

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

«Утверждаю»  
Директор ИЭФ УрО РАН

\_\_\_\_\_  
С.А. Чайковский  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**«Электронные свойства твёрдых тел»**  
**Б1.Э.1-1**

для обучающихся по образовательным программам высшего образования –  
программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в  
аспирантуре ИЭФ УрО РАН

Специальность 03.06.01 – «Физика и астрономия»

Екатеринбург  
2022

Программу составили:

г.н.с. ИЭФ УрО РАН  
член-корр.РАН

Некрасов И.А.

в.н.с. ИЭФ УрО РАН  
д.ф.-м.н.

Кучинский Э.З.

СОГЛАСОВАНО:

Зам. директора по НР ИЭФ УрО РАН  
д.ф.-м.н.

Болтачев Г.Ш.

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 г.

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

Кокорина Е.Е.

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 г.

Рабочая программа утверждена на заседании Учёного совета ИЭФ УрО РАН.  
Протокол № 4 от 29.06.2022 г.

Программа составлена с учётом Положения о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), утвержденной Постановлением Правительства РФ № 2122 от 30 ноября 2021 г. и на основе Федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, утверждённых приказом Министерства науки и высшего образования РФ № 951 от 20.10.2021 г. (зарегистрирован Министерством юстиции РФ 23.11.2021 г., регистрационный № 65943).

## 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. 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-третий курс
Аудиторные занятия, в т.ч.:			
Лекции	10	0,27	
Практические занятия (ПЗ)	8	0,22	
Самостоятельная работа	72	2	
Контроль самостоятельной работы	18	0,5	

## 4. Содержание дисциплины.

### 4.1. 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).	0,5		1	
2	Основная вычислительная задача зонных методов.	0,5		1	2
3	Водородоподобный атом.	0,5		6	2
4	Общие замечания к электронному строению многоэлектронных атомов.	0,5		2	2
5	Кристаллическая структура твёрдых тел (основные понятия).	1		6	2
6	Обратная решётка (основные понятия).	0,5		6	2
7	Приближение почти свободных электронов.	0,5		6	1
8	Метод сильной связи.	0,5		6	2
9	Обобщённый метод ЛКАО, двухцентровое приближение, интегралы Костера-Слетера.	0,5		6	1
10	Основы численных расчётов электронной структуры реальных веществ.	-	4	10	2
11	Основные программные пакеты для зонных расчётов электронной структуры кристаллических твёрдых тел.	-	4	10	2
12	Сверхпроводимость	5		12	
Всего час.		10	8	72	18

## **4.2. Содержание разделов дисциплины.**

### **4.2.1. 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.

### **4.2.2. 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).

#### **4.2.3. 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.

#### **4.2.4. 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.

#### **4.2.5. 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.

#### **4.2.6. 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).

#### **4.2.7. Приближение почти свободных электронов.**

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

#### **4.2.8. 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.

#### **4.2.9. 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.

#### **4.2.10. 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.

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

Метод присоединенных плоских волн (ППВ), псевдопотенциальные методы, метод линейаризованных 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.

#### **4.2.12. Основные физические свойства сверхпроводников.**

Критическая температура сверхпроводящего перехода и незатухающий постоянный ток. Подавление сверхпроводимости внешним магнитным полем. Эффект Мейсснера. Сверхпроводимость I и II рода. Тепловые свойства сверхпроводников – теплоёмкость, теплопроводность.

Термодинамика сверхпроводящего перехода в массивном сверхпроводнике. Свободная энергия цилиндрического образца сверхпроводника I рода в магнитном поле. Энтропия сверхпроводящего состояния. Различие характера сверхпроводящих переходов при наличии внешнего магнитного поля и в его отсутствии. Скачок теплоёмкости при сверхпроводящем переходе.

Лондоновская электродинамика сверхпроводимости. Сверхпроводящий ток и эффект Мейсснера в рамках уравнения Лондонов. Глубина проникновения магнитного поля. Основные физические представления двухжидкостной модели сверхпроводимости. Величина лондоновской глубины проникновения магнитного поля в рамках двухжидкостной модели.

#### **4.2.13. Электромагнитные свойства сверхпроводников I рода.**

Нелокальная связь между плотностью тока и вектором-потенциалом магнитного поля в сверхпроводниках. Длина когерентности. Промежуточное состояние сверхпроводника I рода в сильном магнитном поле. Промежуточное состояние для плоско-параллельной пластины в перпендикулярном магнитном поле. Критический ток в толстой проволоке из сверхпроводника I рода (правило Силсби). Промежуточное состояние в толстой проволоке с закритическим током.

#### **4.2.14. Теория Гинзбурга-Ландау (ГЛ) и электродинамика сверхпроводников II рода.**

Свободная энергия сверхпроводника в теории ГЛ. Дифференциальные уравнения ГЛ для параметра порядка и вектора-потенциала магнитного поля и их граничные условия. Характерные длины уравнений ГЛ – длина когерентности ГЛ, глубина проникновения. Параметр теории ГЛ  $\kappa$ . Градиентная инвариантность уравнений ГЛ.

Критический ток в тонкой плёнке. Квантование магнитного потока. Явление захвата магнитного потока в сверхпроводнике. Тонкая плёнка

в продольном магнитном поле. Энергия границы раздела между нормальной и сверхпроводящей фазами.

Границы применимости теории Гинзбурга-Ландау.

Физическая картина смешанного состояния в сверхпроводниках II рода. Второе критическое поле. Распределение напряженности магнитного поля вокруг изолированной вихревой нити и первое критическое поле. Взаимодействие вихрей и сила Лоренца. Критический ток в сверхпроводнике II рода, центры пиннинга и модель критического состояния. Резистивное состояние сверхпроводников II рода.

#### **4.2.15. Косвенное взаимодействие электронов через фононы.**

Физическая картина механизма притяжения электронов через колебания решётки. Причины ограничения эффективного интервала притяжения дебаевской частотой.

#### **4.2.16. Микроскопическая теория Бардина-Купера-Шриффера (БКШ).**

Феномен Купера. Куперовская модельная задача о притяжении двух электронов на фоне фермиевского газа невзаимодействующих электронов. Энергия связанного состояния двух электронов и его волновая функция. Неустойчивость основного нормального состояния в случае притяжения между двумя электронами.

Модельный гамильтониан БКШ. Волновая функция основного состояния в модели БКШ. Энергия основного состояния. Возбуждённые состояния в модели БКШ при нулевой температуре, каноническое преобразование Боголюбова и энергетическая щель в спектре элементарных возбуждений.

Модель БКШ при конечных температурах. Приближение среднего самосогласованного поля в гамильтониане БКШ и аномальные средние. Аномальные средние и самосогласованные уравнения для энергетической щели при конечных температурах в методе двухвременных температурных функций Грина. Критическая температура сверхпроводящего перехода и температурная зависимость энергетической щели. Термодинамический потенциал в модели БКШ, энтропия и скачок теплоёмкости.

#### **4.2.17. Сверхпроводимость с необычным спариванием.**

Особенности сверхпроводящих свойств высокотемпературных сверхпроводников и d-симметрия сверхпроводящей щели. Разложение спаривательного взаимодействия по плоским волнам в модели двумерной ферми-жидкости. Температура сверхпроводящего перехода и величина сверхпроводящей щели при нулевой температуре в модели БКШ с d-спариванием.



#### **4.2.18. Влияние прямого кулоновского отталкивания между электронами на сверхпроводящее состояние.**

Самосогласованное уравнение для энергетической щели в модели БКШ при учёте прямого кулоновского взаимодействия. Критическая температура сверхпроводящего перехода с учётом кулоновского отталкивания. Кулоновский псевдопотенциал и его влияние на показатель изотопического эффекта в сверхпроводниках.

#### **4.2.19. Незатухающий постоянный ток и энергетическая щель.**

Условие устойчивости сверхпроводящего конденсата при протекании электрического тока и оценка плотности критического тока из этого условия устойчивости. Сравнение полученной оценки плотности критического тока с плотностью критического тока распаривания в тонких сверхпроводящих плёнках.

#### **4.2.20. Слабая сверхпроводимость.**

Стационарный и нестационарный эффекты Джозефсона. Градиентно-инвариантная формулировка уравнения для плотности джозефсоновского тока во внешнем магнитном поле. Зависимость величины плотности сверхпроводящего тока узкого джозефсоновского контакта от внешнего магнитного поля. Проникновение внешнего магнитного поля в протяжённый джозефсоновский контакт и уравнение Феррела-Прейнджа для разности фаз сверхпроводящих параметров порядка в протяжённом контакте. Первое критическое поле протяжённого джозефсоновского контакта и джозефсоновские вихри. Двухконтактный сквид и его применение для измерения сверхмалых магнитных полей.

### **4.3. Самостоятельная работа аспирантов.**

4.3.1. Проработка лекционного материала по конспектам и учебной литературе (72 ч.).

4.3.2. Подготовка к контролю по дисциплине (18 ч.).

## **5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.**

### **5.1. 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>

**5.2. 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

**6. Материально-техническое обеспечение дисциплины.**

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