. Симметрия энергетических зон. Группа волнового вектора.

35. Модель пустой решетки. Структура спектра для направления Δ плоской квадратной решетки.

36. Группа волнового вектора точек Γ , X и направления Δ плоской квадратной решетки.

37. Структура спектра для направления Δ плоской квадратной решетки.

38. Классификация энергетических зон в точке Γ зоны Бриллюэна плоской квадратной решетки.

39. Методы расчета зонного спектра. Общая постановка задачи.

40. Методы расчета зонного спектра. Модель пустой решетки.

41. Приближение слабосвязанных электронов.

42. Волновая функция и выражение для полной энергии в методе сильной связи.

43. Закон дисперсии в методе сильной связи (для ГЦК-решетки Браве).

44. Изоэнергетические поверхности вблизи границы зоны Бриллюэна.

45. Метод ортогонализированных плоских волн.

46. Метод псевдопотенциала.

в) План практических занятий по дисциплине.

1. Задачи на группы симметрии кристаллов. Классы симметрии. Фактор-группа.

2. Основные приближения и методы расчета зонного спектра.

3. Топология поверхности Ферми.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Самостоятельная работа студента включает:

– углубленное теоретическое изучение разделов курса при подготовке к лекционным и семинарским занятиям;

– подготовку к обсуждению материала, в том числе самостоятельный поиск необходимых источников информации, включая научно-образовательные ресурсы сети Интернет;

– подготовку к экзамену.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Н. Ашкрофт, Н. Меркин, Физика твердого тела. Том. 1. – М.: Мир, 1979.

2. Д. Займан, Принципы теории твердого тела. – М.: Мир, 1966.

3. А. И. Ансельм, Введение в теорию полупроводников. – М.: Мир, 1978.

4. S. H. Simon, Lecture Notes for Solid State Physics. – Oxford University, 2012.

5. Н. Ibach, Н. Luth, Solid-state Physics. – Springer, 2003.

6. Эллиот Д., Добер П. Симметрия в физике. - М.: Мир, 1983. - Гл. 2-4.

7. Джонс Г. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах. - М.: Мир, 1968. - Гл. 1-3.

8. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. - М.: Высшая школа, 2000. - Гл. 7.

б) дополнительная литература:

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: ФММ, 1978. - Гл. 10-11

2. Вонсовский С.В., Концельсон М.И. Квантовая физика твердого тела. - М.: Наука, 1983. - Гл. 3-3. Харрисон У. Теория твердого тела. - М.: Мир, 1972. - Гл. 1-2.

4. Брандт Н.Б., Чудинов С.М. Электронная структура металлов. - М.: Изд. Моск. ун-та, 1973. - Гл. 2.
 5. Физическое металловедение. Под ред. Кана Р.У., Хаазена П. - М.: Metallurgia, 1987. - Т.1. - Гл. 6.
- в) ресурсы сети Интернет:
1. MIT lectures «Band Theory of Solids». – MIT, электронный ресурс, 1999. – URL: <https://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-091sc-introduction-to-solid-state-chemistry-fall-2010/electronic-materials/13-band-theory-of-solids/>
 2. ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
 3. Симметрия кристаллов и псевдосимметрии / Чупрунов Е.В. – ННГУ им Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, 2015 г. – 658 с. – URL: <https://www.geokniga.org/books/17209>
 4. Bilbao Crystallographic server [Electronic resource] / Electronic data. – URL: <https://www.cryst.ehu.es/>
 5. Учебные пособия по кристаллографии / СПбГУ (кафедра кристаллографии). – URL: <https://crystal.geology.spbu.ru/ucheba/uchebnye-materialy/uchebnye-posobiya>
 6. Учебные пособия по кристаллографии / МГУ (кафедра кристаллографии и кристаллохимии). – URL: <http://cryst.geol.msu.ru/about/>
 7. Лекции по теоретическому материаловедению. – URL: <https://sctms.ru/training/>

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 OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook); системы компьютерной вёрстки LaTeX; системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica, Waterloo Maple;
 - публично доступные облачные технологии (GoogleDocs, Яндекс диск и т.п.).
- б) информационные справочные системы:
- Электронный каталог [Электронный ресурс] / НИ ТГУ, Научная библиотека ТГУ. – Электрон. дан. – Томск, 2008-2016. – URL: <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?theme=system>
 - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – Томск, 2011. – URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
 - ЭБС Издательство «Лань» [Электронный ресурс]:/ – Электрон. дан. – СПб., 2010. – URL: <http://e.lanbook.com/>
 - ЭБС Консультант студента [Электронный ресурс] / ООО «Политехресурс». – М, 2012. – URL: <http://www.studentlibrary.ru/>
 - Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
 - ЭБС Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012. – URL: <http://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, оборудованные соответствующей техникой (в том числе «Актру»), для реализации учебного процесса в смешанном формате.

15. Информация о разработчиках

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