

Российская академия наук  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт электрофизики  
Уральского отделения Российской академии наук  
(ИЭФ УрО РАН)

«Утверждаю»  
Врио. директора ИЭФ УрО РАН



В.Г. Шпак  
«6» февраля 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ  
«Электронные свойства твёрдых тел»  
Б1.В.ДВ.1-1

Специальность 03.06.01 – «Физика и астрономия»

Программу составил:

в.н.с. ИЭФ УрО РАН  
д.ф.-м.н.

Некрасов И.А.

СОГЛАСОВАНО:

Зам. директора по НР ИЭФ УрО РАН  
к.т.н.

« 6 » февраля 2015 г.

Иванов М.Г.

Учёный секретарь ИЭФ УрО РАН  
к.ф.-м.н.

« 6 » февраля 2015 г.

Кокорина Е.Е.

Рабочая программа утверждена на заседании Учёного совета ИЭФ УрО РАН.  
Протокол № 1 от 06.02.2015 г.

№	Индекс	Содержание
1	УК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность.
2	УК-2	Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.
3	УК-3	Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.
4	УК-5	Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития.

## 1. Цели и задачи дисциплины.

Целью данного курса является ознакомление с основами компьютерного моделирования электронной структуры кристаллических твёрдых тел. Для достижения этой цели теоретический материал, изложенный на лекциях, закрепляется внеклассным решением задач по каждому разделу курса.

## 2. Требования к уровню освоения содержания дисциплины.

В результате изучения дисциплины аспирант должен:

### **Знать:**

– как получаются модельные электронные дисперсии, а также электронные дисперсии реальных кристаллических твёрдых тел.

### **Уметь:**

– рассчитать электронную структуру простейших кристаллов и анализировать полученные электронные дисперсии на основе простейших модельных представлений.

### **Владеть:**

– теоретической базой для анализа электронной структуры и навыками численного счёта электронной структуры простейших кристаллов.

## 3. Компетенции.

<i>№ n/n</i>	<i>Индекс</i>	<i>Содержание</i>
1.	ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.
2.	УК-1	Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.
3.	УК-3	Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.
4.	УК-4	Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития.

5.	ПК-1	Способность ставить, формализовать и решать задачи, умением системно анализировать научные проблемы, генерировать новые идеи и создавать новое знание.
6.	ПК-2	Способность проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы и информационных технологий с учётом отечественного и зарубежного опыта.
7.	ПК-3	Способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза информации в избранной области физических исследований.
8.	ПК-4	Способность применять на практике умения и навыки в организации исследовательских и проектных работ, способность самостоятельно организовывать и проводить научные исследования и внедрять их результаты в качестве члена или руководителя коллектива.

#### 4. Объём дисциплины и виды учебной работы.

<i>Вид учебной работы</i>	<i>Всего</i>		<i>Период обучения</i>
	<i>часов</i>	<i>ЗЕТ</i>	
Общая трудоёмкость дисциплины	108	3	первый курс
Аудиторные занятия, в т.ч.:			
Лекции	36	1	
Практические занятия (ПЗ)			
Самостоятельная работа	54	1,5	
Контроль самостоятельной работы	18	0,5	

#### 5. Содержание дисциплины.

##### 5.1. Разделы дисциплин и виды занятий

<i>№ n/n</i>	<i>Раздел дисциплины</i>	<i>Лекции</i>	<i>ПЗ</i>	<i>Сам. раб.</i>	<i>Контр. сам. раб.</i>
1	Краткое введение в предмет (историческая ретроспектива).	2		3	
2	Основная вычислительная задача зонных методов.	4		6	2
3	Водородоподобный атом.	4		6	2

4	Общие замечания к электронному строению многоэлектронных атомов.	4		6	2
5	Кристаллическая структура твёрдых тел (основные понятия).	4		6	2
6	Обратная решётка (основные понятия).	2		3	2
7	Приближение почти свободных электронов.	2		3	1
8	Метод сильной связи.	4		6	2
9	Обобщённый метод ЛКАО, двухцентровое приближение, интегралы Костера-Слетера.	2		3	1
10	Основы численных расчётов электронной структуры реальных веществ.	4		6	2
11	Основные программные пакеты для зонных расчётов электронной структуры кристаллических твёрдых тел.	4		6	2
Всего час.		36		54	18

## 5.2. Содержание разделов дисциплины.

### 5.2.1. Краткое введение в предмет (историческая ретроспектива).

Определение кристаллического твёрдого тела. Идеальный кристалл. Зонные методы расчёта электронной структуры кристаллических твёрдых тел в современной физике твёрдого тела.

### 5.2.2. Основная вычислительная задача зонных методов.

Соотношения де Бройля, понятие волнового вектора  $k$ . «Иллюстрация» вывода стационарного уравнения Шрёдингера. Представления. Оператор импульса в координатном представлении. Собственные значения и собственные функции операторов координаты и импульса в координатном и импульсном представлении. Движение свободного электрона в вакууме (гамильтониан, понятие энергетической дисперсии, волновая функция).

### 5.2.3. Водородоподобный атом.

Плоский ротатор, магнитное квантовое число  $m$ . Пространственный ротатор, орбитальное квантовое число  $l$ . Общий вид угловых зависимостей

решения задачи о пространственном ротаторе для различных  $m$  и  $l$ . Боровская теория водородоподобного атома (гипотеза о квантовании момента импульса). Атомная система единиц. Атом водорода (гамильтониан, радиальное уравнение Шрёдингера). Решения радиального уравнения Шрёдингера для различных  $m$  и  $l$  (радиальное распределение вероятности). Волновая функция водородоподобного атома.

#### **5.2.4. Общие замечания к электронному строению многоэлектронных атомов.**

Атом гелия (гамильтониан, волновая функция). Полная энергия многоэлектронного атома. Остов. Вариационный принцип. Вывод уравнений Хартри-Фока. Молекулярный ион водорода. Метод ЛКАО. Метод молекулярных орбиталей. Метод валентных связей. Метод конфигурационного взаимодействия. Схема численного расчёта уровней энергии в многоэлектронных атомах. Периодическая таблица элементов Менделеева.

#### **5.2.5. Кристаллическая структура твёрдых тел (основные понятия).**

Вектора трансляции. Элементарная ячейка. Примитивные структуры и структуры с базисом. Ячейка Вигнера-Зейца. Типы трансляционной группы симметрии (сингонии). Решётка Бравэ, классификация решёток Бравэ, пространственные группы симметрии. Точечная группа симметрии (базовые понятия теории групп, пример, группы «треугольника» и «квадрата»). Разложение по неприводимым представлениям (теоретико-групповой анализ). Примеры: электрон в кристаллическом поле, электрон в электрическом поле. Номенклатура точечных групп симметрии.

#### **5.2.6. Обратная решётка (основные понятия).**

Зона Бриллюэна. Теорема Блоха и следствия из неё. Периодический потенциал. Свободный электрон на «пустой» решётке (энергетическая дисперсия в картине приведенных зон).

#### **5.2.7. Приближение почти свободных электронов.**

Электрон в слабом периодическом потенциале (плоские волны, решение уравнения Шрёдингера, зонная структура).

#### **5.2.8. Метод сильной связи.**

Решение уравнения Шрёдингера и вид энергетической дисперсии в методе сильной связи. Решёточное преобразование Фурье (блоховская сумма). Функции Блоха. Функции Ванье. Решение одномерной цепочки

с одинаковыми узлами для случая ближайших соседей (понятие гибридизации, энергии гибридных состояний, состав гибридных волновых функций, энергетические зоны). Решение одномерной цепочки с неэквивалентными узлами для случая ближайших соседей (предельные случаи сильной и слабой гибридизации). Решение одномерной цепочки с димеризацией для случая ближайших соседей. Учёт влияния вторых соседей. Поверхность Ферми. Соответствие между поверхностью Ферми и энергетической дисперсией. Плотность электронных состояний. Соответствие между энергетической дисперсией и плотностью состояний (1, 2, 3-х мерные случаи). Особенности Ван-Хова. Плотность состояний для свободного электрона. Численные методы интегрирования по зоне Бриллюэна: метод тетраэдров, метод Гаусса, прямое суммирование по точкам.

### **5.2.9. Обобщенный метод ЛКАО, двухцентровое приближение, интегралы Костера-Слетера.**

Каноническая зонная теория. Типы межорбитальных перекрытий. Угловая зависимость величины перекрытия от типа перекрывающихся орбиталей. Пример применения: оценка величины расщепления d-уровня в октаэдрическом и тетраэдрическом окружении.

### **5.2.10. Основы численных расчётов электронной структуры реальных веществ.**

Метод ячеек. Приближение маффин-тин потенциала. Приближение маффин-тин сфер. Приближение атомных сфер. Теория функционала электронной плотности. Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнение Кона-Шема. Вычисление обменно-корреляционного потенциала: приближения LDA, LSDA, GGA.

### **5.2.11. Основные программные пакеты для зонных расчётов электронной структуры кристаллических твёрдых тел.**

Метод присоединенных плоских волн (ППВ), псевдопотенциальные методы, метод линеаризованных маффин-тин орбиталей (ЛМТО). Практика с использованием ЭВМ: расчёт «кристаллического водорода» в ПК, ГЦК и ОЦК структурах. Анализ дисперсий и плотностей состояний. Расчёт «кристаллического водорода» в ПК, ГЦК и ОЦК структурах для различных магнитных упорядочений (ФМ, различные типы АФМ). Расчёт гипотетического кристалла с двумя сортами атомов (например Li-H, H-O) в ПК, ГЦК и ОЦК структурах для изучения эффектов гибридизации.

### 5.3. Самостоятельная работа аспирантов.

5.3.1. Проработка лекционного материала по конспектам и учебной литературе (48 ч.).

5.3.2. Подготовка к контролю по дисциплине (6 ч.).

### 6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

#### 6.1. Рекомендуемая литература.

##### а) основная литература:

1. Кучинский, Э.З., Некрасов, И.А., Садовский, М.В. Обобщенная теория динамического среднего поля в физике сильно коррелированных систем (Обзор) // Успехи физических наук, 2012. – Т. 115. С. 1–60.

2. Ландау, Л.Д., Лифшиц, Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. – Москва: Наука, 1989.

3. Ашкрофт, Н., Мермин, Н. Физика твёрдого тела. Т. 1, 2. – М.: Мир, 1975.

##### б) методическое обеспечение:

<http://iep7.iep.uran.ru/iep/aspir.htm>

#### 6.2. Информационное обеспечение.

№ п/п	Ссылка на информационный ресурс	Наименование разработки в электронной форме	Доступность
	<a href="http://elibrary.ru/">http://elibrary.ru/</a>	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU	доступ свободный

### 7. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

Для проведения занятий по дисциплине используются: компьютерный класс, расчётные серверы лаборатории теоретической физики ИЭФ УрО РАН, оборудование: оргтехника, проектор.



Программа составлена с учётом рекомендаций по формированию основных профессиональных образовательных программ послевузовского профессионального образования для обучающихся в аспирантуре (№ 0160 от 17 июля 2012 г. Серия 90Л01 № 0000173) и на основе Федеральных государственных требований к структуре основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура), утверждённых приказом Министерства образования и науки РФ от 16.03.2011 г. № 1365 (зарегистрирован Министерством юстиции РФ 10.05.2011 г., регистрационный № 20700).